



22 octobre 2009
Université du Québec à Montréal
Coeur des Sciences

Colloque **CQMF** **2009**

cqmf UQÀM NanoQAM

Colloque CQMF 2009 - Horaire

- 08h30 – 09h00** **Inscription et café – Grand Hall Pavillon Sherbrooke**
- 09h00 – 12h00** **Présentations orales – SH-2800**
Modérateur: Jérôme Claverie
- 09h00 – 09h15** Mot de bienvenue du vice-recteur à la recherche Yves Mauffette
- 09h15 – 10h15** Jean-Marie Lehn – ISIS Université de Strasbourg et Collège de France, Paris
« *Dynamic Functional Molecular and Supramolecular Materials* »
- 10h15 – 10h30** pause – café – Grand Hall
- 10h30 – 11h15** Mario Leclerc – Département de Chimie - Université Laval
« *Polymères conjugués: de la micro-électronique à la génomique* »
- 11h15 – 12h00** Carmel Jolicoeur – Département de Chimie – Université de Sherbrooke
« *Chimie et longévité du béton* »
- 12h00 – 15h00** **Dîner / Séance d’Affiches - Chaufferie/Agora**
- 12h00 – 13h00** Dîner
- 13h00 – 14h00** Posters (nombres impairs présentent) - café
- 14h00 – 15h00** Posters (nombres pairs présentent) - café
- 15h00 – 17h00** **Présentations orales – SH-2800**
Modérateur: Steen B. Schougaard
- 15h00 – 15h30** Dongling Ma – INRS – Énergie, Matériaux, Télécommunications
« *Synthesizing and Exploring Nanostructures for Biomedical and Energy Applications* »
- 15h30 – 16h00** Asmae Mokrini – Institut des Matériaux Industriels - CNRC
« *Alternative Materials and Manufacturing Technologies for preparation of Proton Exchange Membranes for Fuel Cell Applications* »
- 16h00 – 16h30** Stéphan Simard – Département de Chimie - UQAR
« *Utilisation de composés d’origine naturelle comme matériaux fonctionnels contre la corrosion.* »
- 16h30 – 17h00** Freddy Kleitz– Département de Chimie - Université Laval
Titre non confirmé
- 17h00 – 17h15** **Remise des prix Concours d’affiches - Chaufferie / Agora**
- 17h15 – 18h30** **Assemblée générale / Collation santé - Agora**

Colloque CQMF 2009

Présentations Orales

Dynamic Functional Molecular and Supramolecular Materials

Jean-Marie Lehn, ISIS, Université de Strasbourg and Collège de France, Paris

Supramolecular chemistry is intrinsically a *dynamic chemistry* in view of the lability of the non-covalent interactions connecting the molecular components of a supramolecular entity and the resulting ability of supramolecular species to exchange their components. The same holds for molecular chemistry when the molecular entity contains covalent bonds that may form and break reversibly, so as to allow a continuous modification in constitution by reorganization and exchange of building blocks. These features define a *Constitutional Dynamic Chemistry* (CDC) on both the molecular and supramolecular levels.

One may define *dynamic materials*, as materials whose components are linked through reversible covalent or non-covalent connections and undergo spontaneous and continuous change in constitution by assembly/deassembly processes in a given set of conditions. Because of their intrinsic ability to exchange their components, they may in principle select them in response to external stimuli or environmental factors and therefore behave as *adaptive materials* of either molecular or supramolecular nature.

Applying the previous considerations to polymer chemistry leads to the definition of *constitutionally dynamic polymers*, DYNAMERS, of both molecular and supramolecular types. They behave as dynamic combinatorial materials based on dynamic libraries whose constituents have a combinatorial diversity determined by the number of different monomers. The components effectively incorporated into the polyassociations depend on the nature of the connections (recognition or functional groups) and core groups as well as on the interactions with the environment, so that dynamers possess the possibility of adaptation by association/growth/dissociation sequences. The dynamic and combinatorial features of dynamic polymers give access to higher levels of behavior such as healing, adaptability response to external stimulants (heat, light, chemical additives, etc.).

Via recognition-directed association, self-assembly and self-organization processes, supramolecular chemistry has opened new perspectives in materials science towards the design and engineering of *supramolecular materials*. In particular, a *supramolecular polymer chemistry* has thus developed, concerning polymers of supramolecular nature generated by

the self-assembly of monomers interconnecting through complementary recognition groups. *Dynamic covalent polymers* may be generated by polycondensation via reversible chemical reactions. They may undergo modifications of their properties (mechanical, optical, ect.) via incorporation, decorporation or exchange of their monomeric components.

The above considerations will be illustrated by the presentation of several cases of supramolecular polymers and of dynamic, covalent polymers.

CDC introduces into the chemistry of materials a paradigm shift with respect to constitutionally static chemistry and opens new perspectives in materials science. A rich variety of novel architectures, processes and properties may be expected to result from the blending of supramolecular and molecular dynamic chemistry with materials chemistry.

General References

- Lehn, J.-M., *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*, VCH Weinheim, 1995.
- J.-M. Lehn, "Supramolecular Chemistry/Science – Some Conjectures and Perspectives", in *Supramolecular Chemistry: Where It Is and Where It Is Going* (R. Ungaro, E. Dalcanale, eds.), Kluwer, Dordrecht, 1999, pp. 287-304.
- Lehn, J.-M., *Dynamic combinatorial chemistry and virtual combinatorial libraries*, Chem. Eur. J., 1999, 5, 2455.
- Lehn, J.-M., *Toward complex matter: Supramolecular chemistry and self-organization*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2002, 99, 4763.
- Lehn, J.-M., *Toward self-organization and complex matter*, Science, 2002, 295, 2400.
- Lehn, J.-M., *Dynamers : Dynamic molecular and supramolecular polymers*, Prog. Polym. Sci., 2005, 30, 814.
- Lehn, J.-M., *From supramolecular chemistry towards constitutional dynamic chemistry and adaptive chemistry*, Chem. Soc. Rev., 2007, 36, 151.

Polymères conjugués: de la micro-électronique à la génomique

Mario Leclerc, Canada Research Chair on Electroactive and Photoactive Polymers CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

Les polymères conjugués suscitent beaucoup d'intérêt puisqu'ils combinent les propriétés des métaux ou des semiconducteurs à celles des polymères synthétiques. Par exemple, des piles solaires fabriquées à l'aide de dérivés du poly(2,7-carbazole) ont montré des efficacités de conversion énergétique de l'ordre de 6%. Cette classe de matériaux pourrait donc conduire à la mise en place de dispositifs photovoltaïques flexibles et imprimables ainsi que divers autres dispositifs électroniques plastiques. Par ailleurs, des polythiophènes luminescents et solubles dans l'eau ont permis une détection rapide, spécifique, ultra-sensible et directe d'ADN, d'ARN ou de protéines. Ce nouveau mécanisme de détection optique utilise les interactions électrostatiques entre un dérivé cationique du polythiophène et les charges négatives de sondes à base d'oligonucléotides. Cette méthode rend maintenant possible l'identification rapide de mutations génétiques, de gènes spécifiques ou de pathogènes.

Chimie et longévité du béton

Carmel Jolicoeur, Département de chimie, Université de Sherbrooke, 2500, Boulevard de l'université, Sherbrooke (Québec), Canada J1K 2R1

Le béton, un matériau commun s'il en est, affiche une excellente espérance de vie. À témoin, des vestiges d'ouvrages de génie fabriqués au temps des romains. À contrario, le béton est aussi très fragile. Il se fissure facilement; on dit de lui qu'il est un matériaux fabuleux.... entre deux fissures.

Il est également frileux: il se détériore très rapidement au gel. Heureusement il y a la chimie! Grâce à l'ajout de minéraux complémentaires au ciment et d'adjuvants chimiques fonctionnels, on peut améliorer considérablement la longévité du béton et la durée de vie utile des ouvrages. Ça semble pertinent?

Synthesizing and Exploring Nanostructures for Biomedical and Energy Applications

Dongling Ma, INRS - Énergie, Matériaux, Télécommunications, 1650 Boulevard Lionel-Boulet, Varennes, QC J3X 1S2

The use of near-infrared (NIR) quantum dots (QDs) for in vivo deep-tissue imaging is very attractive. However, it is still a challenge to synthesize bright, highly stable and biocompatible NIR QDs. Recently, we have synthesized high-quality PbS QDs in an organic phase via a simple, solventless, greener approach. In order to make them suitable for biomedical applications, amphiphilic molecules have been used as phase transferring agents. Through detailed investigation, it is found that the quantum yield and lifetime of transferred PbS QDs are very sensitive to the initial surface ligand structure. Under certain circumstances, significant structure deterioration after the phase transfer results in the complete loss of the photoluminescence of PbS QDs. By forming a compact, protective surface layer, the structural integrity has been maintained and the quantum efficiency as high as that of the initial PbS QDs in the organic phase has been achieved in the aqueous phase.

Our interesting results on the charge transfer behavior of PbS-based nanocomposites and on the enhanced stability of gold nanoparticles fabricated by a physicochemical approach will also be briefly highlighted.

Matériaux et Technologies de Fabrication Alternatives pour la Préparation de Membranes Échangeuses de Protons pour des Applications en Piles à Combustible

Asmae Mokrini, Institut des Matériaux Industriels – CNRC, 75, boulevard de Mortagne, Longueuil, Québec, J4B 6Y4 Canada

L'utilisation à grande échelle de la technologie des piles à combustible pourrait révolutionner de nombreux aspects de l'économie. Cette technologie favorisera le développement de moyens de transport et de systèmes de production d'énergie écologiques. Les travaux réalisés dans le groupe Systèmes Polymères Fonctionnels à l'Institut des Matériaux Industriels du CNRC, portent sur le développement de nouveaux matériaux fonctionnels et de procédés de fabrication pour la préparation d'électrolytes polymères pour des applications dans les piles à combustibles de type PEM (Proton Exchange Membranes). Plusieurs procédés à l'état fondu, tel que l'extrusion, le soufflage, le calandrage, le moulage par compression, sont utilisés pour la préparation de polymères et nanocomposite avancés. Ces procédés sont facilement mis à l'échelle pour une production de masse à faible coût, et en même temps génèrent des morphologies bien spécifiques qui confèrent aux matériaux des propriétés supérieures aux procédés utilisés habituellement.

Plusieurs approches sont utilisées pour réduire le coût et/ou améliorer les propriétés des électrolytes développés par rapport au matériau commercial de référence; le Nafion®. Des électrolytes polymères semi-fluorés ont été préparées à partir de matériaux commerciaux par extrusion réactive. Ces matériaux ont montrés des conductivités à température ambiante de $8 \cdot 10^{-2}$ S/cm lorsque totalement humidifiées, avec des performances en pile équivalentes au Nafion®, des propriétés mécaniques élevées (module de 20MPa et elongation à la rupture de 200%) et une durabilité en cycles d'hydratation/deshydratation de 6000 cycles. Les aspects de modification interfaciale et les liens morphologie/propriétés seront discutés.

D'autres travaux portant sur la synthèse de nanoparticules fonctionnelles pour l'amélioration du comportement des électrolytes à haute température et/ou faible humidité relative seront également présentés.

Utilisation de composés d'origine naturelle comme matériaux fonctionnels contre la corrosion.

Stéphan Simard, Département de biologie, chimie et géographie, Université du Québec à Rimouski, C. P. 3300, succ. A , Rimouski (Québec) Canada G5L 3A1

La corrosion des métaux de transition causée par les espèces chimiques répandues dans l'environnement constitue encore aujourd'hui une problématique de taille. Des métaux comme le fer, le nickel et le cobalt sont largement utilisés dans la composition d'alliages ou de matériaux composites exposés à l'environnement. Bien que ces métaux présentent des avantages structuraux et économiques importants, ils restent sensibles à la corrosion en milieu aqueux. L'utilisation de moyens de protection contre la corrosion tels l'usage de peintures ainsi que d'inhibiteurs peuvent s'avérer efficaces mais préjudiciables pour l'environnement. Toutefois, certaines substances organiques d'origine naturelles telles les polysaccharides et les acides aminés qui portent des groupements polaires peuvent avoir d'importantes interactions avec les surfaces métalliques et agir comme inhibiteurs de corrosion. Dans ce contexte, nous avons étudié l'influence de la présence de composés d'origine naturelle dont les polysaccharides, les acides aminés et les fractions peptidiques comme matériaux fonctionnels contre la corrosion de métaux de transition en milieux chlorurés et acides. Les composés étudiés se sont avérés efficaces pour réduire la corrosion des métaux. Dans certains cas, leurs performances pouvaient même se comparer à celles d'inhibiteurs de synthèse tels le benzotriazole.

Titre non confirmé

*Freddy Kleitz, Chaire de recherche du Canada en matériaux fonctionnels nanostructurés,
Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec),
Canada G1V OA6*

Contenu du résumé non reçu au moment de l'impression.

Colloque CQMF 2009

Affiches

A-1 : Nouvelle stratégie pour le design et la synthèse de nano-objets organiques.

Matthieu Arsenault, CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

Ce projet de doctorat vise à créer une nouvelle famille de nanostructures. Il s'agit de cavités dendritiques entièrement covalentes dont on pourra contrôler précisément la forme. Pour construire ces nanostructures, trois étapes clés sont nécessaires. La première consiste en la synthèse en parallèle de dendrons rigides (polyphényles) ou flexibles (poly(amidoamines), PAMAM). Ceux-ci sont ensuite liés à des molécules de cœurs contenant des liens esters. La seconde étape vise à réticuler l'extérieur des dendrons de façon intramoléculaire. Plusieurs méthodes de réticulations sont explorées : Métathèse par ouverture de cycle (ROMP), réaction radicalaire, chimie "click", etc. Troisièmement, on hydrolysera les liens esters au centre du dendrimère réticulé pour en retirer le cœur. On obtiendra alors une cavité dendritique. En modulant sa rigidité, nous serons en mesure d'étudier la relation entre le choix de la molécule de cœur et la forme finale de la cavité. Ces nanostructures ouvrent la porte à plusieurs applications, notamment en catalyse uniquement basée sur la forme des substrats et non leur groupes fonctionnels. D'autres travaux sont en cours, tirant profit de notre expertise en dendrimère, pour créer des nanostructures tubulaires hydrosolubles pour des applications thérapeutiques.

A-2 : Synthèses et chimie de coordination de dérivés de chitosane comme support catalytique chiral soluble

Babin M.^{1,2}, Fontaine F-G.², Gagnon J.^{1,2}

1. *Département de biologie, chimie et géographie, Université du Québec à Rimouski, C. P. 3300, succ. A, Rimouski (Québec) Canada G5L 3A1*

2. *Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6*

Combiner la réactivité et la sélectivité du catalyseur homogène avec la récupérabilité du catalyseur hétérogène est un enjeu important dans le domaine de la catalyse. Le coût important des métaux de transition motive la récupération des catalyseurs, principalement réalisée par leur immobilisation sur des supports polymériques. Le chitosane est un homopolymère naturel abondant, très peu coûteux et qui possède une chiralité intrinsèque. Son utilisation comme support catalytique chiral nécessite au préalable des modifications chimiques sélectives et homogènes, afin de rendre le polymère soluble. Les polyligands solubles ainsi obtenus ont été utilisés dans la formation de complexes de ruthénium(II) et de rhodium(I) dont les degrés de substitution obtenus sont d'environ 0.5. L'activité de ces complexes pour l'hydrogénation catalytique de cétones prochirales a été étudiée. Les résultats RMN obtenus indiquent une structure dynamique pour le complexe ionique de N-benzylsulfonatechitosane. La dégradation de ce polyligand lors de l'hydrogénation catalytique a été observée. Toutefois, un second complexe de 6-O-pivaloylchitosane, dont la structure s'avère statique par RMN, démontre une activité catalytique accompagnée d'un léger excès énantiomérique.

A-3 : Température de transition vitreuse du massif et de surface du polyméthacrylate de méthyle déterminée par simulation atomistique

Alexandre Beaudouin, Nouredine Metatla et Armand Soldera, Département de chimie, Université de Sherbrooke, 2500, Boulevard de l'université, Sherbrooke (Québec), Canada J1K 2R1

La transition vitreuse (T_g) reste à ce jour l'un des grands mystères de la nature et une controverse majeure dans le domaine des polymères. Plusieurs facteurs affectent sa valeur tels que la rigidité et la tacticité de la chaîne de polymère, les interactions au sein du matériau et la morphologie (massif vs films nanométriques). Au niveau expérimental, l'origine moléculaire des variations de T_g ne sont que partiellement comprises. La simulation atomistique (SA) permet de jeter un regard complémentaire sur le problème puisqu'elle donne accès à des informations au niveau atomique. Il faut cependant qu'au préalable les données de simulation soient conformes aux résultats expérimentaux. Ainsi, la mise au point d'une procédure de corrélation T_g simulée – T_g expérimentale au sein du laboratoire Soldera a permis de mettre en évidence la différence de T_g induite par la tacticité de la chaîne de PMMA (isotactique et syndiotactique). Dans ce poster, la méthode est appliquée aux films de PMMA de tacticité différente. Il est alors montré qu'elle permet de discerner une différence de T_g induite par la morphologie de film et ce pour les deux isomères. Cette différence se révèle plus grande pour l'isomère syndiotactique. Il est également montré que cette différence tend à s'amenuiser, voire disparaître, pour les masses moléculaires les plus faibles, ce qui est conforme aux données expérimentales.

A-4 : Synthesis and crystallization of rigid-flexible aromatic polyetherketones with controlled rigid segment lengths

J-M Benoit, A. Benhalima, J. Brisson, CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V 0A6

Although controlled or living polymerization of flexible chains is well established, controlling polymerization of rigid monomers, which are often synthesized by polycondensation, remains a challenge. Based on the work of Hayakawa et al., the synthesis of aromatic polyetherketones will be presented. Short rigid segments were obtained and further polymerized in the presence of aliphatic chains to yield rigid-flexible aromatic polyetherketones. The flexible lengths are very small and each of a specific size. These polymers are also called 'hinged copolymers' since they tend to chainfold along the aliphatic chain, which acts as a hinge without observable phase segregation.

In the present study, we synthesize different lengths of aromatic polyetherketones of known weight and similar structure. The aromatic structures are used as the rigid part of the polymer, whereas aliphatic chains of different lengths ranging from 3 to 10 methylene units serve as the flexible segments. These segment sizes were chosen to favor the formation of chainfolded crystals. The resulting polymers were crystallized and analyzed using X-ray diffraction. The effect of flexible and rigid chain length on resulting crystal morphology, crystallinity and crystal form will be discussed.

A-5 : Synthèse de fullerènes cationiques et polyhydroxylés et étude de leurs interactions avec des membranes modèles de E.Coli et d'érythrocytes.

Patrick Brisebois, Yoann Chabre, Alexandre A. Arnold, René Roy* et Isabelle Marcotte*,
Département de Chimie, PharmaQAM/NanoQAM, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

Nous cherchons à évaluer le potentiel antibiotique de fullerènes cationiques et polyhydroxylés ainsi que leur toxicité pour les cellules humaines. Pour ce faire, le groupe du Pr. Marcotte étudie les interactions de ces fullerènes avec des membranes modèles de E. coli et d'érythrocytes à l'aide de techniques spectroscopiques. Les résultats préliminaires démontrent un abaissement de la température de changement de phase gel-liquide cristalline des membranes modèles de bactéries en présence de fullerènes polyhydroxylés (C₆₀(OH)₂₄), tandis que ces nanoparticules ont un effet moins marqué sur les membranes d'érythrocytes.

Le groupe du Pr. Roy a récemment synthétisé un fullerène polycationique original contenant environ 24 fonctions ammoniums chargées positivement en périphérie du C₆₀, le C₆₀(OCH₂CH₂NH₃⁺Cl⁻)_{~24}. Cette nanoparticule est synthétisée en 3 étapes à partir du fullerène commercial avec un rendement total de 54%. La réduction des azotures en amine primaire dans les conditions de Staudinger est quantitative et le fullerène polyaminé est isolé sous la forme de chlorure d'ammonium très soluble en milieux aqueux. La caractérisation complète de cette nanoparticule est en cours.

A-6 : Synthèse et caractérisation d'un nanotube organique

Katy Cantin, CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

Avec le récent succès des nanotubes de carbone, les chercheurs ont été encouragés à développer des méthodes de synthèse pour obtenir des nanotubes organiques et ce, dans le but de les utiliser dans différents domaines. Les stratégies utilisées aujourd'hui produisent des nanotubes avec des architectures cinétiquement instables ce qui limitent l'utilisation de ceux-ci. Pour contrer ce problème, nous avons synthétisé un nanotube organique qui n'a que des liens covalents à l'aide d'un gabarit détachable. Plus spécifiquement, nous avons synthétisé un macrocycle de type phénylacétylène fonctionnalisé. La polymérisation du centre de ce macrocycle a produit un cylindre sous forme de polyrotaxane. Nous avons ensuite ajouté des dendrons réticulables. Ces dendrons ont été par la suite réticulés, pour permettre aux macrocycles d'être liés ensemble non seulement par le centre, mais aussi à la périphérie du cylindre. Finalement, nous avons retiré le centre pour obtenir notre nanotube rigide et stable. Dans cette présentation, nous allons présenter la synthèse et la caractérisation de ce nanotube organique.

A-7 : Electrochemical characterization of air-breathing DMFC cathodes under flooding conditions

Francesca Capitanio, A.C. Tavares, INRS 1650, boulevard Lionel-Boulet, Varennes (QC), J3X 1S2

Air-breathing DMFCs are applicable to portable devices. However, their performances are limited by the fast flooding of cathodic porous structure. A series of Pt/C on C-cloth electrodes is characterized in 0.5M H₂SO₄ to quantify the activity of cathodes operating under flooding conditions. The Pt loading is 3 mgcm⁻² and the binder content varies between 15/0-0/15wt% Nafion/Teflon with respect to Pt. The electrodes are prepared by spraying deposition. The characterization includes cyclic voltammetry, impedance spectroscopy (EIS) and the study of oxygen reduction reaction (ORR). Despite the different compositions, all electrodes show similar Pt utilization, so any difference in the cathodes' performance is attributable to variations of their hydrophilic character and/or in their morphology. EIS reports higher double-layer capacitance for the electrode with higher wettability, but PTFE-electrode has the lowest ionic resistance. This suggests a thinner and maybe more porous catalyst layer for PTFE-electrode. ORR studies show the importance of PTFE binder reporting the highest limiting-current and the smaller thickness of the diffusion layer for PTFE-electrode. The half cell results are confirmed by the DMFC characterization. However, a morphological characterization will follow to quantify the porosity/compactness of the electrodes.

A-8 : Synthèse et étude d'inhibiteurs de la lectine PA-IL de *Pseudomonas aeruginosa*

Yoann M. Chabre^a, D. Giguère^a, B. Blanchard^b, J. Rodrigue^a, M. Neault^a, S. Rocheleau^a, A. Papadopoulos^a, A. Arnold^a, A. Imberty^b, René Roy^{a*}, [a] Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8, [b] Centre de Recherche sur les Macromolécules Végétales, CERMAV-CNRS (UPR5301, Université Joseph Fournier/ Membres de l'Institut de Chimie Moléculaire de Grenoble), BP 53, F-38041, Grenoble Cedex 9, France.

L'infection par la bactérie ubiquitaire gram-négative *Pseudomonas aeruginosa*, hautement résistante aux traitements antibiotiques, constitue la principale cause de mortalité chez les patients immunodéprimés ou atteints de fibrose kystique (FK). A l'instar de nombreux processus infectieux, des lectines solubles spécifiques telles que PA-IL et PA-III, présentes chez cette bactérie sont impliquées dans l'adhésion bactérienne par l'intermédiaire d'interactions entre ces protéines solubles et les hydrates de carbone des tissus hôtes. Il devient donc crucial d'évaluer les phénomènes de reconnaissance moléculaire mis en jeu afin d'empêcher l'infection. Plus particulièrement, la lectine PA-IL, reconnaissant spécifiquement des ligands de type D-galactose a fait l'objet de notre étude. Ainsi, une famille d'inhibiteurs stables et fonctionnalisés de type C-galactosides contenant un aglycone aromatique reconnu pour renforcer l'interaction ligand-recepteur a été élaborée. L'attachement covalent du meilleur ligand monovalent sur diverses architectures multivalentes par cycloaddition dipolaire catalysée a ensuite été envisagé afin d'évaluer l'«effet dendritique». L'activité biologique des C-galactodendrimères synthétisés et contenant jusqu'à 27 unités saccharidiques a été évaluée en ELLA et en ITC, permettant l'accès à des valeurs d'IC50 dans le bas μM et de K_d de l'ordre du nM pour les meilleurs candidats. Des études complémentaires de diffusion en RMN et de modélisation moléculaire ont permis de déterminer leur taille et leur topologie pour mieux comprendre le mode d'interaction de ces molécules synthétiques avec la PA-IL. A terme, nous espérons développer des outils moléculaires nécessaires à la compréhension de l'implication de la PA-IL dans l'infection par *P. aeruginosa* et la formation de biofilms en plus de proposer des inhibiteurs synthétiques efficaces.

A-9 : Propriétés électrochimiques et optiques de gels rédox pour une application en pile solaire

Nathalie Chamberland, Livain Breau et Benoît Marsan, Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

Notre laboratoire travaille à la conception d'une cellule photovoltaïque électrochimique dont la configuration est $n\text{-CuInS}_2$ (film mince) | couple redox thiolate/disulfure incorporé dans un gel | verre conducteur (ITO)-CoS. La synthèse de deux nouvelles espèces thiolates (forme réduite), soit le 4-cyanobenzène thiolate de potassium et celui de tétraméthylammonium, a été mise au point. Chacun des thiolates a été mélangé avec la forme disulfure (espèce oxydée) pour former les couples redox A et B. Ces couples ont été étudiés dans deux milieux, soit le mélange de solvants DMF/DMSO (60/40) avec 0,2 M de TBAP (1) et le liquide ionique $\text{EMI}^+\text{TFSI}^-$ (2). Les propriétés électrochimiques, étudiées par voltampérométrie cyclique (Pt), ont permis d'optimiser les rapports forme réduite : forme oxydée et leur concentration dans les deux milieux. L'ajout de 20 % massique de fluorure de polyvinylidène (PVDF) aux électrolytes dans le milieu (1) et de 7 % à ceux du milieu (2) ont permis d'obtenir des gels ayant des propriétés électrochimiques comparables à celles des électrolytes liquides. Les mesures de résistance ont permis de constater une légère baisse de la conductivité des gels par rapport aux milieux liquides correspondants. La viscosité accrue des gels affecte le coefficient de diffusion des espèces électroactives. Le PVDF étant un polymère incolore, les gels électrolytiques possèdent les mêmes propriétés optiques que ceux des milieux liquides.

A-10 : Carbon based transparent electrodes for organic electronic devices

Tarun Chari, NanoQAM, Département d'Informatique, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

Finding replacement materials for indium tin oxide's (ITO) as a transparent electrode could have benefits in cost and application such as flexible displays. One such material is carbon in different structures such as carbon nanotubes (CNT) and graphene. CNT)and graphene electrodes have been used, independently, in lieu of ITO with varying results. Here, CNTs and graphene are mixed to produce a transparent electrode and the results of this on-going research are presented. Fabrication of CNT electrodes is well established whereas fabrication of graphene is substantially more arduous. Therefore, a significant aspect to this research project is the fabrication of large area graphene films using a chemical solution processable method. Various different fabrication methods were attempted with varying results and will be presented.

A-11 : Étude des propriétés de photo-électroluminescence des systèmes hybrides PFO/CdSe(ZnS) et PFO/InP pour application dans des dispositifs émetteurs dans le bleu

H. Cherfouh, B. Marsan* et R. Izquierdo**, * NanoQAM, Département de Chimie, **NanoQAM, Département d'Informatique, ** Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8*

Dans ce travail, les propriétés de photo-électroluminescence des systèmes hybrides PFO/CdSe(ZnS) et PFO/InP sont étudiées. Pour un faible taux d'incorporation (≈ 20 wt. %) de CdSe(ZnS), les propriétés du système PFO/CdSe(ZnS) sont dues uniquement au polymère. Pour des taux d'incorporation élevés (≈ 50 wt. %), les propriétés d'émission sont dues au PFO et aux nanoparticules. D'autre part, les performances des diodes de configuration ITO/PEDOT:PSS/PFO:CdSe(ZnS)/LiF/Al dépendent aussi du taux d'incorporation des nanoparticules. Dans ces systèmes, PEDOT:PSS constitue la couche d'injection de trous et PFO, la couche émettrice de lumière. Les meilleures performances sont obtenues avec un taux d'incorporation de 20 wt.% CdSe(ZnS); l'efficacité lumineuse est alors de 0,70 cd/A, valeur qui est deux fois supérieure à celle de la diode non-hybride. Ce résultat s'explique par la présence de nanoparticules dans la matrice de polymère PFO qui favorisent l'injection et le transport des électrons dans la couche active. Par ailleurs, les caractéristiques Densité de courant-Tension du système composite ITO/PEDOT:PSS/PFO:InP/LiF/Al présente un comportement de diode. Pour ce qui est de la courbe Luminance-Tension, cependant, celle-ci n'est pas caractéristique d'une diode organique électroluminescente. Ce résultat est lié à l'absence d'émission de l'InP causée par l'oxydation des nanoparticules, notamment en In₂O₃. Les particules d'InP ont été synthétisées dans notre laboratoire par une nouvelle méthode colloïdale.

A-12 : On the Ability of Imatinib Mesylate to Inhibit Smooth Muscle Cell Proliferation Without Delaying Endothelialization

Pascale Chevallier, Karine Vallières^{1,2}, Éric Petitclerc², Gaétan Laroche^{1,2}

(1) CERMA, Département de génie des mines, de la métallurgie et des matériaux, Université Laval, 1065, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada, G1V 0A6

(2) Centre de recherche du CHUQ, Hôpital Saint-François d'Assise, 10 rue de l'Espinay, Québec, Qc, Canada, G1L 3L5

Restenosis, the re-occlusion of a diseased vessel following a surgical intervention, is a major cause of failure of angioplasty, stenting, and bypass grafting with natural and synthetic vessels. In healthy vessels, the endothelium exerts a control over smooth muscle cell (SMC) proliferation and migration. Unfortunately, revascularization procedures damage the endothelium of natural vessels and bypass vessels are completely devoid of endothelial cells. Many strategies have been developed to inhibit SMC proliferation and reduce intimal hyperplasia, yet most of the drugs tested thus far simultaneously inhibit endothelialization and do not selectively target SMCs. The ideal biological agent should have anti-proliferative effects on SMCs while preserving vascular healing and endothelialization so as to prevent late thrombosis. Imatinib mesylate is a specific inhibitor of three tyrosine kinase receptors, two of which, PDGF-R and c-Kit, are implicated in the pathogenesis of intimal hyperplasia. In this study, we investigated in vitro the potential of imatinib mesylate to inhibit SMCs and its effect on ECs by proliferation assays which were performed on SMCs and ECs with different concentrations of imatinib mesylate. Experiments demonstrated that imatinib mesylate inhibited intimal hyperplasia without delaying neo-endothelialization. This drug is particularly promising because it not only inhibits smooth muscle cells growth specifically but it also stimulates re-endothelialization.

A-13 : Solution processed top emission OLED with transparent carbon nanotubes electrodes

Yu-Mo Chien, NanoQAM, Département d'Informatique, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

Top emission organic light emitting diodes with carbon nanotubes (CNTs) as top electrodes were fabricated and characterized. Devices were fabricated on glass substrates with evaporated bottom Al/LiF cathodes, spin coated organic emissive layer and PEDOT-PSS hole injection layer. Transparent thin carbon nanotubes films were deposited on top the emission layer to form the anode by micro-contact printing with a polydimethylsiloxane stamp. A very good device performance was obtained with a peak luminance of 3588 cd/m² and a maximum current efficiency of 1.24 cd/A. This work shows the possibility for using CNTs as transparent electrodes to replace ITO in organic semiconductor devices. Furthermore, the top emission nature of such devices offers a broader range of applications of CNTs onto any types of substrates. By combining with the solution processed organic materials, it is anticipated the lower cost fabrication will be possible through roll-to-roll manufacture.

A-14 : Élaboration de revêtements à base d'éthylène et de monomères polaires

Jean-Christophe Daigle, NanoQAM, Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

La polymérisation de l'éthylène avec des monomères polaires à l'aide de catalyseur d'aryl sulfonate de palladium, tolérant aux fonctions polaires et à l'eau, permet l'élaboration de revêtements ayant des propriétés physico-chimiques modulables en fonction du monomère polaire utilisé et de son taux d'insertion dans la chaîne polymérique. Le laboratoire Claverie a travaillé sur des revêtements à base de norbornène afin de créer des enduits anti-corrosion ayant un point de fusion très élevé. Ces polymères peuvent soit être synthétisés en solvant organique ou en mini-émulsion. Deux autres revêtements ont été fabriqués avec le N-isopropylacrylamide (NIPAM) et le N-vinyl 2-pyrrolidinone (NVP). L'incorporation d'un de ces deux monomères permet de rendre la surface plus hydrophyle et de diminuer de façon significative le point de fusion du polymère. En plus, nous avons déjà démontré la synthèse de polymère E-co-Acrylate en milieu organique ou aqueux.

A-15 : Synthesis of the scorpionate ligand Tris(3,5-diisopropylpyrazolyl)hydroborate and scorpionate ligand Tris(3-methyl-5-phenylpyrazolyl)hydroborate with preparation and characterization of ultramicroelectrodes of platine with a ring disk of gold

P. D. Ducharme, M. A. Mezour, J. Mauzeroll and S. B. Schougaard, NanoQAM, Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

Scorpionates are potential lithium ion battery material candidates that could replace the toxic and expensive cobalt oxide cathode currently employed. The scorpionates would serve in the cathode as the charge storage unit. However, before these molecules can be introduced into batteries, a more detailed understanding of their electrochemistry is required. For example, it is not well understood why the square plane complex $Bp_2Ni(II)$ (scorpionate nickel complex) exhibit irreversible electron transfer, when the octahedral $Tp_2Ni(II)$ does not. Herein, a dual sensor comprised of a platinum disk/gold ring ultramicroelectrode is designed and characterised. This sensor will be used in later studies to establish if the degradation of the scorpionate complexes occurs following the oxidation. Given the small diffusion paths between the disk and ring electrodes, it will be possible to quantify the degradation rate of the complexes using the proposed dual electrochemical sensor.

A-16 : Adsorption de l'hydrogène dans les nanotubes de carbones et les MOFS - Étude par la méthode Monte Carlo Grand Canonique Quantique

David Durette, Institut de recherche sur l'hydrogène, Université du Québec à Trois-Rivières, C.P. 500, Trois-Rivières (Québec) Canada G9A 5H7

Nous présentons des simulations par la méthode MCGC Quantique basée sur l'approche des intégrales de parcours pour étudier les processus d'adsorption de l'hydrogène avec des faisceaux de nanotubes de carbone et des MOFs (MOF-1 et CuBTC) en utilisant des conditions frontières périodiques. Nous utilisons un potentiel Lennard-Jones (LJ) 6-12 est utilisé pour simuler les interactions H₂-H₂ et H₂-Nanotube et le potentiel OLPS-AA pour les interactions H₂-MOF. Le potentiel de Goddard est présentement aussi étudié. Le volume libre et la surface accessible sont également mesurés.

A-17 : Impact de l'agglomération sur les propriétés relaxométriques des nanoparticules d'oxyde de gadolinium comme agent de contraste en IRM

Luc Faucher, Centre de recherche du CHUQ, Hôpital Saint-François d'Assise, 10 rue de l'Espinay, Québec, Qc, Canada, G1L 3L5

L'imagerie par résonance magnétique (IRM) est une technique d'imagerie médicale non invasive qui permet de faire des diagnostics de haute résolution. Le signal en IRM provient de la relaxation des protons ^1H . Afin d'améliorer la différenciation tissulaire, il est souvent nécessaire d'augmenter le signal de certains tissus ou organes. Actuellement, 30% des examens cliniques sont effectués avec des agents de contraste. Les plus utilisés sont les chélates de gadolinium qui sont des agents de contraste "positifs-T1" puisqu'ils augmentent le signal des protons. Cependant, dans le cadre de l'imagerie cellulaire, ces chélates ne peuvent être utilisés comme traceurs *in vivo* puisqu'ils ne sont pas efficacement internalisés dans les cellules. Il s'agit d'une application particulière pour laquelle l'utilisation des nanoparticules ultra fines d'oxyde de gadolinium (Gd_2O_3) est envisagée. Ces nanoparticules peuvent être internalisées et retenues efficacement dans les cellules, ce qui améliore le contraste des images pondérées en T1. Cependant, une fois internalisées dans les cellules, les nanoparticules tendent à s'agglomérer dans les endosomes. Cette étude a donc été entreprise pour évaluer l'impact de l'agglomération sur les propriétés relaxométriques des nanoparticules de Gd_2O_3 .

A-18 : Fonctionnalisation de la surface des faujasites par greffage de groupe sulfonique pour des applications dans les piles à combustible.

Valeria Felice, INRS-EMT, 1650 boulevard Lionel-Boulet, Varennes (QC) J3X 1S2

Grâce à leur composition, structure tridimensionnelle, porosité élevée ainsi qu'à la facilité de la modification chimique de leur surface, les faujasites ont un énorme potentiel en tant que matériaux pour membrane dans les piles à combustible. Cependant, la conduction protonique des faujasites n'est pas assez élevée pour cette application.

L'objectif de cette étude consiste à optimiser la procédure de greffage de groupe sulfonique à la surface de zéolites, enfin d'améliorer leur conduction protonique.

Le greffage de 3-mercaptopropyltriméthoxysilane, suivi de la conversion du groupe -SH en -SO₃H en utilisant H₂O₂, a été choisi pour modifier la surface des zéolites. Plusieurs paramètres (quantité précurseur (3-89wt.%), temps de greffage et d'oxydation (1.5-18h), compositions et porosité initial des faujasites) ont été corrélés à la quantité de silane agrafée, à la modification de les propriétés texturales, à l'adsorption d'eau et méthanol ainsi qu'à la conduction protonique des faujasites modifiés.

Dans nos conditions expérimentales, une amélioration d'un facteur 10 de la conductivité protonique a été observée malgré une réduction élevée de la porosité ainsi que de l'absorption d'eau.

Nos travaux de recherches sont présentement dévolus à optimiser le recouvrement de la surface des zéolites avec le silane tout en préservant leur haute porosité.

A-19 : Influence of the size on the electrochemical stability of Pt nanoclusters

Sébastien Garbarino, INRS-EMT, 1650 boulevard Lionel-Boulet, Varennes (QC) J3X 1S2

In heterogeneous catalysis, use of nanoparticles ensures a large contact area between the active material and the reactant phase. Moreover, catalytic properties of a particular material can be dramatically influenced by the particle size. In the fuel cell technology, one of the key issues is to increase the specific activity and the durability of the noble metal catalyst electrodes. In today's Polymer Electrolyte Fuel Cell (PEFC), platinum nanoparticles anchored on high surface carbon are mostly used.

The aim of the present work is to demonstrate how the electrochemical stability of Pt nanoparticles varies with their size. Platinum nanoparticles of different size (< 10 nm) were prepared using pulsed laser deposition (PLD). The mean size of Pt clusters deposited on highly oriented pyrolytic graphite (HOPG) substrates was estimated using Scanning Tunneling Microscopy (STM) and was found to be strongly correlated to the number of laser pulses. The mean particle size was estimated, using the Pt 4f binding energy shift (ΔBE) observed in XPS experiments. The electrochemical stability of the platinum nanoparticles was found to be dependent of the imposed anodic potential limit and of the initial platinum cluster size.

A-20 : Nanoparticules de silice mésoporeuse pour le traçage des cellules en IRM

Rémy Guillet-Nicolas, CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

Le but de ce projet est de développer de nouveaux agents de contraste "positifs" pour l'IRM. Pour cela, nous synthétisons des nanoparticules mésoporeuses dans lesquelles sont insérées des

des nanoparticules d'oxyde de gadolinium (Gd_2O_3) ultrafines. Il est possible de contrôler la morphologie des particules, ainsi que la taille des pores afin d'obtenir des surfaces spécifiques et des volumes poreux élevés. L'utilisation de ces supports biocompatibles permet d'offrir un contact optimal entre les ions de Gd et les protons. Ceci est l'un des paramètres clés de l'efficacité d'un agent de contraste en IRM. Dans ce projet, une attention particulière a tout d'abord été portée à la taille des particules, afin de synthétiser les supports sous forme de nanosphères de silice de 75 à 200 nm de diamètre. Cette taille devrait favoriser l'ingestion cellulaire. Puis, l'insertion de précurseur de Gd dans les pores des silices est réalisée grâce à différentes techniques d'imprégnation et l'oxyde est ensuite formé dans les pores par calcination à 700°C. Ce nouveau système (silice + Gd_2O_3) a été caractérisé par plusieurs méthodes (TEM, MEB, DRX, physisorption d'azote, DLS, IRM, ICP-MS, etc.). Les premiers résultats montrent clairement que le système est stable en suspension d'eau nanopure pour de faibles chargements en Gd et produit un contraste positif prometteur pour des applications en IRM.

A-21 : Effect of Ball-Milling on the Physical and Electrochemical Properties of Lead Dioxide

Claudine Hamel, NRS-EMT, 1650 boulevard Lionel-Boulet, Varennes (QC) J3X 1S2

Récemment, le dioxyde de plomb a trouvé des applications dans les supercapacités électrochimiques hybrides à base de carbone/PbO₂. Dans ces systèmes, le carbone activé est utilisé comme électrode négative alors que PbO₂ constitue l'électrode positive. Pour que la densité de puissance de ces dispositifs hybrides soit intéressante, les deux électrodes doivent pouvoir soutenir des taux de charge/décharge rapides sans qu'il n'y ait de perte de densité d'énergie. Toutefois, les performances des dispositifs hybrides carbone/PbO₂ sont limitées par la capacité de l'électrode de PbO₂ à remplir ces exigences, le tout étant lié à la faible utilisation du PbO₂. En conséquence, le taux d'utilisation du PbO₂ doit être augmenté afin d'optimiser les performances.

Un moyen pour «activer» une grande quantité de PbO₂ est de la nanostructurer. La nanostructuration du PbO₂ conduit à une augmentation d'environ 30% de la capacité spécifique d'un accumulateur au plomb tout en améliorant sa cyclabilité et sa durée de vie [1]. Le broyage mécanique à haute énergie est une technique efficace pour nanostructurer un matériau. Dans la présente étude, nous rapportons l'utilisation du broyage mécanique à haute énergie afin de synthétiser des nanocristallites de PbO₂.

[1] J. Morales et al, *Electrochemical and Solid-State Letters*, 7, A75 (2004).

A-22 : CO₂ capture by alkanolamine/ionic liquid microemulsion system equipped with micro-fluidic channels detector for in-situ screening:

Muhammad Hasib-ur-Rhaman, M. Sijaj, F. Larachi, Département de Génie chimique, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

It is vital to develop viable CO₂ capture processes especially for large point sources involved in power generation. The major contributing factor is the regeneration step in case of chemical solvent systems. One feasible process may be the replacement of aqueous media with some stable solvent. Ionic liquids, with high stability and negligible vapour pressure even at elevated temperatures, are emerging as promising candidates. Scheming microemulsions with hydrophobic room-temperature ionic liquids (RTILs) as continuous phase bearing dispersed alkanolamine droplets may provide a potential opportunity with less CO₂ capture cost and enhanced stability. This will not only alleviate the corrosion problems but will also suppress the oxidative degradation of aqueous amines. The insolubility of the capture product (carbamate) in the continuous phase will further facilitate the chemical capture to continue at higher rate by overcoming the equilibrium limitations and will thus provide the advantage of regenerating a small volume with less energy consumption. Advantages in this novel process may be practicable to use at severe conditions of temperature and pressure, thus mimicking the pre-combustion capture scenario and solving the viscosity constraints as well. A microfluidic channels detector system will enable in-situ scrutiny of the process.

A-23 : Mechanically alloyed Cu-Ni-Fe based materials as inert anode for aluminium production

Sébastien Helle, INRS-EMT, 1650 boulevard Lionel-Boulet, Varennes (QC) J3X 1S2

The primary aluminum production releases a large amount of greenhouse gases (CO₂ and perfluorocarbons). A long-term objective of the aluminum industry is to substitute the consumable carbon anodes by inert materials, which could release O₂ instead of CO₂ during Al electrolysis.

Among the possible inert materials (metals, ceramics and cermets) metallic anodes are good candidates because they offer high electrical conductivity, excellent thermal shock resistance and mechanical robustness. However, the major challenge for metal anodes is to obtain a material having an excellent high-temperature corrosion resistance under aluminum electrolysis conditions.

In this study, Cu_xNi_(85-x)Fe₁₅ materials with x varying from 0 to 85 (wt.%) were prepared by mechanical alloying, consolidated to form dense electrodes and then evaluated as inert anode for aluminum production in low-temperature (700°C) KF-AlF₃ electrolyte.

A-24 : Annealing and UV irradiation of fluorocarbon films for improving cohesion and stability

Paula Horny, Centre de recherche du CHUQ, Unité Biomatériaux et Bioingénierie, Hôpital Saint-François d'Assise, 10 rue de l'Espinay, Québec, Qc, Canada, G1L 3L5

Coated stents, for drug-eluting purposes, were developed to reduce restenosis after curing cardiovascular diseases. The conservation of the film properties is essential to maintain the curing and protection properties of the film. To evaluate the behaviour of the film in aqueous medium, ageing tests demonstrated that oxidation and reorganization of the film led to a more permeable coating and therefore its degradation. Thus, coated specimens were UV irradiated or heated to modify its properties. After annealing, the F/C ratio (XPS survey) of deformed and non deformed samples remained unchanged compared to the as-deposited films whereas for UV treatment it decreased slightly. A difference was also observed in the CF₂ content (XPS and ToF-SIMS). Indeed, UV irradiation led to a higher CF₃/CF ratio and a decreased C₄F₇/CF ratio whereas the opposite trend was observed after annealing. NEXAFS analyses exhibited an increase in C=C components for UV irradiation. All results combined exhibited that UV treatment led to a higher crosslinked and unsaturated surface compared to annealing which increased the proportion of long chains, which had an influence on the films stability.

A-25 : Towards Multidrug Resistance Quantification using Biological Scanning Electrochemical Microscopy

S. Hübner, I. Beaulieu, M. A. Mezour, B. Annabi, J. Mauzeroll, NanoQAM, Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

Scanning electrochemical microscopy (SECM) is a technique that can quantify the flux of substances transported in and out of cells. Herein, we evaluated transport and interaction of ferrocene methanol (FcMeOH), a common cell permeable redox probe used in SECM measurements, in human adenocarcinoma cervical cancer cells HeLa and a multidrug resistant variant overexpressing MRP1. We show that FcMeOH diffuses into cells and in addition we demonstrate that the FcMeOH/FcMeOH⁺ couple can be used intracellularly and extracellularly to evaluate the redox state of the cell since both can interact with reduced and oxidized Glutathione (GSH/GSSG). To do so, we performed fluorescence as well as biological SECM measurements and demonstrate a differential response to FcMeOH in multidrug-resistant cells in part due to MRP1's unspecific efflux. Our study would therefore impact future applications that require adequate assessment of the metabolic response to anti-cancer drugs in chemotherapy resistant cells.

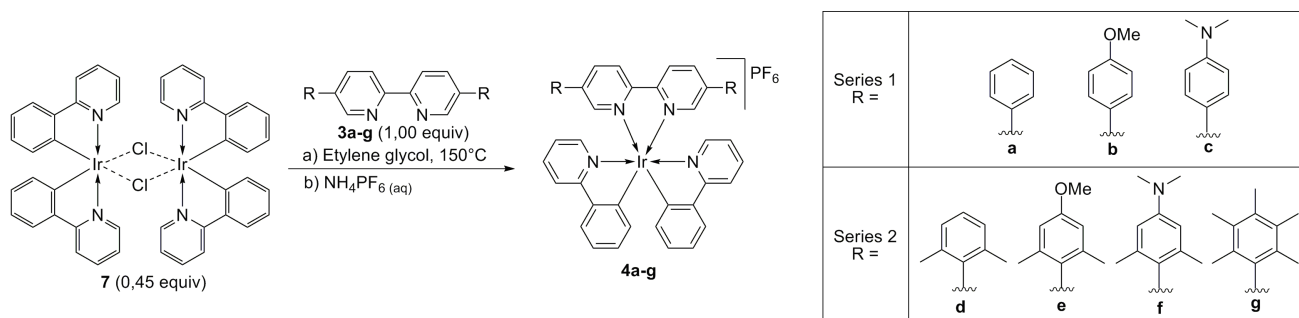
A-26 : Dextran-graft-polybutylmethacrylate copolymers for stent coatings

Amélie Labbé, Laboratory for Biomaterials and Bioengineering, Department of Materials Engineering; University Hospital Research Center, Laval University, Quebec City, Quebec G1K 7P4, Canada.

Even if coronary stent implantation has become a common practice in cardiovascular surgery, restenosis remains by far the main complication of this technique. To decrease in-stent restenosis, several studies refer to a stent covered by a polymeric layer. In this context, new hybrid polymeric materials were synthesized by copolymerization of n-butyl methacrylate onto dextran. Subsequently, these copolymers were successfully applied in the preparation of coatings either on stainless steel disks (316L) or on clinical endovascular metallic prostheses. Chemical characterizations were performed by Infra-Red Spectroscopy, Atomic Force Microscopy, X-Ray Photoelectron Spectroscopy and Scanning Electron Microscopy. The resulting polymer coatings on both 316L disks and bare stents proved to be smooth and uniform. After balloon expansion, neither cracking nor delamination was observed on the coated stents. Finally, in vitro cell adhesion and growth on the stent surface was studied over five days. Interestingly, results indicated that stents coated with the copolymer improved adhesion and proliferation of endothelial cells and simultaneously inhibited proliferation of vascular smooth muscle cells. This new copolymer with tuneable properties seems of great interest for medical devices.

A-27 : Le rôle de la substitution sur les ligands de nature 5,5'-diaryl-2,2'-bipyridine (bpy*) et leurs applications pour la fabrication d'OLEDs via des complexes de type $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{bpy}^*)]\text{PF}_6$.

Sébastien Ladouceur, Daniel Fortin, Eli Zysman-Colman*, Département de chimie, Université de Sherbrooke, 2500, Boulevard de l'université, Sherbrooke (Québec), Canada J1K 2R1



La synthèse rapide et efficace de ligands 5,5'-diaryl-2,2'-bipyridine (bpy*) (3a-g) est rapportée par une séquence de couplage de Negishi. Leur complexation à un métal de transition par l'entremise du dimère $[\text{Ir}(\text{ppy})_2\text{Cl}]_2$ a été effectuée afin d'obtenir des complexes hétéroleptiques de type $[\text{Ir}(\text{ppy})_2(\text{bpy}^*)]\text{PF}_6$ (4a-g). Deux séries de ligands ont été investiguées afin d'évaluer l'effet que peuvent apporter de petits changements électroniques structuraux sur les propriétés photophysiques et électrochimiques de ces chromophores. Les diverses modifications apportées aux groupes aryles par l'introduction de groupements électrodonneurs (série 1) ainsi que de groupes méthyles en ortho du lien C_{aryl}-C_{bpy} (série 2), orientant ces derniers perpendiculairement à la bpy, ont eu pour effet de largement influencer les propriétés étudiées. La comparaison de ces données expérimentales à des données de modélisation obtenues par DFT/TDDFT, montre des corrélations intéressantes dans le but de déterminer des méthodes de prédiction juste et efficaces des propriétés visées. L'utilisation de ces outils informatiques a été d'autant plus utile afin d'interpréter plusieurs relations observées entre les propriétés structurales et fondamentales de ces luminophores. Finalement, l'utilisation de ces complexes chargés dans la fabrication de diodes électroluminescentes de type OLED sera aussi discutées.

A-28 : Caractérisation de paramètres d'interaction par la membrane de Nafion par simulation atomistique.

Patrick Laflamme, Département de chimie, Université de Sherbrooke, 2500, Boulevard de l'université, Sherbrooke (Québec), Canada J1K 2R1

La membrane échangeuse de protons constitue l'électrolyte de la pile à combustible la mieux adaptée comme source de transformation énergétique pour le transport automobile. L'élaboration d'un modèle théorique sur le comportement mésoscopique ($> 1 \mu\text{m}$) de la membrane est nécessaire pour identifier les impacts directs d'un changement chimique ou physique d'un composé formant la membrane sur l'efficacité de la pile. Pour réaliser l'étude mésoscopique de la membrane, des paramètres d'interaction propres aux divers composants de la membrane sont nécessaires. Le but de l'étude est de déterminer les paramètres d'interaction des composants de la membrane échangeuse de protons standard, le Nafion, par un modèle atomistique ($< 1 \mu\text{m}$) en utilisant conjointement l'intégration thermodynamique et l'insertion d'une particule de Widoms. Les résultats présentés sont pour l'ensemble de la membrane, composé d'eau et de Nafion, qui constituent le standard pour la méthode.

A-29 : Interfacial Films of Mixtures of Block Copolymers and Metallic Nanoparticles

Samuel Lamarre, CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

Le confinement à l'interface air/eau de copolymères à blocs ou de nanoparticules donne naissance à des structures nanométriques intéressantes. Ce projet vise l'étude du comportement à l'interface air/eau de systèmes mixtes composés à la fois de copolymères à blocs et de nanoparticules. Ces systèmes sont utilisés pour la fabrication de nouvelles surfaces structurées à l'échelle du nanomètre et/ou la localisation sélective de nanoparticules dans la monocouche de copolymère. Une cuve de Langmuir est utilisée pour la formation des films et leur étude à l'interface, notamment grâce à la mesure d'isothermes de surface. Les films interfaciaux sont ensuite transférés sur substrat solide grâce à la technique de Langmuir-Blodgett afin d'être caractérisés par microscopie à force atomique (AFM) et par microscopie électronique en transmission (TEM). Il a été observé que les différentes morphologies obtenues dépendent de plusieurs facteurs dont la taille des nanoparticules, la nature et la taille des ligands qui stabilisent les nanoparticules, la masse molaire du copolymère à blocs et la concentration des solutions servant à l'étalement des films à l'interface.

A-30 : Synthèse de points quantiques dopés à faible tension interfaciale

Sébastien Lamarre, CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

Les points quantiques colloïdaux peuvent être utilisés pour faire de l'imagerie biologique par fluorescence. Mais leur utilisation est freinée par leur manque de stabilité chimique, leur clignotement et leur taille. Une solution est d'utiliser des très petites particules avec des centres de fluorescence loin de la surface.

Notre approche est d'utiliser des cations divalents de métaux de transition comme dopant optique. Ceci nous permet de travailler avec des structures cœur/coque avec des paramètres de maille proche pour améliorer la cristallinité. Pour la synthèse de points quantiques dopés au Mn^{2+} , on produit des cœurs de MnSe sur lesquels on fait croître des couches de ZnSe, avec une différence de paramètre de maille de 1%, à haute température. Les cations diffusent entre le cœur et la coque. Les dopants Mn^{2+} sont isolés les uns des autres et deviendront alors des centres de recombinaison radiative des excitons. Nous obtenons une fluorescence centrée à 590 nm qui décalera vers le bleu en fonction de la température, mais qui restera présente jusqu'à 290°C.

A-31 : Spectroscopic studies of the membrane interactions of TTR10-20, an amyloid peptide from transthyretin

Myriam Laneville, Joanie Voyer-Deschênes and Michèle Auger, PROTEO, CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

Peptides and lipids are major constituents of cells. However, some peptides may adopt a non-native conformation that leads to cell destruction. Amyloid peptides, such as TTR10-20, are some of these peptides. They can form very rich β -sheet and insoluble (physiological pH) filaments: fibrils and protofibrils. The goal of the present study is to characterize TTR10-20 structure and membrane interactions using different spectroscopic techniques.

TTR10-20 secondary structure was determined by Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. IR bands around 1680 and 1620 cm^{-1} (amide I' band) are particularly interesting because these bands are due to intermolecular β -sheet structures typical of protofibrils and fibrils. The results indicate the band intensity depends of peptide concentration, lipid model membrane composition and temperature.

Solid-state ^{31}P and ^2H nuclear magnetic resonance spectroscopy was used to determine the effects of TTR10-20 on model membranes. ^{31}P NMR was used to investigate dynamics and orientation of lipid head group in vesicles with and without peptide. ^2H NMR is used to determine peptide effects on the lipid acyl chain order. Complementary information on acyl chain order may be obtained from FTIR thermotropism curves.

A-32 : L'optimisation du temps de broyage du Mg₆Pd avec du Fer pour comprendre le phénomène d'activation.

Julien Lang, Institut de recherche sur l'hydrogène, Université du Québec à Trois-Rivières, C.P. 500, Trois-Rivières (Québec) Canada G9A 5H7

Les hydrures métalliques ont souvent besoin d'une période d'activation avant de pouvoir absorber l'hydrogène. Selon le type d'alliage le mécanisme d'activation peut être différent. Par exemple, pour l'alliage Mg₆Pd l'activation se fait par l'inter diffusion des espèces atomiques pour former l'hydrure de magnésium et un autre alliage Mg-Pd. À 300°C et sous 2000kPa d'hydrogène, l'alliage demande un temps d'activation de l'ordre d'une vingtaine d'heures. Nous avons découvert qu'en ajoutant une certaine quantité de fer dans l'alliage, la période d'activation est approximativement réduite d'un facteur 10. Le fer ne forme pas d'alliage avec le magnésium donc l'ajout du fer dans l'alliage Mg₆Pd n'affecte pas son rendement d'absorption d'hydrogène. L'optimisation du temps de broyage du mélange 6Mg + Pd avec le fer est le but du présent travail.

Pour synthétiser le Mg₆Pd, le broyage mécanique est utilisé. Une stœchiométrie de magnésium et de palladium est broyée pendant 10 heures jusqu'à l'obtention du Mg₆Pd. Une quantité de fer est ajoutée au mélange et le tout est broyé pour une certaine période de temps que mon travail devait optimiser. Ensuite une étude de la structure cristalline devait être faite à l'aide d'un diffractomètre à rayons X. Les mesures d'absorption et de désorption de l'alliage ont dû être faites à l'aide d'appareils spécialisés.

A-33 : Quantitative aspects of CO₂-grafted amine interactions in gas-liquid-solid solubility equilibrium: application to CO₂ capture.

E. Ghasemian-Langeroudi, F. Kleitz, M.C. Iliuta, F. Larachi, Département de génie chimique, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

The effect of liquid water on the CO₂ adsorption capacity of functionalized SBA-15 with aminopropyltrimethoxysilane (APS) and N-(2-aminoethyl)-3-(aminopropyl)trimethoxysilane (AEAPS) were examined to evaluate the potential of this mode of contact in gas-liquid-solid scrubbing operations for CO₂ partial pressures ranging from 15 to 100 kPa. The results were compared to the CO₂ adsorption capacity of the grafted amines in moist and dry gas-solid conditions along with the CO₂ absorption capacity in gas-liquid amine solution systems consisting of amines with nearly identical structures. To assess the long-term stability of the amine/SBA-15 association, grafted amines were subjected to eight immersion cycle tests (24 h each) in aqueous media. The recovered samples were characterized by X-ray diffraction (XRD), nitrogen sorption isotherm and CHN elemental analysis. Interestingly, the mesoporous structures of both APS and AEAPS were preserved in these conditions. The highest CO₂ capture efficiency were achieved with liquid amines, while CO₂ capture using grafted amine in gas-liquid-solid systems exhibited C/N atom efficiency intermediate between those of dry and moist gas-solid systems.

A-34 : Organic sensor and microactuator for lab on a chip devices

Florent Lefèvre¹, S.B. Schougaard², R. Izquierdo¹, (1) NanoQAM, RESMIQ, Département d'Informatique, (2) Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

La conception d'un dispositif micro-fluidique, incluant un capteur de fluorescence à base de dispositifs organiques et un système de circulation du fluide à base de polymères électroactifs, est en cours de réalisation. La circulation du fluide sera générée par des micro-actionneurs polymères. Nous contrôlerons le gonflement et dégonflement des micro-actionneurs de manière électrochimique. Cette technologie nous permettra de fabriquer une micropuce portable, avec une faible consommation d'énergie, sans l'utilisation d'équipement encombrants et coûteux. Le capteur se composera de diodes électroluminescentes émettant à différentes longueurs d'onde et de photodétecteurs organiques recouvrant tout le spectre visible. Ils seront intégrés de part et d'autre d'un réservoir micro-fluidique, de manière à mesurer la fluorescence de plusieurs composés à la fois, supprimant l'utilisation de filtres optiques. Le large choix des matériaux semi-conducteurs organiques et la liberté de géométrie qu'offre la fabrication des dispositifs organiques sont autant d'avantages pour intégrer un capteur de fluorescence pour n'importe quel composé. Ce dispositif miniaturisé s'adresse à un besoin urgent de l'intégration des procédés analytiques, pratiqués dans un laboratoire à l'échelle humaine. La miniaturisation d'un tel dispositif nous offrira la portabilité, la réduction du coût, tout autant que l'amélioration des performances en terme de vitesse d'analyse, automatisation et reproductibilité.

A-35 : Fabrication d'une nano-cathode constituée d'un polymère conducteur et d'un composé organométallique

David Lepage et Steen Schougaard, NanoQAM, Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

L'industrie des piles lithium est en large expansion. Elle occupe présentement la majeure partie du marché des piles portables. Malgré tout, son implantation à grande échelle dans les véhicules hybrides tarde. La capacité à emmagasiner rapidement une grande quantité d'énergie est l'un des obstacles les plus importants à la commercialisation des piles lithium dans les véhicules. Pour cette raison, notre équipe de recherche élabore un système de nanostructure à base d'un polymère conducteur qui permettrait un acheminement rapide de l'énergie. La synthèse en grande quantité d'un N-(ferrocenylalkyl) pyrrol permettra d'étudier le couple rédox ferrocène (Fe^{2+}) / ferricinium(Fe^{3+}) dans une pile lithium. Des études préliminaires indiquent qu'il sera possible de copolymériser le produit synthétisé avec du pyrrol pour former un film conducteur. Ce film pourra ainsi être étudié dans une pile lithium de type bouton.

A-36 : Étude de l'effet de la riboflavine sur la densité de réticulations des gels de collagène induites par les radiations UV

Lucie Levesque, Centre de recherche du CHUQ, Unité Biomatériaux et Bioingénierie, Hôpital Saint-François d'Assise, 10 rue de l'Espinay, Québec, Qc, Canada, G1L 3L5

Dans un contexte dans lequel près d'un tiers des décès dans le monde sont causés par des maladies cardiovasculaires, il n'existe encore à l'heure actuelle aucun substitut adéquat pour le remplacement des vaisseaux sanguins de faible diamètre (< 6 mm). Un des axes de recherche menés au sein du Laboratoire de Biomatériaux et de Bioingénierie consiste à appliquer les principes du génie tissulaire pour la régénération de vaisseaux sanguins de faible diamètre. Ainsi, afin de guider la croissance des cellules du tissu vasculaire, celles-ci sontensemencées sur des structures d'échafaudage à base de collagène. Pour favoriser la prolifération et l'activité cellulaires, le tout est entreposé dans un dispositif reproduisant les conditions physiologiques. Une telle stratégie nécessite dans un premier temps de renforcer cette structure de collagène par des moyens photochimiques.

L'exposition des gels de collagène aux radiations UVs ($\lambda = 254 \text{ nm}$) renforce cette structure par la création de réticulations chimiques. La présentation portera sur l'étude de l'effet d'un photoinitiateur, la riboflavine (vitamine B12), sur la réticulation des gels de collagène induite par les radiations UV qui sera suivie par des mesures de taux de gonflement des gels.

A-37 : Propriétés de couches ultra-minces fluorocarbonées déposées par plasma pour le recouvrement de stents coronariens en acier inoxydable

Lenaïg Lijeour, Centre de recherche du CHUQ, Unité Biomatériaux et Bioingénierie, Hôpital Saint-François d'Assise, 10 rue de l'Espinay, Québec, Qc, Canada, G1L 3L5

Depuis 2000, le Laboratoire de Biomatériaux et de Bioingénierie s'intéresse aux problématiques liées aux dispositifs cardiovasculaires, en particulier les stents. L'objectif général du projet est d'encapsuler le stent afin de le protéger du milieu biologique et de faciliter son intégration dans le corps humain. Ce revêtement déposé par plasma est constitué d'une couche polymérique fluorocarbonée ultra-mince. La finalité de ce projet vise à greffer à la surface du polymère fluorocarboné des molécules bioactives en utilisant un traitement d'ammoniac pour créer des fonctions amines permettant de les ancrer de manière covalente. La stabilité de ce greffage après le déploiement du stent doit être garantie tout au long de l'implantation.

Le dépôt a été optimisé en fonction des différents paramètres du réacteur plasma. Les propriétés du recouvrement, telles que l'adhésion, la stabilité à la déformation, la stabilité en solution aqueuse, et le rôle de barrière contre la corrosion et ses effets ont été caractérisées par différentes techniques d'analyses topographiques et chimiques : AFM, MEB (effet de champs), ellipsométrie, XPS, ToF-SIMS, PEEM, FTIR, angle de contact et potentiométrie.

A-38 : Caractérisation des plasmas micro-onde par spectroscopie d'émission.

Maryam Mavadat, Centre de recherche du CHUQ, Hôpital Saint-François d'Assise, 10 rue de l'Espinay, Québec, Qc, Canada, G1L 3L5

Les modifications de surface par plasmas froids sont couramment utilisées dans le domaine des biomatériaux dans le but d'améliorer leur biocompatibilité. À ce jour, la technique de choix pour l'analyse des surfaces traitées par plasma est la spectroscopie XPS qui permet de caractériser la composition atomique de la surface et la nature des fonctionnalités chimiques. Malheureusement, les expériences en spectroscopie XPS nécessitent beaucoup de temps, particulièrement lorsqu'une dérivation chimique doit être faite pour déterminer avec certitude la nature des espèces chimiques présentes à la surface.

L'objectif de cette étude est de caractériser, par spectroscopie d'émission dans l'UV-visible et l'infrarouge, des plasmas micro-ondes dans des environnements N₂ et N₂/H₂. Ces analyses permettent d'une part d'identifier les espèces réactives dans le plasma et d'autre part, de caractériser leurs énergies électroniques, vibrationnelles et rotationnelles.

Différentes transitions du N₂ ont été détectées dans le plasma micro-ondes d'azote pure. L'ajout de H₂ dans la décharge entraîne l'apparition de raies caractéristiques de cet élément, aussi bien en UV-visible qu'en infrarouge avec une diminution des raies de l'azote. Les résultats montrent l'effet significatif de l'ajout de H₂ dans le plasma N₂ sur l'intensité des lignes de différentes transitions dans le plasma. En outre, la température de vibration de différentes espèces présentes dans le plasma a pu être déterminée en fonction de la teneur en H₂ dans la décharge.

A-39 : Scanning Electrochemical Microscopy (SECM) at Ring Microelectrodes.

Margarita Mayoral, NanoQAM, Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

Electrochemical techniques and sensors are powerful tools that can be applied to study different structures and processes in biological systems. They can probe electron, ion, and molecular transfers as well as other reactions at solid-liquid and liquid-liquid interfaces. Using these probes, real-time observation of transport mechanisms, such as pumps and channels is possible. Micro-ring-injector sensors have been developed and our interest is to further apply them to biological studies where the electrochemical detection and injection time of drugs in the vicinity of adhering cells are simultaneously controlled at the probe. Hence, it is important to understand their behaviour as they approach different surfaces. Herein we describe the SECM technique introducing the use of micro-ring electrodes as micropipettes, their advantages and future applications that they could have.

A-40 : Origin and Effect of Impurities in Protic Ionic Liquids Based on 2-Methylpyridine and Trifluoroacetic Acid for Applications in Electrochemistry

Laurence Mayrand-Provencher, Département de chimie, Université de Montréal, C.P. 6128, Succ. Centre-Ville, Montréal (Québec), Canada H3C 3J7

Protic ionic liquids (PILs) based on 2-methylpyridine (2-MPy) and trifluoroacetic acid (TFA) have been synthesized under multiple conditions and with different proportions of their constituents. These PILs present a brown color of variable intensity and the factors responsible for the presence of these impurities have been examined. UV–vis spectroscopy analyses revealed that both TFA and 2-MPy can be thermally degraded during the synthesis process. Distillation of the IL can be used to quickly obtain mixtures without any traces of coloration, but can lead to a severe alteration of the relative proportion of the constituents. This work shows that high-yield syntheses of PILs obtained with different contents in colored impurities can be compared to evaluate the effect of these impurities not only on the electrochemical behavior (on Pt and on GC) but also on the physicochemical properties of interest for PILs as applications in electrochemistry (conductivity, density, and viscosity).

A-41 : Feasability of fabricating biodegradable coronary iron stent by electroforming

Maryam Moravej, Centre de recherche du CHUQ, Unité Biomatériaux et Bioingénierie, Hôpital Saint-François d'Assise, 10 rue de l'Espinay, Québec, Qc, Canada, G1L 3L5

The original idea of using biodegradable stents has emerged as a solution to the complications of permanent bare metal stents. Biodegradable stents provide the required scaffolding, degrade gradually and are eliminated from the body. Candidate metallic materials must have the mechanical properties comparable to those of 316L stainless steel which is considered the gold standard material for stents; uniform and controllable degradation, and be non-toxic. Considering the mentioned properties, pure iron is an interesting candidate.

This work aimed to study the feasibility of fabricating biodegradable stent made of pure iron by electroforming method. Firstly, flat iron specimens were electroformed from an aqueous chloride solution. Electroforming parameters including temperature, pH, current density and time were adjusted. SEM, XRD and ICP-ES were used to analyse the microstructure and composition. Mechanical properties were evaluated by standard tensile test. The degradation behaviour of electroformed iron was assessed by static and dynamic degradation methods. Results showed that electroforming produced iron foils with small grains size (less than 2 microns), high mechanical properties ($\sigma_{0.02} = 270$ and $\sigma_{uts} = 292$ MPa), uniform and moderate degradation rate (0.5 mm/y). Because of the promising results obtained for electroformed iron foils, fabrication of electroformed iron mini-tubes started as the second part of the investigation and is currently ongoing.

A-42 : Hydrures complexes pour le stockage de l'hydrogène

François Morin, Institut de recherche sur l'hydrogène, Université du Québec à Trois-Rivières, C.P. 500, Trois-Rivières (Québec) Canada G9A 5H7

Le stockage dans les hydrures métalliques présente de nombreux avantages pour des applications pratiques. Les hydrures complexes sont une nouvelle classe de matériaux qui présentent une grande capacité de stockage, mais dont la température et la pression d'opération sont encore trop élevée. Dans le cadre de ma maîtrise, je compte étudier le système $\text{LiBH}_4 + \text{MgH}_2 + \text{Fe}$, où le LiBH_4 est un hydrure complexe que le MgH_2 déstabilise, réduisant ainsi les conditions d'opérations du système à des niveaux plus accessibles en laboratoire. Le Fer un agent qui se veut catalyseur de la réaction d'hydrogénation / déhydrogénation et inhibiteur de grossissement de la taille des grains, élément sujet à influencer la réversibilité du système. Plus particulièrement, je me pencherai sur l'effet de la quantité et la taille des grains de Fer dans le mélange, sur le remplacement du Fer par d'autres métaux de transition et sur la réponse du système à la substitution du LiBH_4 par d'autres borohydrures alcalin.

A-43 : Intramolecular cross-linking of acetylenic polymers: an approach to organic nanotubes

Jules Romeo NEABO, CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

Since several years, chemists all over the world are trying by organic synthesis to build molecules materials or polymers able to mimic the biologicals molecules such as protein, DNA , RNA and others. Since now, the focus is only on polymers where the units are linked by simple bonds or double bonds.

Following the same idea, we are trying to build acetylenic oligomers able to undergo the helix-coil transition as see in DNA helix-coil transition. Further cross-linking of these foldamers will produce stable nanotubes for various applications : drugs delivery, sensors...

A-44 : Synthesis of ordered lead dioxide nanowires using electrodeposition template method

Philippe Perret, INRS-EMT, 1650 boulevard Lionel-Boulet, Varennes (QC) J3X 1S2

Le dioxyde de plomb est utilisé comme matériau d'électrode dans plusieurs applications. Par exemple, le PbO₂ est utilisé comme matériau actif et positif dans les accumulateurs au plomb, pour la production d'ozone et le traitement électrochimique des eaux usées. Plus récemment, il a trouvé des applications dans les supercapacités électrochimiques hybrides carbone/PbO₂. Dans ces systèmes, le carbone activé est utilisé comme électrode négative et le PbO₂ comme électrode positive. Une augmentation de la densité de puissance est attendue par de tels dispositifs hybrides par rapport à celle de la batterie classique au plomb. Toutefois, les deux électrodes doit être en mesure de maintenir des taux de charge / décharge rapides avec une perte minimale de la densité d'énergie. Toutefois, la mauvaise utilisation de la matière réactive dans les électrodes de PbO₂ limite les performances de ces dispositifs.

La nanostructuration peut être utilisée pour améliorer l'efficacité de l'utilisation d'un matériel réactif en augmentant le rapport surface / volume. Dans la présente étude, des nanofils de PbO₂ ont été préparés par électrodéposition à travers une membrane poreuse d'oxyde d'aluminium. L'électrodéposition de PbO₂ a été réalisée en mode galvanostatique dans un électrolyte composé de 0,1 M Pb(NO₃)₂ à pH = 5.

A-45 : Electrodeposition of PPy films by square wave cyclic voltammetry.

Nam Thang PHAM, INRS-EMT, 1650 boulevard Lionel-Boulet, Varennes (QC) J3X 1S2

Polypyrrole (PPy) films were electrodeposited by square wave cyclic voltammetry (SWCV) for the first time, and in the presence of different electrolytes : LiClO₄, NaCF₃CO₂, p-toluenesulfonic sodium salt, p-octylbenzenesulfonate sodium salt and dodecylbenzenesulfonate sodium salt. With SWCV it is expected to combine the advantages of both CV and pulse deposition methods, such as the observation of the film growth process and the control of the films' morphology, respectively. PPy films grown by SWCV method have enhanced properties such as lower charge transfer resistance and lower Warburg impedance with respect to films prepared by cyclic voltammetry. The SWCV method has also been applied to the electrodepositing PPy with co-entrapment of Biotin (biomolecule). The main objective is to overcome the diffusion limitation of Biotin and to improve its incorporation in the film. The present of Biotin was confirmed by electrochemical characterization and FTIR.

A-46 : Synthèse de nouveaux catalyseurs pour la copolymérisation de l'éthylène avec des monomères polaires.

Laurence Piché, NanoQAM, Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

Depuis la découverte de Ziegler en 1953, les progrès de la polymérisation catalytique des oléfines ont donné lieu à de nombreux mariages entre la science des polymères et la chimie organométallique. Il n'existe cependant toujours pas de catalyseurs commerciaux efficaces pour la copolymérisation contrôlée des oléfines avec des monomères polaires. C'est dans cette optique qu'une nouvelle famille de catalyseurs à base de palladium basés sur des phosphines d'aryls sulfonates a été préparée. La réaction de ces phosphines avec PdMe₂(TMEDA) conduit à la formation des catalyseurs. La synthèse détaillée et la caractérisation (RMN 1H, 13C et 31P, MS) des phosphines et des catalyseurs seront présentées. Les catalyseurs synthétisés se sont tous avérés efficaces pour l'homopolymérisation de l'éthylène et certains ont permis la copolymérisation de l'éthylène avec différents monomères polaires, tels que les acrylates. Les polymères préparés seront caractérisés par RMN, GPC et DSC; les taux d'insertion et les distributions de masses molaires seront discutés en fonction de la structure des catalyseurs. Les résultats obtenus permettront d'étudier l'architecture des copolymères synthétisés dans le but d'éclaircir le mécanisme de polymérisation qui reste à ce jour controversé.

A-47 : Détermination de la température de transition vitreuse d'isomères structuraux, soient le P2VP et le P4VP, par simulation atomistique

André Plante, Département de chimie, Université de Sherbrooke, 2500, Boulevard de l'université, Sherbrooke (Québec), Canada J1K 2R1

Jusqu'à quel point peut-on affirmer qu'un modèle de simulation est performant ? La réponse peut dépendre de divers facteurs tels que la puissance des ordinateurs qui ne cesse de croître. Le présent projet vise à tester les limites de la méthode de simulation atomistique développée au sein du laboratoire Soldera pour la détermination de la température de transition vitreuse (T_g) de polymères. Les travaux de N. Metatla sur le PMMA isotactique et syndiotactique ont permis de démontrer que cette méthode permettait de distinguer des isomères conformationnels. L'objectif est alors de vérifier s'il est possible de distinguer des isomères de structure par simulation atomistique. Les polymères étudiés sont le poly(2-vinylpyridine) (P2VP) et le poly(4-vinylpyridine) (P4VP). Par dilatométrie, un écart de T_g de $56 \text{ K} \pm 13 \text{ K}$ a été calculé par simulation alors que l'expérimentation donne un écart de 43 K . La correspondance entre les deux différences est corroborée par un parfait accord entre T_g simulées et expérimentales en suivant la loi WLF précédemment établie pour une série de polymères.

A-48 : Development of ruthenium electrodes with high surface / volume ratio

Alexandre Ponrouch, INRS-EMT, 1650 boulevard Lionel-Boulet, Varennes (QC) J3X 1S2

Ruthenium has been known as one of the most electrocatalytically efficient materials in the electrochemical oxygen and chlorine evolution reactions. In the last decade it has been reported that the ruthenium layer behaves as an electrochemical supercapacitor exhibiting a large capacity per unit weight owing to the pseudocapacitance of the surface electrochemical reactions of various oxidation states of ruthenium accompanied by the exchange of protons. However the participation of the bulk of the electrode to the pseudocapacitive behaviour is limited due to limited transport of the reactants in the bulk of the electrode material. Thus we have explored several strategies aiming at maximizing the surface-to-volume ratio of electrodeposited ruthenium. In all cases, the films were made by electrodeposition and three strategies were explored to increase the surface to volume ratio: 1) deposition of thin films, 2) deposition of mesoporous Ru, and 3) deposition of nanowires and nanotubes of Ru. Details of the electrochemical processes responsible for the creation of the various structures will be discussed. Also, the electrochemical response of the various structures in an acidic electrolyte will be presented and their respective benefits will be discussed.

A-49 : Guide à la synthèse de matériaux liquides cristallins ferroélectriques pour l'optique non-linéaire

François Porzio, Département de chimie, Université de Sherbrooke, 2500, Boulevard de l'université, Sherbrooke (Québec), Canada J1K 2R1, Faculté des Sciences, D2

Les matériaux spécialement conçus pour l'optique non-linéaire (ONL) offrent une réponse combinatoire (la fréquence de sortie est une combinaison des fréquences d'entrée) lorsqu'ils sont soumis à une excitation lumineuse de forte intensité. Bien que l'ingénierie moléculaire ait souvent été employée pour développer ces nouveaux matériaux, les démarches de synthèses, longues et coûteuses, sont généralement de type essais/erreurs. L'approche que nous désirons développer est celle d'un guide à la synthèse, en se basant sur une série de molécules puis en les modifiant. Pour cela, il est impératif de prévoir la réponse ONL macroscopique d'un composé à partir de la seule donnée de sa structure moléculaire microscopique. L'approche proposée est de corréler des données de simulation avec les observations expérimentales, et ceci à différentes échelles de taille. Les calculs quantiques servent à déterminer les propriétés ONL microscopiques (hyperpolarisabilité). Les calculs au niveau atomistique apportent l'information sur l'arrangement des molécules. L'utilisation en parallèle de ces deux modèles de calcul doit permettre d'obtenir des valeurs moyennes de la propriété ONL microscopique, qui pourront être par la suite corrélées à la valeur ONL expérimentale (susceptibilité du deuxième ordre), obtenue grâce à une mesure de génération de seconde harmonique (SHG).

A-50 : Synthèse et caractérisation de nouveaux dérivés du C60 pour application en photovoltaïque

Simon Rondeau-Gagné, CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V OA6

Le PCBM (phenyl C61 butyric methylester) est un dérivé très utilisé comme matériau de type n dans les piles solaires organiques (accepteur d'électrons). Avec les nombreuses recherches effectuées dans le domaine, il est désormais possible d'obtenir d'encourageants taux de conversion de l'énergie solaire en électricité (plus de 5%). Bien que le PCBM donne de bons résultats, cet accepteur d'électrons n'est pas le composé optimal pour tous les polymères π -conjugués et une modulation du niveau énergétique LUMO est souhaitable. L'objectif principal de ce projet de recherche est de développer des dérivés solubles du C60 dont l'orbitale LUMO est augmentée par rapport à celle du PCBM, résultant en une augmentation de la valeur du Voc et conséquemment, de l'efficacité du dispositif. La difficulté de modulation de l'orbitale LUMO peut s'expliquer par la faible communication électronique entre les groupements attachés au C60 et le C60 même. Dans le cadre de ce projet, nous avons utilisé une liaison conjuguée afin de lier des groupements électro-donneurs au C60. Par cette liaison, seulement un carbone hybridé sp^3 est présent pour attacher le groupement. Ceci a permis une meilleure conduction des électrons au C60 et, par le fait même, a permis d'améliorer la modulation de l'orbitale LUMO de ce dernier. Les composés obtenus ont été complètement caractérisés par spectroscopie UV-visible et électrochimie (cyclovoltamétrie).

A-51 : Alliages Mg-Ti préparés par mécanosynthèse. Application pour l'électrode négative des batteries Ni-MH.

Steeve Rousselot, INRS-EMT, 1650 boulevard Lionel-Boulet, Varennes (QC) J3X 1S2

La batterie Nickel-Métal Hydrure (Ni-MH) constitue actuellement la technologie dominante du secteur des véhicules électriques hybrides (HEV). Néanmoins, une réduction du coût et l'amélioration de la densité d'énergie de ces dispositifs sont indispensables. Pour ce faire, le développement d'hydrures métalliques bon marché et aux capacités gravimétriques élevées est nécessaire.

Les alliages de magnésium présentent dans ce domaine des propriétés d'hydruration particulièrement intéressantes à l'image des couches minces Mg-Ti préparées par e-beam et pulvérisation cathodique. Cependant leur synthèse n'est pas adaptée à une utilisation dans les batteries commerciales qui nécessitent des matériaux sous forme massive produits à large échelle. Ceci constitue un véritable défi compte tenu de la faible miscibilité entre le magnésium et le titane et de la température d'évaporation du Mg ($T_b = 1363$ K) inférieure au point de fusion du Ti ($T_m = 1943$ K).

La synthèse d'alliages Mg-Ti par mécanosynthèse à partir de poudres élémentaires de Mg et de Ti est présentée dans cette étude. L'influence du ratio Mg/Ti sur la structure du produit final est d'abord étudiée. Ensuite, les propriétés d'hydruration des matériaux pour différentes compositions Mg-Ti sont montrées et mises en relation avec leur structure.

A-52 : Synthèse et étude électrochimique des complexes nickel oximes pour application aux piles au lithium

Ngoc Duc Trinh, NanoQAM, Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

Avec la demande grandissante de la consommation d'énergie, il est préférable de favoriser les énergies vertes comme l'hydroélectricité, l'éolienne et le solaire au profit des carburants fossiles. Ces énergies peuvent être emmagasinées par des piles au lithium. L'oxyde de cobalt lithié utilisé comme cathode dans une pile au lithium est couramment utilisé par plusieurs appareils électroniques. Cependant, ces piles comportent des limitations dans plusieurs domaines. C'est pourquoi le greffage sur un polymère conducteur de complexes de Ni(II) pourrait représenter une alternative intéressante pour les cathodes des piles au lithium. L'intérêt pour le ligand 3,14-diméthyl-4,7-10,13-tétraazahexadéca-3,-13-diène-2,15-dione dioxime (H₂L) se retrouve sur ces fonctions oximes. En milieu alcalin, deux pics d'oxydation sont observés. Cependant, lorsque les fonctions oximes sont protonnées, le Ni(III) devient instable et son potentiel augmente, tel que son pic anodique se superpose sur celui du Ni(IV), permettant une oxydation direct de +2 à +4. L'objectif de ce projet est de synthétiser le complexe Ni(H₂L)₂⁺ et de former le sel de lithium analogue, stabilisant le complexe en milieu organique. Les complexes Ni(II) ont été caractérisés par spectroscopie IR et par électrochimie.

A-53 : Deposition of Functional Polymer Thin Films Using Atmospheric Pressure Plasma for Biomedical Applications – Endothelialization of Vascular Prostheses

Christian Sarra-Bournet, CERMA, Département de génie des mines, de la métallurgie et des matériaux, Université Laval, 1065, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada, G1V 0A6, Centre de recherche du CHUQ, Hôpital Saint-François d'Assise, 10 rue de l'Espinay, Québec, Qc, Canada, G1L 3L5

It has been well established that the outcome of biomaterials after implantation depends on tissue-material interactions. In healthy arteries, the endothelium prevents all non-specific protein adsorption as well as activation of platelets and coagulation cascade, therefore avoiding thrombus formation and intimal hyperplasia. Thus, the presence of an endothelium inside synthetic prostheses could greatly improve their patency. Plasma surface modifications are commonly used to modify the surface properties of biomedical polymers such as adhesion, wettability, biocompatibility, etc. They are also used to insert chemically reactive functionality onto otherwise non-reactive substrates. The objective of this study is to obtain a thin film harbouring amino groups (NH₂) for subsequent molecule conjugation on polymer surfaces in order to improve the endothelialisation of vascular prostheses.

A-54 : Liquides ioniques protiques faits d'acide trifluoroacétique et de pyridines comme électrolytes pour des supercapacité à base de RuO₂

Sixian Lin, Département de chimie, Université de Montréal, C.P. 6128, Succ. Centre-Ville, Montréal (Québec), Canada H3C 3J7

La nature du groupement substituant à la position alpha d'un corps pyridine a été démontré comme affectant beaucoup les propriétés de la mixture obtenue lorsque de l'acide trifluoroacétique (TFA) y est ajouté. Le ratio base:acide de la synthèse (1:1 ou 1:2 en moles) des liquides ioniques protiques (LIP) ainsi formés a aussi un effet important sur les propriétés physicochimiques de ces LIP telles que la viscosité, la conductivité et la densité, mais également sur la capacitance spécifique obtenue avec une électrode de RuO₂. Les résultats obtenus montrent que, pour obtenir une meilleure capacitance, il est préférable d'avoir un petit groupement substituant comme c'est le cas avec des bases telles 2-méthylpyridine. Le ratio 1:2 a mené à l'obtention de LIP avec des propriétés physicochimiques plus intéressantes en vue d'application comme électrolyte avec des supercapacités de RuO₂. Les données récoltées aident à orienter les travaux futurs pour éventuellement mener à la préparation de LIP avec des propriétés avantageuses par rapport à celles des électrolytes aqueux.

A-55 : Revêtements nanocomposites UV-aqueux à base de nanoparticules de silice pour l'industrie du meuble et des armoires de cuisine en bois.

Caroline Sow^a, Bernard Riedl^a, Pierre Blanchet^{a,b}

^a *Département des sciences du bois et de la forêt, Centre de recherche sur le bois, Université Laval, Québec (Qc), Canada, G1P 7P4*

^b *FPIInnovations, Nanotechnologies pour les produits du bois, Québec (Qc), Canada, G1P 4R4*

Les lois gouvernementales relatives à l'émission de COV devenant de plus en plus sévères, les industries ont été amenées à développer des revêtements plus en accord avec l'environnement (revêtements aqueux, ultraviolets ou en poudre). La technologie UV-aqueuse présente des avantages intéressants puisqu'elle combine à la fois les avantages de la technologie UV et ceux de la technologie aqueuse. Bien que le potentiel des revêtements UV-aqueux ait largement été étudié, leurs propriétés sont souvent sous-estimées en comparaison aux revêtements UV à forte teneur en solides. Aussi, afin de promouvoir le potentiel de tels revêtements et de satisfaire aux exigences industrielles en termes de performances mécaniques des produits du bois, l'approche des nanocomposites a été exploitée. L'objectif de ce travail consiste à évaluer les propriétés de revêtements nanocomposites UV-aqueux à base de nanoparticules de silice. Les propriétés mécaniques (résistance aux égratignures et adhésion) de ces revêtements ont été évaluées et comparées à celles du revêtement sans nanoparticules. La cinétique de cuisson a été étudiée au moyen de la photo-DSC afin d'évaluer l'influence des nanoparticules de silice sur l'efficacité de la cuisson UV.

A-56 : Synthèse et assemblage de rotateurs moléculaires sur des nanoparticules d'or pour le développement de nanomachines

Dominic Thibeault, CERMA, Département de chimie, Université Laval, 1045, Avenue de la Médecine, Québec (Québec), Canada G1V 0A6

The development of organic compounds having mobile components is of fundamental importance for the future development of solid-state and surface nanomachines performing macroscopic machine-like movements. However, the dynamic studies of mobile molecular parts in the solid state and on surface are rather limited because of the lack of appropriate and easy-to-use characterization techniques. To overcome this problem, we decided to use solid-state NMR on nanoparticles-mounted nanomachines in order to mimic SAMs on 2-D surfaces. Nanoparticles, especially gold nanoparticles (AuNPs), are suitable models to perform these studies since these materials are soluble and easy to study by NMR. Hence, we synthesized a new class of molecular «rotors» in order to investigate organisation and movement on gold surface through solid-state NMR. Two models of organic compounds (hindered and unhindered «rotors») were used during our investigations. In fact, a rotational movement must be nearly «frictionless» to reach maximum efficiency in a functional nanodevice. Synthesis and characterization of these organic «rotors» and analysis of functionalized AuNPs are described here.

A-57 : Scorpionates complexes - Possible electrochemical molecular switches?

J. Vachon, M. Mayoral, D. Aymé-Perrot, and S. B. Schougaard, NanoQAM, Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8

Poly(pyrazolyl)borate is known as the scorpionate ligand due to its ability to hold the central metal atom with its two “claw” pyrazolyl units while the third “dart” unit is free to make its attack. Due to their peculiar geometry, these molecules appear to be almost ideal candidates for making molecular switches based on redox chemistry. The details of this switching action will be discussed as well as some of the physical-chemical consequences of the switching. Specifically, we will attempt to establish the relationship between structure change and electrochemical properties by examining the electrochemistry of bis(pyrazolyl)borate and tris(pyrazolyl)borate nickel(II) complexes.

A-58 : Zeolite/Nafion Composite Membranes for Direct Methanol Fuel Cells

Zhonghua Zhang, INRS-EMT, 1650 boulevard Lionel-Boulet, Varennes (QC) J3X 1S2

In this work, we have prepared zeolite/Nafion composite membranes using CBV 780 as zeolite and Nafion as polymer. The effects of membrane pre-pressing and the content and particle size of zeolite on the performance of single-cells fabricated with composite membranes have been discussed extensively. It was found that the addition of an appropriate amount of zeolite to Nafion membrane can enhance the fuel cell performance obviously. The membrane pre-pressing can make the porous membrane more compact, decrease the methanol crossover and thus improve the fuel cell performance. The composite membranes with 2% and 4% zeolite have the highest OCV and lowest serial resistance, which indicates the addition of an appropriate amount of zeolite can decrease the methanol crossover and improve the membrane conductivity effectively, which has been proven from the measurements of membrane conductivity. The single cell performance using the composite membrane with smaller zeolite particle size is lower than that with big zeolite particle size, which results from the blocked passage of proton conduction by smaller zeolite particles in the composite membrane.

A-59 : Dispersion of nanoparticles and nanotubes in aqueous and organic solvent

Jean-Christophe Daigle, Wei Heng Zhong, Thomas Alnasser & Jérôme P. Claverie, NanoQAM, Département de Chimie, Université du Québec à Montréal, C.P. 8888, Succ. Centre-ville, Montréal (Québec), Canada, H3C 3P8*

Dispersion of nanofillers is an essential aspect in the manipulation of nanoparticles and nanotubes. In this work we have prepared a dispersant by Controlled Radical Polymerization (CRP) which is used to disperse a variety of fillers and nanotubes. The resulting dispersion is then engaged in an emulsion polymerization to yield a core-shell structure where the core is an inorganic particle and the shell a polymer. The resulting colloid have a high concentration in inorganic compounds (200g/L). The encapsulation allows to effectively stabilize the suspension and to prevent the aggregation. We have analyzed the dispersion of several inorganic particles and nanotubes in organic solvent and in water. Although the encapsulation process is simple and versatile in aqueous medium, resulting in stable colloids with a high concentration, it is less robust in organic medium. We are currently analyzing the role of the architecture (microstructure and molecular weight distribution) of the dispersant on the dispersion stability.



www.cqmfscience.com
www.uqam.ca
www.nanoqam.uqam.ca