



## Témoignage d'entraide entre Яéciprociens

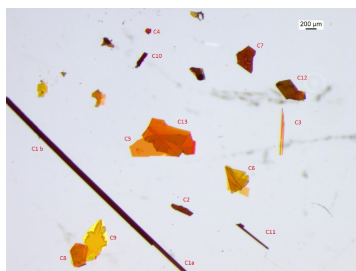
### LE RUBRÈNE

Le rubrène est la superstar des semi-conducteurs organiques pour les applications OFET (Organic Field Effect Transistors) et OLED (Organic Light-Emitting Diodes) grâce à sa mobilité à trous extraordinaire à température ambiante. Les scientifiques débattent depuis des décennies sur le mécanisme de transport des porteurs de charge dans ce composé, ce qui est compliqué par le fait que la mobilité dépend fortement de la température. Il y a deux décennies déjà une chute brutale de la mobilité était observée en dessous de 175 K, mais plusieurs études ont montré par la suite que rien ne semblait bouger dans la structure cristalline jusqu'à 10 K en dehors des phénomènes habituels de contraction thermique.

Nous avons eu l'idée de faire une étude cristallographique plus détaillée au rayonnement synchrotron (Elettra) avec des intervalles de 10 K entre 100 K et la température ambiante, et en mode recyclage : plusieurs descentes et plusieurs montées en température pour deux cristaux différents. Nous avons été capables de démontrer que la position relative de deux molécules reste stable jusqu'à 175-200 K, mais qu'en dessous de cette température un relâchement soudain a lieu, ce qui provoque un glissement relatif de 0.02 Å. Ce n'est pas beaucoup, mais grâce aux multiples enregistrements et affinements on a pu montrer que le petit glissement était reproductible.

Le manuscrit, complété par des calculs de NCI (Non-Covalent Interactions) et de dynamique moléculaire, a été rédigé et soumis au Journal of Physical Chemistry Letters. Après plusieurs aller-retour entre reviewers et auteurs, un-e reviewer réclamait un nouvel enregistrement DSC (Differential Scanning Calometry) pour démontrer la nature de la transition, à produire avant Noël 2021. Cette demande en début du mois de décembre a créé un peu de panique dans nos équipes, car nous n'étions pas en possession de la quantité de cristaux requise pour faire une bonne analyse thermique. Notre collaborateur chimiste à Bordeaux était à ce moment-là au lit - covidé -, mais il arriva quand-même, une fois sorti de son lit, à faire pousser la quantité de cristaux nécessaire pour la DSC. Les problèmes ne viennent jamais seuls, car il me semblait qu'il y avait deux types de cristaux dans le lot, ce qui pouvait perturber la DSC ; le polymorphisme est bien connu pour le rubrène. De plus, les deux diffractomètres pour mono-cristaux à Montpellier étaient à ce moment-là hors service. Que faire alors : de la diffraction sur poudre ou bien faire appel à un collègue Яéciprozien ? On n'osait pas trop broyer les cristaux et en plus ils étaient sous forme de plaques extrêmement minces, une condition peu favorable pour un diffractogramme de poudre de qualité.

Nos collègues Яéciprociens Michel Giorgi et surtout Grégory Excoffier (Spectropole, Marseille) nous sont venus en aide et ont analysé en un temps record une quinzaine de cristaux. Le verdict était qu'ils avaient tous la même maille orthorhombique (la structure attendue) et qu'il n'y avait pas de polymorphisme. Merci beaucoup à Michel et Grégory pour ce travail, car le manuscrit a été rapidement accepté après !



[crédit image : Grégory Excoffier]

*Arie van der Lee, Institut Européen des Membranes, Montpellier*

Pour plus de lecture :

*Temperature-dependent structural phase transition in rubrene single crystals : the missing piece from the charge mobility puzzle ?*  
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.1c03221>