



SPIC 2022 : Quatrième congrès national Sciences et Technologies des systèmes pi-conjugués
5-8 déc. 2022, Saint Malo 35407 (France)

Transport de charge 3D dans des molécules planaires à base de triazatruxène formant une phase colonnaire pontée

Jiang Jing,¹ Benoît Heinrich,² Alexis Prel,¹ Emilie Steveler,^{1*} Tianyan Han,¹
Ibrahim Bulut,³ Stéphane Méry,² Yann Leroy,¹ Nicolas Leclerc,³
Patrick Lévêque,¹ Martin Rosenthal,⁴ Dimitri A. Ivanov⁵ et Thomas Heiser¹

¹ *Laboratoire des sciences de l'ingénieur, de l'informatique et de l'imagerie (ICube), Université de Strasbourg, INSA Strasbourg, CNRS, UMR 7357, 23 rue du Loess, 67037 Strasbourg, France.*

² *Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS), Université de Strasbourg, CNRS, UMR 7504, 23 rue du Loess, 67034 Strasbourg, France.*

³ *Institut de Chimie et Procédés pour l'Energie, l'Environnement et la Santé (ICPEES), Université de Strasbourg, CNRS, UMR 7515, 25 rue Becquerel, 67087 Strasbourg, France.*

⁴ *European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Av. des Martyrs 71, Grenoble, France.*

⁵ *Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), CNRS, UMR 7361, 15 Jean Starcky, Mulhouse 68057, France, & Faculty of Chemistry, Lomonosov Moscow State University, GSP-1, 1-3 Leninskiye Gory, 119991 Moscow, Russia.*

* Email de l'auteur correspondant : emilie.steveler@insa-strasbourg.fr

La planéité des squelettes moléculaires conjugués est essentielle pour obtenir des mobilités de porteurs de charge élevées le long des directions d'empilement π des molécules, mais est souvent concomitante avec un mauvais transport de charge dans les autres directions. [1-3] C'est notamment le cas pour les molécules fonctionnalisées avec des chaînes alkyles qui garantissent une bonne solubilité mais introduisent des régions isolantes préjudiciables au transport de charges. Dans ce travail, nous montrons que des molécules planes et solubles, composées de deux unités de triazatruxène (TAT) liées à un cœur central de thiophène-thiényrroledione-thiophène (TPD), s'auto-assemblent en une structure originale qui permet un transport de charge efficace en 3D. Des études de diffusion de rayons X aux grands angles en incidence rasante de film et des expériences de micro-diffraction des rayons X sur des monocristaux révèlent que les dérivés TAT forment une mésophase nématique colonnaire dans laquelle les colonnes formées par l'empilement des unités TAT sont interconnectées par des ponts de TPD. Après recuit, une phase cristalline, issue de la mésophase hexagonale parente, est obtenue avec la direction d'empilement moléculaire orientée dans le plan du film. Les mesures de transport dans la phase cristalline révèlent une mobilité des trous hors du plan inhabituellement élevée de $0,17 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ et une limite inférieure pour la mobilité dans le plan de $0,05 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. Les résultats indiquent que les segments TPD qui relient les colonnes voisines de TAT facilitent le transport perpendiculairement à la direction d'empilement moléculaire, donnant lieu à une mobilité élevée dans les trois dimensions de l'espace.

Références

- [1] Z.-F. Yao, J.-Y. Wang and J. Pei, *Cryst. Growth Des.*, 18 (2018), 7.
- [2] I. Bulut, P. Chavez, A. Mirloup, Q. Hualmé, A. Hébraud, B. Heinrich, S. Fall, S. Méry, R. Ziessel, T. Heiser, P. Lévêque and N. Leclerc, *J. Mater. Chem. C*, 4 (2016), 4296.
- [3] S. Ya-Rui, W. Hui-Ling, S. Ya-Ting and L. Yu-Fang, *Cryst. Eng. Comm.*, 19 (2017), 6008.