



# Catalogue de propositions de projets pour les activités de recherche

## Préambule

Dans le cadre de votre maîtrise de type cours ou de votre DESS (cheminement en nanomatériaux ou cheminement en synthèse organique), vous aurez à effectuer une activité de recherche obligatoire de 9 crédits (COR720 ou CPH720) et à votre choix plusieurs activités de recherche optionnelles de 3 à 6 crédits (COR710(3), COR730(3), COR760(6), CPH710(3), CPH730(3), CPH760(6)). Une activité de recherche de 3 crédits correspond à environ 1 jour/semaine de travail durant une session. Une activité de recherche de 6 crédits ou 2 activités de 3 crédits correspondent à environ 2 jours/semaine durant la session. Finalement l'activité de recherche de 9 crédits correspond à environ 4 jours/semaine de travail durant la session.

Plusieurs activités peuvent être jumelées dans une même session. Normalement, ces activités de recherche ne sont pas rémunérées (surtout les petites). Ce point est toutefois laissé à la discrétion des encadrants, veuillez-vous renseigner.

Afin de faciliter votre travail, nous avons préparé pour vous un catalogue de divers projets qui vous sont proposés par des professeurs des campus principal et de la santé à l'Université de Sherbrooke. Ces projets ont été classés sur la base du thème principal sur lequel le projet repose. Plusieurs projets sont cependant multidisciplinaires, nous vous encourageons donc à explorer en dehors de vos zones de confort!

Pour chacun des projets, une personne contact est indiquée. Lorsque vous contacterez cette personne, **veuillez fournir vos CV et relevés de notes afin de faciliter leur travail.**

Veillez noter que vous pouvez effectuer des démarches personnelles à l'extérieur de l'Université de Sherbrooke, tant en milieu universitaire qu'en milieu industriel, tant au Québec que dans votre pays d'origine, si les projets proposés ne correspondent pas à votre orientation, ou si vos choix ne sont plus disponibles.

**Au plaisir de vous rencontrer à Sherbrooke!**

# Projets proposés

<b>Thème porteur - Analytique</b> .....	<b>5</b>
<b>Projet</b> Étude du couplage fixation d'azote, production de méthane par les bryophytes de la forêt boréale 1 – Cycle du méthane.....	6
<b>Projet</b> Étude du couplage fixation d'azote, production de méthane par les bryophytes de la forêt boréale 2 – Qualité de l'air .....	7
<b>Projet</b> Caractérisation de peintures rupestres du Bouclier Canadien : provenance et transformation des matières premières.....	8
<b>Projet</b> Authentification d'objets égyptiens provenant de la collection du Château Ramezay, Montréal .....	9
<b>Projet</b> Développement de biocapteurs électrochimiques à base d'ADN pour le suivi moléculaire dans des matrices complexes .....	10
<b>Projet</b> Présence, transformation et effets des contaminants organiques dans l'environnement.....	11
<b>Thème porteur - Computationnel</b> .....	<b>12</b>
<b>Projet</b> Simulation moléculaire de polymères : fusion .....	13
<b>Projet</b> Simulation moléculaire de polymères : transition vitreuse.....	14
<b>Projet</b> Simulation moléculaire de cristaux liquides .....	15
<b>Projet</b> Synthèse, caractérisation et simulation de catalyseurs .....	16
<b>Projet</b> Découvrir les mécanismes réactionnels à l'aide de la modélisation moléculaire .....	17
<b>Projet</b> Effets de confinement sur les dynamiques ro-translationnelles et sur les cinétiques de conversion des isomères de spin nucléaire de H <sub>2</sub> O encapsulé dans les endofullerènes, H <sub>2</sub> O@C <sub>60</sub> .....	18
<b>Thème porteur - Matériaux</b> .....	<b>19</b>
<b>Projet</b> Fabrication et caractérisation des Pseudo-substrats à base de Si (Ge) .....	20
<b>Projet</b> Développement de batteries Li-ion avancées pour les véhicules électriques du futur.....	21
<b>Projet</b> Fabrication et caractérisation de noirs de carbone et de suie archéologiques.....	22
<b>Projet</b> Améliorer les batteries avec les cathodes hétéroanioniques.....	23
<b>Projet</b> Détection de contraintes à l'aide de nanocapsules formées de nanoparticules d'or .....	24
<b>Projet</b> Détection de mercure à l'aide de microcapsules formées de nanoparticules d'or.....	25
<b>Projet</b> Nouveaux photocatalyseurs pour la photosynthèse artificielle : vers des carburants renouvelables.....	26
<b>Projet</b> Polymères graphitisants pour la préparation de matériaux carbonés.....	27
<b>Projet</b> Nouveaux polymères électrolytes solides pour les batteries Li, Na et Zn .....	28
<b>Projet</b> Prédiction de la température de transition vitreuse par intelligence artificielle .....	29
<b>Projet</b> Recyclage des batteries lithium-ion : contrôle des impuretés .....	30
<b>Projet</b> Recyclage des batteries lithium-ion : effet des impuretés sur la synthèse de NMC .....	31
<b>Projet</b> Extraction d'alginate à partir d'algues de culture pour la synthèse de polymères bio-sourcés .....	32
<b>Projet</b> Fonctionnalisation de nanorenforts d'amidon extrait de pommes de terre résiduelles .....	33
<b>Projet</b> Synthèse de nanofours catalytique .....	34
<b>Projet</b> Développement de biomatériaux à base de tissus et d'organes décellularisés pour la médecine.....	35
<b>Projet</b> Nano-MOFs : applications environnementales, sanitaires, biologiques et médicales.....	36
<b>Projet</b> Membranes de nanofiltration/ultrafiltration nettoyables à l'aide des gaz.....	37
<b>Thème porteur – Organique</b> .....	<b>38</b>
<b>Projet</b> Construction supramoléculaire en cristaux organiques .....	39
<b>Projet</b> Transposition d'alcools chiraux catalysée par le rhénium.....	40
<b>Projet</b> Polycyclisation radicalaire.....	41
<b>Projet</b> Étude de la réaction de cycloaddition de Diels-Alder pseudo-intramoléculaire avec N-oxydes d'énaminones.....	42
<b>Projet</b> Étude de la réaction de cyclisation radicalaire photocatalysée pour la génération d'indolines fonctionnalisées..	43
<b>Projet</b> Mécanisme de réactions de synthèse de polymères.....	44
<b>Projet</b> Synthèses de catalyseurs organométalliques pour la réaction de Cossee-Arlman .....	45
<b>Projet</b> Changement de conformation électrochimique d'un oligonucléotide .....	46
<b>Projet</b> Synthèse de dérivés de tétrathiafulvalène pour la conductivité organique .....	47
<b>Projet</b> Synthèse de dérivés d'azobenzène pour le stockage d'énergie.....	48

<b>Thème porteur – Pharmaceutique</b> .....	<b>49</b>
<b>Projet</b> Optimisation d’inhibiteurs de TTPS pour lutter contre le SARS-Cov-2 et d’autres virus respiratoires .....	50
<b>Projet</b> Développement de petites molécules apélinergiques pour le traitement de maladies cardiovasculaires .....	51
<b>Projet</b> Développement de nouveaux inhibiteurs de l’ATP synthase bactérienne.....	52
<b>Projet</b> Étude de la relation structure-perméabilité des macrocycles semi-peptidiques.....	53
<b>Projet</b> Optimisation de l’affinité et du passage de la BHE des agonistes sélectifs du récepteur NTS2 pour le traitement de la douleur. ....	54
<b>Projet</b> Synthèse d’inhibiteurs macrocycliques ciblant l’interaction protéine-protéine entre SRAS-CoV-2 et ACE-2.....	55
<b>Projet</b> Cocristaux pharmaceutiques .....	56

## **Thème porteur - Analytique**

## Jean-Philippe Bellenger

**Projet** Étude du couplage fixation d'azote, production de méthane par les bryophytes de la forêt boréale 1 – Cycle du méthane

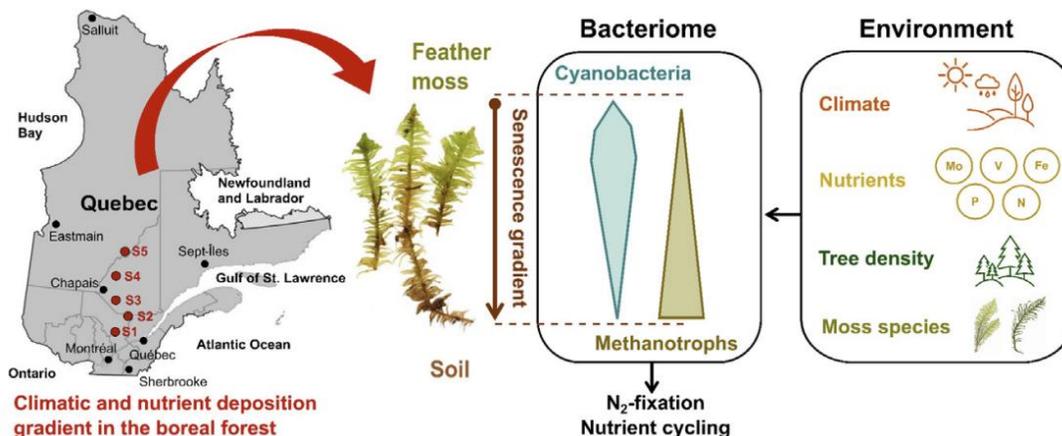
**Disponibilités**  Automne  Hiver  Été

**Thème(s)** Analytique, Environnemental.

**Mots-clés** Cycle du méthane, Bryophytes, Chromatographie gazeuse, Analyse élémentaire.

### Résumé du projet

Les bryophytes jouent un rôle essentiel dans les cycles du carbone et de l'azote en forêt boréale. Leur rôle dans les émissions nettes de méthane reste cependant très controversé. Dans une récente étude nous avons observé que les méthanotrophes (bactéries consommant le méthane) représente une part importante des communauté fixatrice d'azote présent sur les mousses. Le projet vise à évaluer le lien entre consommation de méthane de activité de fixation d'azote.



### Publications pertinentes

- (1) Renaudin et al. (2022) *Journal of Ecology* **110**: 1403-1418
- (2) Renaudin et al. (2022) *Science of the Total Environment* **837**: 155761
- (3) Leppanen et al. (2013) *Environmental and Experimental Botany* **90**: 62-69

### Laboratoire de Biogéochimie Boréale

**Site web** : [Bellenger Lab – Terrestrial Biogeochemistry \(wordpress.com\)](http://bellengerlab.wordpress.com)

**Personne contact** : Jean-Philippe Bellenger ([j-p.bellenger@usherbrooke.ca](mailto:j-p.bellenger@usherbrooke.ca))

## Jean-Philippe Bellenger

**Projet** Étude du couplage fixation d'azote, production de méthane par les bryophytes de la forêt boréale 2 – Qualité de l'air

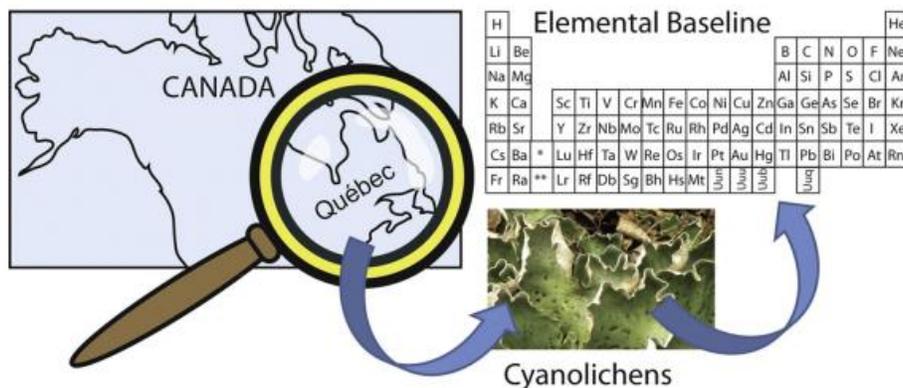
**Disponibilités**  Automne  Hiver  Été

**Thème(s)** Analytique, Environnemental.

**Mots-clés** Qualité de l'air, Bryophytes, Chromatographie gazeuse, Analyse élémentaire.

### Résumé du projet

Les bryophytes et les lichens sont couramment utilisés comme biomoniteurs de la qualité de l'air. Notre laboratoire mène actuellement un projet de large envergure de caractérisation de la qualité de l'air à l'échelle du Québec. Ce projet réalisé en collaboration avec Environnement Canada vise à générer des cartes de déposition des contaminants organique (ex. HAP) et inorganique (ex. Hg) à l'échelle de la province et identifier les principales sources de pollutions.



### Publications pertinentes

- (1) Darnajoux et al. (2015) *Science of the Total Environment* **533**: 1-7
- (2) Marvin et al. (2021) *Environmental Pollution* **285**: 117442
- (3) McDonough et al. (2022) *Environmental Monitoring Assessment* 194: 226

### Laboratoire de Biogéochimie boréale

**Site web** : [Bellenger Lab – Terrestrial Biogeochemistry \(wordpress.com\)](https://bellengerlab.wordpress.com)

**Personne contact** : Jean-Philippe Bellenger ([j-p.bellenger@usherbrooke.ca](mailto:j-p.bellenger@usherbrooke.ca))

## Adelphine Bonneau

**Projet** Caractérisation de peintures rupestres du Bouclier Canadien : provenance et transformation des matières premières

**Disponibilités** Automne Hiver Été

**Thème(s)** Matériaux, Analytique

**Mots-clés** : Art rupestre, matières colorantes, MEB-EDS, spectroscopie Raman, spectroscopie FTIR, diffraction de rayons-X, minéralogie

### Résumé du projet

Une vingtaine de sites rupestres sont présents au Québec mais à ce jour, une seule étude s'est intéressée à la composition des peintures et à la source des matières colorantes employées. Dans le cadre de votre stage, vous caractériserez des microéchantillons de peintures collectées sur deux sites québécois ainsi que des matières colorantes collectées à proximité. Le but sera de déterminer la signature chimique des matières colorantes collectées et son éventuel changement lors de sa transformation en peinture, puis de vérifier si cette signature est présente dans les échantillons de peinture prélevés. Un ensemble de méthodes analytiques sera disponible lors du stage : microscope, MEB-EDS, spectroscopie Raman, spectroscopie FTIR, diffraction de rayons-X. Il vous faudra déterminer les plus adéquates pour caractériser la signature chimique de chaque source et de chaque échantillon. \*\*Ce stage nécessite une bonne capacité à travailler sous binoculaire et avec de microéchantillons (ca. 500µm diam.).

### Publications pertinentes

(1) Macdonald, B. L., et al. (2013). "Elemental Analysis of Ochre Outcrops in Southern British Columbia, Canada." *Archaeometry* 55(6): 1020-1033.

(2) Bonneau, A., et al. (2017). "A pigment characterization approach to selection of dating methods and interpretation of rock art: the case of the Mikinak site, Lake Wapizagonke, Quebec, Canada." *Archaeometry* 59(5): 834-851.

### Laboratoire archéosciences et sciences du patrimoine

**Personne contact** : [adelphine.bonneau@usherbrooke.ca](mailto:adelphine.bonneau@usherbrooke.ca)

<https://www.facebook.com/Throughtheveilproject>

<https://www.facebook.com/DARQ-Dater-lArt-Rupestre-au-Qu%C3%A9bec-107717254431921>

## Adelphine Bonneau

**Projet** Authentification d'objets égyptiens provenant de la collection du Château Ramezay, Montréal

**Disponibilités**  Automne  Hiver  Été

**Thème(s)** Matériaux, Analytique

**Mots-clés :** Objets égyptiens, authentification d'objets patrimoniaux, matières colorantes, MEB-EDS, spectroscopie Raman, spectroscopie FTIR, diffraction de rayons-X, minéralogie

### Résumé du projet

Le Château Ramezay possède dans ses collections plusieurs objets possiblement attribués à l'Égypte antique, donnés au début du XX<sup>e</sup> siècle. Dans le cadre de la recherche sur ses collections, le Château Ramezay souhaite confirmer l'authenticité de ces objets.

Votre tâche sera de développer un protocole analytique pour chaque type d'objets (statuettes, lampes en terre cuite glaçurée, pectoraux, etc.) et/ou de matériaux (terre cuite, peinture, bois, etc.), tout en gardant à l'esprit le caractère micro-invasif des méthodes que vous devrez employer.

Vous serez co-encadré(e) par Mme Christine Brisson, directrice des collections et des expositions au Château Ramezay.

\*\*Ce stage nécessite une bonne capacité à travailler sous binoculaire et avec de microéchantillons (ca. 500µm diam.).

### Publications pertinentes

(1) Nicholson, Paul T. and Shaw, Ian, editors. Ancient Egyptian Materials and Technology. 2000. Cambridge University Press, Cambridge, xviii + 702 pp.

(2) Stuart, B. H. Analytical techniques in materials conservation. 2007. Chichester, John Wiley & Sons, 424 pp.

### Laboratoire archéosciences et sciences du patrimoine

**Personne contact :** [adelphine.bonneau@usherbrooke.ca](mailto:adelphine.bonneau@usherbrooke.ca)

<https://www.facebook.com/Throughtheveilproject>

<https://www.facebook.com/DARQ-Dater-lArt-Rupestre-au-Qu%C3%A9bec-107717254431921>

## Philippe Dauphin Ducharme

**Projet** Développement de biocapteurs électrochimiques à base d'ADN pour le suivi moléculaire dans des matrices complexes

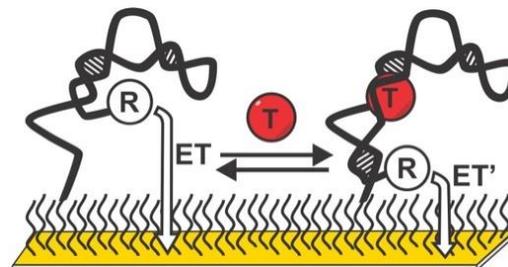
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Analytique, Matériaux, Pharmaceutique, Physique

**Mots-clés** Biocapteurs, Électrochimie, Chimie Analytique, Programmation

### Résumé du projet

Le projet consiste à développer des biocapteurs électrochimiques à base d'ADN qui sont utilisés pour mesurer les concentrations de molécules dans des matrices complexes (comme le sang) ou directement dans le corps afin de développer des outils diagnostiques et de médecine de précision. Pour ce faire, vous caractériserez l'affinité et la stabilité de l'ADN lorsqu'assemblé sur une surface à l'aide de l'électrochimie ou grâce aux plasmons de surface et solution en utilisant la fluorescence ou la calorimétrie. Vous serez également amené à apprendre à interpréter vos résultats grâce à des outils de programmation en Python.



### Publications pertinentes

- (1) ACS Sensors **2019** 4 (10), 2832-2837
- (2) Analytical Chemistry **2020** 92 (20), 14063-14068
- (3) Journal of the American Chemical Society **2017** 139 (32), 11207-11213

### Laboratoire d'électrochimie et biocapteurs

Site web : <http://ebiosensors.recherche.usherbrooke.ca>

Personne contact : [philippe.dauphin.ducharme@usherbrooke.ca](mailto:philippe.dauphin.ducharme@usherbrooke.ca)

Twitter : @ebiosensors

## Pedro A. Segura

**Projet** Présence, transformation et effets des contaminants organiques dans l'environnement

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Analytique, Environnemental, Organique

**Mots-clés** Analyse quantitative, contaminants organiques, chromatographie, spectrométrie de masse, écotoxicité

### Résumé du projet

Au cours de dernières années, notre laboratoire a développé de nouvelles méthodes de détection de contaminants organiques tels que les pesticides, les surfactants, des produits de soin personnel et des microplastiques. Nous désirons quantifier ces contaminants et étudier leur transformation dans plusieurs matrices environnementales telles que les eaux de surface, les sédiments et les tissus des abeilles. Nous nous intéressons aussi aux effets que ces contaminants peuvent avoir chez *Daphnia magna*, un crustacé très utilisé en écotoxicologie.

### Publications pertinentes

- (1) Eysseric E., Beaudry F., Gagnon C., Segura P. A. (2021) Non-targeted screening of trace organic contaminants in surface waters by a multi-tool approach based on combinatorial analysis of tandem mass spectra and open access databases. *Talanta*:122293. doi: [10.1016/j.talanta.2021.122293](https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.122293)
- (2) Lecours M.-A., Eysseric E., Yargeau V., Lessard J., Brisard G. M., Segura P. A. (2018) Electrochemistry-High Resolution Mass Spectrometry to Study Oxidation Products of Trimethoprim. *Environments* 5(1):1-18, doi: [10.3390/environments5010018](https://doi.org/10.3390/environments5010018)
- (3) Segura P. A., Racine M., Gravel A., Eysseric E., Grégoire A.-M., Rawach D., Teyssiere F.-X. (2019) Impact of method parameters on the performance of suspect screening for the identification of trace organic contaminants in surface waters. *Canadian Journal of Chemistry* 97:197–211, doi: [10.1139/cjc-2018-0298](https://doi.org/10.1139/cjc-2018-0298)

### Laboratoire de chimie analytique et environnementale

**Site web:** <http://segura-lab.recherche.usherbrooke.ca/>

**Personne contact:** Pedro A. Segura ([pa.segura@usherbrooke.ca](mailto:pa.segura@usherbrooke.ca))

**Twitter:** SeguraLab (@lab\_segura)

## **Thème porteur - Computationnel**

## Armand Soldera

**Projet** Simulation moléculaire de polymères : fusion

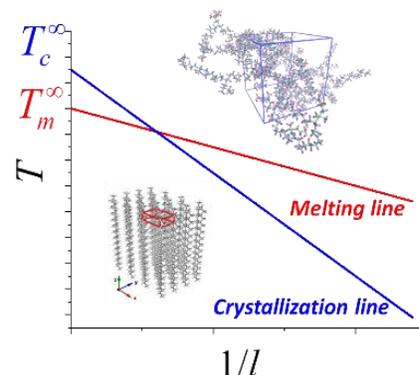
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Computationnel, Matériaux, Physique

**Mots-clés** Simulation moléculaire; Dynamique moléculaire; Polymères; Fusion

### Résumé du projet

Expérimentalement, les températures de fusion,  $T_m$ , et de cristallisation,  $T_c$ , ont un comportement linéaire par rapport à l'inverse de l'épaisseur lamellaire des cristaux,  $l$ , mais de pentes différentes (Figure). Il existe donc un point d'intersection pour une épaisseur finie conduisant à un résultat inattendu où  $T_c$  devient supérieur à  $T_m$ ! Pour justifier un tel résultat, il a été proposé que les cristaux croissent selon un processus en deux étapes : formation des cristallites suivie d'une croissance lamellaire. Ce processus à plusieurs étapes de cristallisation de chaînes enchevêtrées implique la formation d'une mésophase entre les cristallites. Nous voulons tirer parti de la simulation pour mieux comprendre un tel phénomène.



### Publications pertinentes

- (1) "Investigation of the Gibbs-Thomson Law under High Pressure using All-Atom Simulation", *Polymer* (2021), 213, 123321
- (2) "Melting of alkane nanocrystals: towards a representation of polyethylene", *Molecular Simulation* (2020), 1-5.
- (3) "Modélisation et simulation moléculaires de polymères " Techniques de l'Ingénieur, AF6042. 2018.

### Laboratoire de Physico-Chimie Moléculaire

**Site web** : [pcm.recherche.usherbrooke.ca](http://pcm.recherche.usherbrooke.ca)

**Personne contact** : [Armand.Soldera@USherbrooke.ca](mailto:Armand.Soldera@USherbrooke.ca)

LinkedIn 

## Armand Soldera

**Projet** Simulation moléculaire de polymères : transition vitreuse

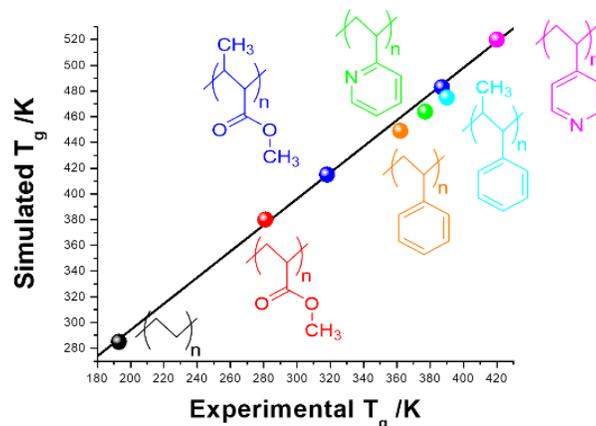
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Computationnel, Matériaux, Physique

**Mots-clés** Simulation moléculaire; Dynamique moléculaire; Polymères; Transition vitreuse

### Résumé du projet

En 1995, Anderson (Prix Nobel de Physique 1977) écrivait : "The deepest and most interesting unsolved problem in solid state theory is probably the theory of nature of glass and the glass transition." Malgré de nombreuses études, ce problème n'a pas encore révélé tous ses secrets. Il est en effet toujours fascinant de constater qu'en baissant la température, les propriétés des polymères, tels que le module de Young ou la viscosité, changent radicalement tout en laissant le polymère isotrope. Au sein du laboratoire, nous apportons une vision chimique à cette transition vitreuse en relevant les paramètres moléculaires pertinents.



### Publications pertinentes

- (1) "Local dynamics within the glass transition domain", *Scientific Reports* (2019), 9, 9638
- (2) "Extent of the glass transition in polymers envisioned by computation of mechanical properties", *Polymer* (2019), 164, 33-38.
- (3) "Modélisation et simulation moléculaires de polymères " *Techniques de l'Ingénieur*, AF6042. 2018.

### Laboratoire de Physico-Chimie Moléculaire

Site web : [pcm.recherche.usherbrooke.ca](http://pcm.recherche.usherbrooke.ca)

Personne contact : [Armand.Soldera@USherbrooke.ca](mailto:Armand.Soldera@USherbrooke.ca)

LinkedIn 

## Armand Soldera

**Projet** Simulation moléculaire de cristaux liquides

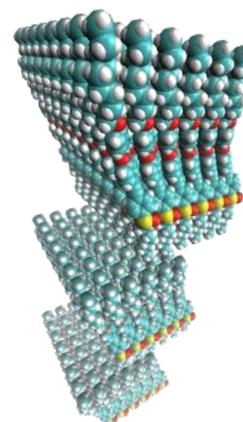
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Computationnel, Matériaux, Physique

**Mots-clés** Simulation moléculaire; Dynamique moléculaire; Cristaux liquides; Mésoscopique

### Résumé du projet

Les cristaux liquides demeurent une phase de la matière qui n'a pas encore livré tous ses secrets. Ces mésophases naissent de l'arrangement de molécules qui associent une partie rigide qui donne le caractère cristallin, avec une fraction flexible qui procure la mobilité. Une compréhension fine de ce qui s'y passe suscite beaucoup d'intérêt non seulement du point de vue fondamental, mais l'attrait de tels composés pour des applications industrielles reste d'actualité, tel l'auxéticité (matériaux avec un coefficient de Poisson négatif). Le projet consiste à étudier des phases liquides cristallines grâce à l'emploi de la simulation moléculaire soit au niveau atomistique, soit mésoscopique.



### Publications pertinentes

- (1) "Simulation of Main Chain Liquid Crystalline Polymers using a Gay-Berne/Lennard-Jones Hybrid Model", Computational Materials Science (2021), 186, 110041.
- (2) "Atomistic Simulation of the Smectic A Mesophase Induced by Halogen Bond", J. Molecular Liquids (2020), 319, 113731.
- (3) "Modélisation et simulation moléculaires de polymères " Techniques de l'Ingénieur, AF6042. 2018.

### Laboratoire de Physico-Chimie Moléculaire

**Site web :** [lpcm.recherche.usherbrooke.ca](http://lpcm.recherche.usherbrooke.ca)

**Personne contact :** [Armand.Soldera@USherbrooke.ca](mailto:Armand.Soldera@USherbrooke.ca)

LinkedIn 

## Nadi Braidy & Armand Soldera

**Projet** Synthèse, caractérisation et simulation de catalyseurs

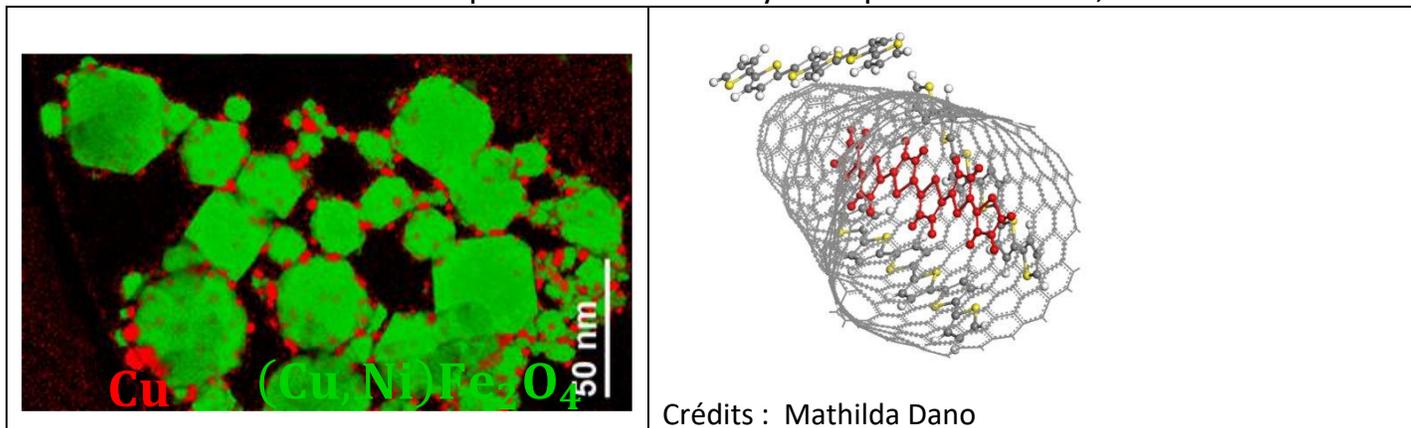
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Computationnel, Analytique

**Mots-clés** Simulation moléculaire, Catalyse, nanocornes de carbone, nanoparticules,

### Résumé du projet

Les travaux visent la fabrication, la simulation et la caractérisation de nanomatériaux pour différentes applications, telles que la catalyse ou la fabrication de nanosondes fonctionnelles. Nous utilisons des réacteurs plasmas inductif pour la fabrication de nanopoudres ou de la synthèse par voie inorganique. Les nanomatériaux sont ensuite analysés par des méthodes de microscopie électronique (à balayage et en transmission), spectroscopie et diffraction des rayons X. Nous visons d'établir une stratégie de design rationnel par l'investigation de la réactivité et de la stabilité des nanomatériaux par simulation de dynamique moléculaire,



### Publications pertinentes

- (1) Li, et al. *ChemCatChem* **11** (2019) 3959
- (2) Castellanos-Beltran, et al. *J Phys Chem C* **13** (2021) 7213
- (3) Shamloo, et al. *Polymer* **213** (2021) 123321

**Site web** : [Nadi Braidy](#) et [Armand Soldera](#)

**Personne contact** : Nadi Braidy ou Armand Soldera

## Claude Legault

**Projet** Découvrir les mécanismes réactionnels à l'aide de la modélisation moléculaire

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

### Thème(s)

Computational, Organique

**Mots-clés** Étude de mécanismes, réactivité, modélisation, propriétés chimiques

### Résumé du projet

Notre groupe développe des méthodologies de synthèse et étudie de mécanismes réactionnels. L'objectif ultime est de créer et améliorer des méthodes qui permettront la synthèse de molécules complexes avec un impact moindre pour l'environnement. Notre approche se démarque par une interaction dynamique entre les études expérimentales et computationnelles, afin d'obtenir rapidement de l'information fine sur les mécanismes de réaction. Ce niveau de compréhension mène à un potentiel prédictif et un développement en laboratoire facilité. Le projet de stage pourrait porter sur des sujets diversifiés, mais ayant comme point commun l'utilisation de la modélisation moléculaire afin de fournir des informations fondamentales cruciales pour la progression de projets de laboratoire. En particulier, le projet utilisera la mécanique quantique (QM), tel que les méthodes DFT afin de comprendre et prédire la réactivité et les sélectivités observées dans diverses réactions en chimie organique et organométallique.

### Publications pertinentes

(1) *ACS Catalysis* **2021**, *11*, 8902-8914 (DOI: [10.1021/acscatal.1c02172](https://doi.org/10.1021/acscatal.1c02172))

(2) *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 8154-8171 (DOI: [10.1021/acs.joc.1c00608](https://doi.org/10.1021/acs.joc.1c00608))

(3) *Chem. Sci.* **2021**, *12*, 1503-1512 (DOI: [10.1039/D0SC03304A](https://doi.org/10.1039/D0SC03304A))

### Groupe de recherche du professeur Claude Y. Legault

Site web : <http://cyl.recherche.usherbrooke.ca/>

Personne contact : Claude Legault ([claude.legault@usherbrooke.ca](mailto:claude.legault@usherbrooke.ca))

Twitter [@CYL\\_Lab](https://twitter.com/CYL_Lab)

## Patrick Ayotte

**Projet** Effets de confinement sur les dynamiques ro-translationnelles et sur les cinétiques de conversion des isomères de spin nucléaire de H<sub>2</sub>O encapsulé dans les endofullerènes, H<sub>2</sub>O@C<sub>60</sub>

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Computationnel, Matériaux, Physique.

**Mots-clés** Spectroscopie, modélisation moléculaire, simulations numériques, rotateur confiné quantique, isomères de spins nucléaires.

### Résumé du projet

Les dynamiques rotranslationnelles sous confinement présentent de très intéressantes propriétés découlant du couplage entre les degrés de liberté positionnels et orientationnels. L'interprétation quantitative des spectres rotationnels dans l'infrarouge lointain, et rovibrationnels dans l'infrarouge moyen, à haute résolution à l'aide du modèle du rotateur asymétrique quantique confiné permet d'élucider les schémas de couplage entre les états quantiques rotationnels et translationnels. Il permet aussi de comprendre comment le mélange des états, qui découle du couplage rotation-translation, engendre de ce fait de nouvelles voies de conversion des isomères de spin nucléaires par le biais du couplage spin-rotation. Ce projet de physico-chimie moléculaire présente de nombreuses opportunités et de beaux défis dans les volets expérimentaux, soit en spectroscopie et en sciences des matériaux, comme dans les volets théoriques, de simulations et de modélisation.

### Publications pertinentes

- (1) C. Wespiser, P. Ayotte and A. Soldera, *Exploring Rotation-Translation Coupling for a Confined Asymmetric Rotor Using Molecular Dynamics Simulations: The Case of the Water Molecule Trapped Inside a Rare Gas Matrix*, Mol. Sim. (2020).
- (2) P.-A. Turgeon, J. Vermette, G. Alexandrowicz, Y. Peperstraete, M. Bertin, L. Philippe, J.-H. Fillion, X. Michaut and P. Ayotte, *Confinement effects on the nuclear spin isomer conversion of H<sub>2</sub>O*, J. Phys. Chem. A **121**, 1571-1576 (2017)
- (3) P.-A. Turgeon, P. Ayotte, E. Lisitsin, Y. Meir, T. Kravchuk, and G. Alexandrowicz, *Preparation, isolation, storage, and spectroscopic characterization of water vapor enriched in the ortho-H<sub>2</sub>O nuclear spin isomer*, Phys. Rev. A **86**, 062710 (2012).

### Laboratoire de chimie des surfaces

**Site web** : [Laboratoire Ayotte | Cinétique et dynamique dans les glaces \(usherbrooke.ca\)](#)

**Personne contact** : Dr. Thomas Putaud, stagiaire postdoctoral, local D1-1121 ;  
tel. : 819-821-6483 ; email : [Thomas.Putaud@USherbrooke.ca](mailto:Thomas.Putaud@USherbrooke.ca)

## **Thème porteur - Matériaux**

## Abderraouf Boucherif

**Projet** Fabrication et caractérisation des Pseudo-substrats à base de Si (Ge)

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Physique, Computationnel

**Mots-clés** Electrochimie, semi-conducteurs, porosification, recuit thermique, caractérisation structurale

### Résumé du projet

Nous avons réussi au cours des dernières années à développer une méthode originale permettant de réduire considérablement la densité de dislocations dans le Ge élaboré sur substrat Si [1]. Le pseudo substrat ainsi démontré constitue une nouvelle opportunité aux diverses applications optoélectroniques sur substrat de Si qui n'étaient habituellement possible que sur substrats III-V [2].

Les sujets de recherche proposés s'inscrivent dans ce contexte et portent sur le traitement après-croissance et la caractérisation des couches epitaxiales pouvant servir comme pseudo-substrat à base des matériaux Si (Ge) pour la croissance des matériaux III-V de bonne qualité structurale.

### Publications pertinentes

(1) Bioud et al, Uprooting defects to enable high-performance III–V optoelectronic devices on silicon, Nature Communications 10: 4322 (2019)

(2) Pougoué et al, Direct growth of GaAs solar cells on Si substrate via mesoporous Si buffer Solar Energy Materials and Solar Cells 217, 110641. (2020)

### Groupe d'Épitaxie et Electrochimie des Semiconducteurs

**Site web:** <https://www.usherbrooke.ca/gmecanique/departement/corps-professoral/abderraouf-boucherif>

**Personne contact :** Bouraoui Ilahi [bouraoui.ilahi@usherbrooke.ca](mailto:bouraoui.ilahi@usherbrooke.ca)

## Abderraouf Boucherif

**Projet** Développement de batteries Li-ion avancées pour les véhicules électriques du futur

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Organique, Physique

**Mots-clés** Electrochimie, Batterie Li-ion, semi-conducteurs, Nanostructure, Synthèse et caractérisation des matériaux

### Résumé du projet

En bref, nous travaillons sur la nanostructuration de semi-conducteurs tels que le silicium pour la fabrication de batteries Li-ion avancées. Bien que le silicium, en tant que matériau anodique des batteries Li-ion, ait le potentiel pour permettre la plus grande capacité théorique (10 fois plus que celle du graphite), et permettrait une densité d'énergie accrue d'environ 40%, l'utilisation commerciale des batteries Li-ion à base de silicium n'a pas encore été possible. Les deux principaux problèmes qui empêchent l'utilisation généralisée de cette technologie sont les suivants : (i) les usines de batteries actuelles ne peuvent pas changer d'échelle (scale up) assez rapidement, si tant est que cela soit possible, et (ii) les cellules produites ne sont pas abordables, en raison du coût associé au matériau utilisé et au processus de production.

Nous avons développé une nouvelle technologie qui aborde les deux problèmes en même temps. Nous aimerions engager un stagiaire ambitieux, intelligent et enthousiaste pour nous aider à développer cette technologie. Cela comprend, sans s'y limiter, l'étude des matériaux, la fabrication des batteries, les tests de performance et l'analyse des données.

### Publications pertinentes

- (1) A. Dupuy, M. R. Aziziyani, D. Machon, R. Arès, A. Boucherif, Anisotropic mesoporous germanium nanostructures by fast bipolar electrochemical etching, *Electrochimica Acta*, Vol. 378, P. 137935, 2021.
- (2) A. Dupuy, A. Roland, M. R. Aziziyani, S. Sauze, D. Machon, R. Arès, A. Boucherif, Monolithic integration of mesoporous germanium: A step toward high-performance on-chip anode, *Materials Today Communications*, Vol. 26, P. 101820, 2021.
- (3) S. Sauze, M. R. Aziziyani, P. Brault, G. Kolhatkar, A. Ruediger, A. Korinek, D. Machon, R. Arès, A. Boucherif, Integration of 3D nanographene into mesoporous germanium, *Nanoscale*, Vol. 12, Issue 47, P. 23984-23994, 2020.

### Groupe d'Épitaxie et Electrochimie des Semiconducteurs

**Site web** : <https://www.usherbrooke.ca/gmecanique/departement/corps-professoral/abderraouf-boucherif/>

**Personne contact** : Mohammad Reza Aziziyani, [mr.aziziyani@usherbrooke.ca](mailto:mr.aziziyani@usherbrooke.ca)

## Adelphine Bonneau

**Projet** Fabrication et caractérisation de noirs de carbone et de suie archéologiques

**Disponibilités** Automne Hiver Été

**Thème(s)** Matériaux, Analytique

**Mots-clés :** Carbone amorphe, Suie, Microscopie électronique à balayage et en transmission, Spectroscopie moléculaire, Diffraction des rayons-X

### Résumé du projet

La suie et les noirs de carbone (i.e. combustion incomplète de matières organiques) composent la majorité des peintures et des encres de couleur noire de la préhistoire au XVIII<sup>e</sup> siècle. Produits à partir de matières premières végétales (cires, bois, noyaux de fruits, résine, etc.) et animales (os, ivoire, graisse, sang, etc.), leur composition et leur structure chimique sont actuellement peu connues, au contraire de leurs homologues industriels, produits dès le XIX<sup>e</sup> siècle à partir d'hydrocarbures. En s'appuyant sur des textes historiques et ethnographiques, vous réaliserez des montages expérimentaux qui permettront de fabriquer des suies et des noirs de carbone dans des conditions contrôlées se rapprochant au mieux de celles décrites dans les textes. Vous devrez par la suite les caractériser par une combinaison analytique (MEB, MET, spectroscopie Raman, diffraction des rayons-X, spectroscopie FTIR) pour déterminer la composition et la structure des matériaux formés ainsi que les méthodes les plus pertinentes pour la poursuite du projet. Ce stage se déroulera entre le département de chimie et le département de génie chimie incluant une codirection avec la Professeure Inès Achouri.

### Publications pertinentes

(1) Merlen, A., et al. (2017). "A Guide to and Review of the Use of Multiwavelength Raman Spectroscopy for Characterizing Defective Aromatic Carbon Solids: from Graphene to Amorphous Carbons." *Coatings* 7(10): 153.

(2) Bonneau, A., et al. (2017). "Successfully Dating Rock Art in Southern Africa Using Improved Sampling Methods and New Characterization and Pretreatment Protocols." *Radiocarbon* 59(3): 659-677.

### Laboratoire archéosciences et sciences du patrimoine

**Personne contact :** [adelphine.bonneau@usherbrooke.ca](mailto:adelphine.bonneau@usherbrooke.ca)

<https://www.facebook.com/Throughtheveilproject>

<https://www.facebook.com/DARQ-Dater-lArt-Rupestre-au-Qu%C3%A9bec-107717254431921>

## Allison Wustrow

**Projet** Améliorer les batteries avec les cathodes hétéroanioniques

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Inorganique

**Mots-clés** Batteries, Matériaux hétéroanionique, Synthèse de solides, Énergie

### Résumé du projet

Les batteries sont une technologie indispensable pour l'énergie verte, les voitures électriques, etc. Aujourd'hui, les plus communes batteries sont les batteries Li-Ion avec une cathode d'oxyde de métal de transition. Avec un mélange de métaux, il est possible d'améliorer la performance d'une cathode : par exemple, les cathodes NMC sont un oxyde de nickel, manganèse et cobalt. Une composition anionique différente peut aussi avoir un effet bénéfique, pourtant la synthèse des matériaux hétéroanionique est plus compliquée que celle des matériaux hétérocationique. Pourtant avec la nouvelle technique « cometathèse » on peut cibler les matériaux hétéroanionique comme les oxysulfures de fer pour comprendre le rôle que les anions ont en déterminant les propriétés d'une cathode.

### Publications pertinentes

(1) Zhu, B., Scanlon, D. O., *ACS Appl. Energy Mater.* **2022**, 5, 575-584

<https://doi.org/10.1021/acsaem.1c03094>

(2) Wustrow, A., Huang, G., McDermott, M. J., O'Nolan, D., Liu, C-H., Tran, G. T., McBride, B. C., Dwaraknath, S. S., Chapman, K. W., Billinge, S. J. L., Persson, K. A., Thornton, K., Neilson, J. R.

*Chem. Mater.* **2021**, 33, 3692-3701 <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.1c00700>

(3) Wustrow, A., Hancock, J. C., Incorvati, J. T., Vaughey, J. T., Poepelmeier, K. R.. *ACS Appl.*

*Energy Mater.* **2019**, 2, 2080-2086 <https://doi.org/10.1021/acsaem.8b02141>

### Wustrow Group

**Site web** : <https://labowustrow.recherche.usherbrooke.ca>

**Personne contact** : Allison Wustrow (allison.wustrow@usherbrooke.ca)

**Twitter** @allisonwustrow

## Rémi Dreyfus

**Projet** Détection de contraintes à l'aide de nanocapsules formées de nanoparticules d'or

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

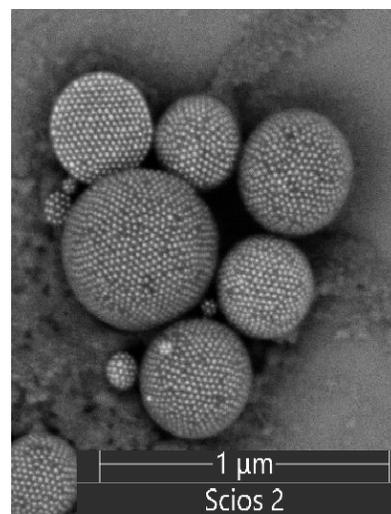
### Thème(s)

Matériaux, Physique

**Mots-clés** Nanoparticules d'or (AuNPs), micro/nanocapsules plasmoniques, mécanofluorescence

### Résumé du projet

Le projet portera sur le développement et la mise à l'essai de nouveaux capteurs potentiellement implantables qui sont sensibles aux déformations et aux forces, simples à mettre en œuvre et à utiliser, et peu invasifs. Le principe des capteurs repose sur leur structure à l'échelle nanométrique qui leur confère des propriétés optomécaniques uniques. Nous concevrons des microcapsules (cf photo ci-contre) qui émettent un signal de fluorescence dans l'infrarouge en fonction de leur déformation. Travailler dans cette plage du spectre permet la détection de la déformation à travers des tissus diffusants. Dans le cadre de son projet l'étudiant sera amené à synthétiser les nouvelles microcapsules, étudier les lois mécaniques constitutives des microcapsules.



### Publications pertinentes

- (1) C. Burel, A. AlSayed, L. Malassis, C.B. Murray, B. Donnio and R. Dreyfus, ***Plasmonic-based mechanochromic microcapsules as strain sensors***, *Small*, 13, 1701925 (2017)
- (2) C. Burel, A. Teolis, A. AlSayed, C.B. Murray, B. Donnio and R. Dreyfus, ***Plasmonic elastic capsules as colorimetric reversible pH microsensors***, *Small* 16, 1903897 (2020)
- (3) C. Burel, O. Ibrahim, E. Marino, H. Bharti, C.B. Murray, B. Donnio, Z. Fakhraai, R. Dreyfus ***Tunable Plasmonic Microcapsules with Embedded Noble Metal Nanoparticles for Optical Microsensing***, *ACS Applied Nanomaterials*, 15, 2, 2828–283 (2022)

### Laboratoire Nanotechnologies et Nanosystèmes

Site web : [www.remidreyfus.wordpress.com](http://www.remidreyfus.wordpress.com)

Personne contact : Rémi Dreyfus, [remi.dreyfus@usherbrooke.ca](mailto:remi.dreyfus@usherbrooke.ca)

## Rémi Dreyfus

**Projet** Détection de mercure à l'aide de microcapsules formées de nanoparticules d'or

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

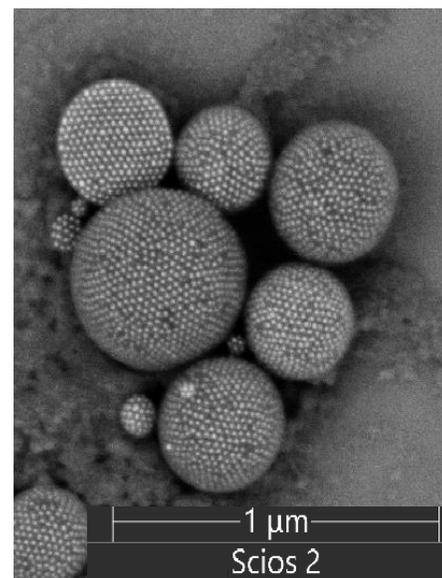
### Thème(s)

Matériaux, Physique

**Mots-clés** Nanoparticules d'or (AuNPs), micro/nanocapsules plasmoniques, microfluidique

### Résumé du projet

Nous souhaiterions développer un nouveau type de capteurs pour la détection du mercure. Nous avons réussi à synthétiser des micro/nanocapsules (MCs, photo ci-contre) à base de nanoparticules d'or (AuNPs) [1,2]. Nous allons d'abord tester nos microcapsules à base d'AuNPs pour évaluer leurs performances dans la détection du mercure. Les MCs seront immergés dans une solution de  $\text{HgCl}_2$  dissous. L'évolution du spectre d'absorption plasmonique des MCs sera suivie en fonction du temps. L'évolution de l'absorption témoignera de la présence de  $\text{Hg}^{2+}$  qui interagira avec les AuNPs des capsules. Nous pensons qu'une sensibilité élevée devrait être atteinte puisque la forte interaction entre  $\text{Hg}^{2+}$  et Au concentrera le  $\text{Hg}^{2+}$  à proximité des capsules.



### Publications pertinentes

- (1) C. Burel, A. AlSayed, L. Malassis, C.B. Murray, B. Donnio and R. Dreyfus, **Plasmonic-based mechanochromic microcapsules as strain sensors**, *Small*, 13, 1701925 (2017)
- (2) C. Burel, A. Teolis, A. AlSayed, C.B. Murray, B. Donnio and R. Dreyfus, **Plasmonic elastic capsules as colorimetric reversible pH microsensors**, *Small* 16, 1903897 (2020)
- (3) C. Burel, O. Ibrahim, E. Marino, H. Bharti, C.B. Murray, B. Donnio, Z. Fakhraai, R. Dreyfus **Tunable Plasmonic Microcapsules with Embedded Noble Metal Nanoparticles for Optical Microsensing**, *ACS Applied Nanomaterials*, 15, 2, 2828–283 (2022)

### Laboratoire Nanotechnologies et Nanosystèmes

Site web : [www.remidreyfus.wordpress.com](http://www.remidreyfus.wordpress.com)

Personne contact : Rémi Dreyfus, [remi.dreyfus@usherbrooke.ca](mailto:remi.dreyfus@usherbrooke.ca)

## Jérôme Claverie

**Projet** Nouveaux photocatalyseurs pour la photosynthèse artificielle : vers des carburants renouvelables

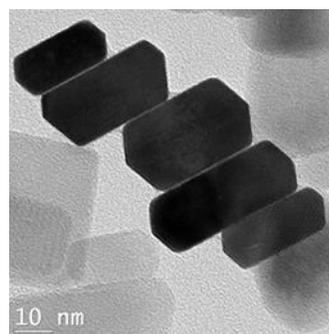
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Organique, Inorganique, Physico-Chimie, Analyse

**Mots-clés** Photocatalyse, photosynthèse artificielle, nanomatériaux

### Résumé du projet

Nous mettons au point des photocatalyseurs hétérogènes pour convertir l'eau en hydrogène et le CO<sub>2</sub> en méthanol sous l'effet de la lumière solaire. L'étudiant(e) sera amené à synthétiser les photocatalyseurs, les caractériser (TEM, XRD, électrochimie, photophysique), les tester (génération d'hydrogène) et en comprendre le mécanisme d'action. Ces mêmes photocatalyseurs peuvent être utilisés pour des applications diverses, comme la photopolymérisation ou la photodépollution. L'image est un cliché TEM d'un photocatalyseur synthétisé dans le groupe.



### Publications pertinentes

- (1) Herbaut, M.; Siaj, M.; Claverie, J. P. Nanomaterials-Based Water Splitting: How Far Are We from a Sustainable Solution? *ACS Appl. Nano Mater.* 2021, 4 (2), 907–910.
- (2) Zhang, J.; Huang, Y.; Jin, X.; Nazartchouk, A.; Liu, M.; Tong, X.; Jiang, Y.; Ni, L.; Sun, S.; Sang, Y.; et al. Plasmon Enhanced Upconverting Core@triple-Shell Nanoparticles as Recyclable Panchromatic Initiators (Blue to Infrared) for Radical Polymerization. *Nanoscale Horizons* 2019, 4 (4), 907–917.
- (3) Wang, X.; Gao, W.; Zhao, Z.; Zhao, L.; Claverie, J. P.; Zhang, X.; Wang, J.; Liu, H.; Sang, Y. Efficient Photo-Electrochemical Water Splitting Based on Hematite Nanorods Doped with Phosphorus. *Appl. Catal. B Environ.* 2019, 248, 388–393.

**Chaire de Recherche du Canada en Chimie des Matériaux Organiques et Hybrides Avancés**

**Site web :** <http://moha.recherche.usherbrooke.ca/>

**Personne contact :** Jérôme Claverie : [jerome.claverie@usherbrooke.ca](mailto:jerome.claverie@usherbrooke.ca)

**Twitter** @JeromeClaverie1

## Jérôme Claverie

**Projet** Polymères graphitisants pour la préparation de matériaux carbonés

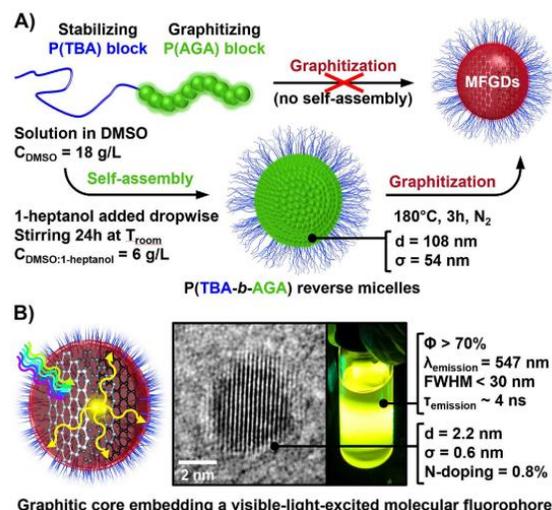
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Polymères, Organique, Inorganique, Analyse

**Mots-clés** Polymères, points quantiques, carbone

### Résumé du projet

Nous mettons au point une famille de polymères qui sous l'effet d'un stimulus se transforme en carbone. Les matériaux à base de carbone (graphène, nanotube, fullerène, etc...) ont des propriétés remarquables, mais ils ne sont pas imprimables, tractables ou transformables. Grâce au concept des polymères graphitisants, il est possible d'utiliser ces polymères en précurseur de carbone, et de les mettre en forme avant de les transformer en carbone. L'image représente des points quantiques de carbone obtenus à partir de tels polymères.



### Publications pertinentes

- (1) de Boëver, R.; Langlois, A.; Li, X.; Claverie, J. P. Graphitic Dots Combining Photophysical Characteristics of Organic Molecular Fluorophores and Inorganic Quantum Dots. *JACS Au* 2021.
- (2) Belanger, R. L.; Commarieu, B.; Paoletta, A.; Daigle, J.; Bessette, S.; Vijh, A.; Claverie, J. P.; Zaghbi, K. Diffusion Control of Organic Cathode Materials in Lithium Metal Battery. *Sci. Rep.* 2019, 9 (1), 1213.
- (3) Zhang, J.; Jin, X.; Yu, X.; Sang, Y.; Razzari, L.; Liu, H.; Claverie, J. An In Situ Polymerization-Encapsulation Approach to Prepare TiO<sub>2</sub>-Graphite Carbon-Au Photocatalysts for Efficient Photocatalysis. *Part. Part. Syst. Charact.* 2018, 35 (1), 1-6.

**Chaire de Recherche du Canada en Chimie des Matériaux Organiques et Hybrides Avancés**

**Site web :** <http://moha.recherche.usherbrooke.ca/>

**Personne contact :** Jérôme Claverie : [jerome.claverie@usherbrooke.ca](mailto:jerome.claverie@usherbrooke.ca)

**Twitter** @JeromeClaverie1

## Jérôme Claverie

**Projet** Nouveaux polymères électrolytes solides pour les batteries Li, Na et Zn

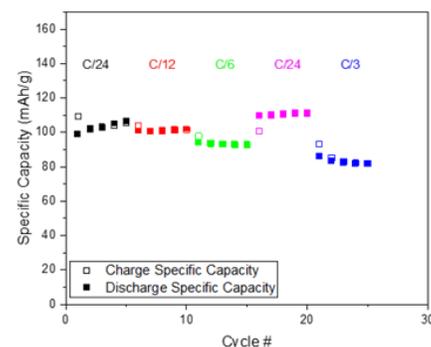
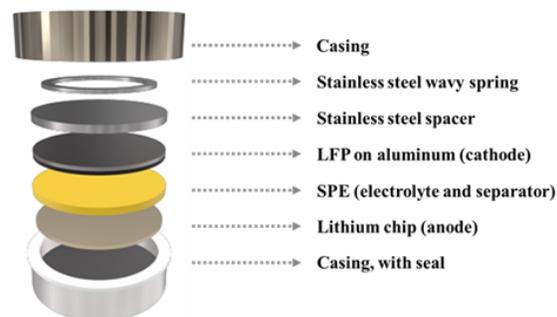
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Polymères, Electrochimie

**Mots-clés** SPE, batterie, stockage d'énergie

### Résumé du projet

Notre groupe met au point de nouveaux polymères comme électrolytes solides (SPE) pour les batteries lithium. Dans ce projet, vous serez amené à synthétiser le polymère, le caractériser (GPC, RMN, DSC, DMA, XRD), caractériser le polymère une fois dopé avec le sel conducteur (électrochimie, XRD, SS-RMN), fabriquer les piles et les tester (méthodes d'électrochimie, SEM). Ce projet pourrait se faire en collaboration avec la compagnie Hydro-Québec. L'image représente la première pile Li-polymère fonctionnant à température ambiante, et fabriquée dans notre groupe de recherche.



### Publications pertinentes

- (1) StOnge, V.; Cui, M.; Rochon, S.; Daigle, J.C.; Claverie, J. P. Tuning of Crystallinity via Statistical Copolymerization Leads to All-Solid Li-Metal Batteries Effective at Ambient Temperature, *Nature Comm. Mats.*, 2021, in Press
- (2) Belanger, R. L.; Commarieu, B.; Paoletta, A.; Daigle, J.; Bessette, S.; Vijn, A.; Claverie, J. P.; Zaghbi, K. Diffusion Control of Organic Cathode Materials in Lithium Metal Battery. *Sci. Rep.* 2019, 9 (1), 1213.
- (3) Jalbert, P.-M.; Commarieu, B.; Daigle, J.-C.; Claverie, J. P.; Zaghbi, K. A 3D Network Based on Poly(ε-Caprolactone) Macromonomers as Polymer Electrolyte for Solid State Lithium Metal Batteries. *J. Electrochem. Soc.* 2020, 167 (8), 080527.

**Chaire de Recherche du Canada en Chimie des Matériaux Organiques et Hybrides Avancés**

**Site web :** <http://moha.recherche.usherbrooke.ca/>

**Personne contact :** Jérôme Claverie : [jerome.claverie@usherbrooke.ca](mailto:jerome.claverie@usherbrooke.ca)

**Twitter** @JeromeClaverie1

**Jérôme Claverie et Armand Soldera**

**Projet** Prédiction de la température de transition vitreuse par intelligence artificielle

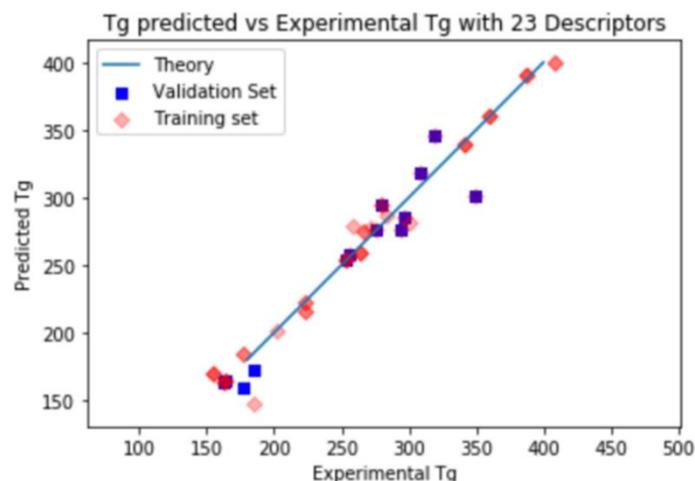
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Polymères, Intelligence Artificielle

**Mots-clés** transition vitreuse, machine learning, dynamique moléculaire

### Résumé du projet

Il s'agit d'un nouveau projet pour nos deux groupes de recherche, et qui a reçu un financement considérable de la part de la Fondation Canadienne pour l'Innovation (6.7 M\$). Le but est de mettre au point des algorithmes de prédiction de la transition vitreuse en utilisant une approche de machine learning. Une approche génomique sera utilisée pour bâtir les polymères et mesurer les contraintes torsionnelles par DFT. La connaissance de Python est souhaitée. Des travaux préliminaires (figure) sur une base de données restreinte montrent que la démarche fonctionne au-delà de toute espérance.



### Publications pertinentes

- (1) F. Godey, M.O. Bensaid, A. Soldera, Extent of the glass transition in polymers envisioned by computation of mechanical properties, *Polymer*, 164, **2019**, 33-38.
- (2) F. Godey, , A. Fleury, A. Soldera Local dynamics within the glass transition domain. *Sci Rep* 9, **2019**, 9638.

### Chaire de Recherche du Canada en Chimie des Matériaux Organiques et Hybrides Avancés

**Site web** : <http://moha.recherche.usherbrooke.ca/> et <http://lpcm.recherche.usherbrooke.ca/fr/>

**Personne contact** : [jerome.claverie@usherbrooke.ca](mailto:jerome.claverie@usherbrooke.ca) et [armand.soldera@usherbrooke.ca](mailto:armand.soldera@usherbrooke.ca)

**Twitter** @JeromeClaverie1

## Jocelyn Veilleux

**Projet** Recyclage des batteries lithium-ion : contrôle des impuretés

**Disponibilités** Automne Hiver Été

**Thème(s)** Matériaux, Inorganique, Analytique

**Mots-clés** Batterie lithium-ion; Recyclage; Impuretés; Séparation; Purification

### Résumé du projet

Le projet proposé s'inscrit dans le cadre d'une subvention de recherche visant la valorisation du broyat noir (*black mass*) issu des cathodes de batteries au lithium-ion en fin de vie pour en extraire les métaux de valeur. Lors de cette extraction, il est important de contrôler la nature et la quantité des impuretés via divers procédés de séparation et de purification. La personne retenue pour ce projet se joindra à l'équipe en place pour proposer et tester diverses stratégies basées sur la précipitation, la cémentation ou l'extraction par solvant. Les analyses quantitatives font aussi partie du projet.

### Publications pertinentes

(1) Fan, E. et al. 2020. Sustainable Recycling Technology for Li-Ion Batteries and Beyond: Challenges and Future Prospects. *Chemical Reviews*, 120(14), pp. 7020-7063, <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00535>.

(2) Larouche, F. et al. 2020. Progress and Status of Hydrometallurgical and Direct Recycling of Li-Ion Batteries and Beyond. *Materials*, 13(3), pp. 801, <https://doi.org/10.3390/ma13030801>.

(3) Peng, F. et al. 2019. Impurity removal with highly selective and efficient methods and the recycling of transition metals from spent lithium-ion batteries. *RSC Advances*, 9(38), pp. 21922-21930, <https://doi.org/10.1039/c9ra02331c>.

### Groupe des plasmas, procédés et intégration des nanomatériaux

**Site web** : [www.usherbrooke.ca/gchimiquebiotech/departement/professeurs/jocelyn-veilleux/](http://www.usherbrooke.ca/gchimiquebiotech/departement/professeurs/jocelyn-veilleux/)

**Personne contact** : Jocelyn Veilleux, ing., Ph.D. ; [jocelyn.veilleux@usherbrooke.ca](mailto:jocelyn.veilleux@usherbrooke.ca)

## Jocelyn Veilleux

**Projet** Recyclage des batteries lithium-ion : effet des impuretés sur la synthèse de NMC

**Disponibilités**  Automne  Hiver  Été

**Thème(s)** Matériaux, Inorganique, Analytique

**Mots-clés** Batterie lithium-ion; Recyclage; Impuretés; Synthèse; NMC

### Résumé du projet

Le projet proposé s'inscrit dans le cadre d'une subvention de recherche visant la valorisation du broyat noir (*black mass*) issu des cathodes de batteries au lithium-ion en fin de vie pour en extraire les métaux de valeur. L'objectif est d'évaluer l'incidence des impuretés sur la performance de nouveaux matériaux de cathode de type NMC fabriqués à partir des produits recyclés. La personne retenue se joindra à l'équipe en place pour synthétiser les NMC en CSTR avec différents ratios d'impuretés, les caractériser (phase, composition, microstructure), puis les tester lors de cycles charge-décharge.

### Publications pertinentes

(1) Or, T. et al. 2020. Recycling of mixed cathode lithium-ion batteries for electric vehicles: Current status and future outlook. *Carbon Energy*, 2(1), pp. 6-43, <https://doi.org/10.1002/cey2.29>.

(2) Park, S. et al. 2019. The effect of Fe as an impurity element for sustainable resynthesis of Li[Ni<sub>1/3</sub>Co<sub>1/3</sub>Mn<sub>1/3</sub>]O<sub>2</sub> cathode material from spent lithium-ion batteries. *Electrochimica Acta*, 296, pp. 814-822, <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2018.11.001>.

(3) Zhao, Y. et al. 2020. Regeneration and reutilization of cathode materials from spent lithium-ion batteries. *Chemical Engineering Journal*, 383, pp. 123089, <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.123089>.

### Groupe des plasmas, procédés et intégration des nanomatériaux

**Site web** : [www.usherbrooke.ca/gchimiquebiotech/departement/professeurs/jocelyn-veilleux/](http://www.usherbrooke.ca/gchimiquebiotech/departement/professeurs/jocelyn-veilleux/)

**Personne contact** : Jocelyn Veilleux, ing., Ph.D. ; [jocelyn.veilleux@usherbrooke.ca](mailto:jocelyn.veilleux@usherbrooke.ca)

## Mathieu Robert

**Projet** Extraction d'alginate à partir d'algues de culture pour la synthèse de polymères bio-sourcés

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Environnemental

**Mots-clés** Biomasse marine, alginate, extraction chimique, fonctionnalisation, synthèse de polymères.

### Résumé du projet

La production d'alginate gagne actuellement en popularité pour leur utilisation dans le domaine de la plasturgie, en particulier pour la fabrication d'emballage bio-dégradable. Le projet proposé vise l'extraction de différents alginates directement à partir d'algues de culture locale. Pour ce faire, des approches chimiques seront mises à l'épreuve et la pureté des extraits sera caractérisée. Les alginates serviront ensuite à la synthèse de bio-polymères qui seront ensuite mis en forme par injection/extrusion. Finalement, une caractérisation physico-chimique, microstructurale et mécanique sera réalisée.

### Publications pertinentes

- (1) Çaykara *et al.* *Polymer*, 46 (2005), p.10750
- (2) Gong *et al.* *Polymer Degradation and Stability*, 118 (2015), p.104
- (3) Galus *et al.* *Journal of Food Engineering*, 115 (2013), p.459.

### Carrefour d'innovations en technologies écologiques (CITÉ)

**Site web** : [www.usherbrooke.ca/cite/le-cite/](http://www.usherbrooke.ca/cite/le-cite/)

**Personne contact** : Prof Mathieu Robert, [mathieu.robert2@usherbrooke.ca](mailto:mathieu.robert2@usherbrooke.ca)

## Mathieu Robert

**Projet** Fonctionnalisation de nanorenforts d'amidon extrait de pommes de terre résiduelles

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Environnemental

**Mots-clés** Biomasse agroalimentaire, amidon, extraction chimique, fonctionnalisation, synthèse de composites polymères.

### Résumé du projet

La gestion des pommes de terre résiduelle (PDT) est un problème récurrent pour les producteurs. Parallèlement, les PDT recèlent d'amidons pouvant être extraits sous forme de nanocristaux (NC). Le projet proposé vise l'extraction de NC d'amidon directement à partir de PDT résiduelles. Pour ce faire, des approches chimiques seront mises à l'épreuve et la pureté des extraits sera caractérisée. Les NC serviront ensuite à l'élaboration de composites qui seront ensuite mis en forme par injection/extrusion. Finalement, une caractérisation physico-chimique, microstructurale et mécanique sera réalisée.

### Publications pertinentes

- (1) Xu *et al.* Carbohydrate Polymer, 182 (2018), p.115
- (2) Hao *et al.* Carbohydrate Polymer, 184 (2018), p.171
- (3) Amini *et al.* Food Hydrocolloids, 57 (2016), p.132

### Carrefour d'innovations en technologies écologiques (CITÉ)

**Site web** : [www.usherbrooke.ca/cite/le-cite/](http://www.usherbrooke.ca/cite/le-cite/)

**Personne contact** : Prof Mathieu Robert, [mathieu.robert2@usherbrooke.ca](mailto:mathieu.robert2@usherbrooke.ca)

## Nadi Braidy

**Projet** Synthèse de nanofours catalytique

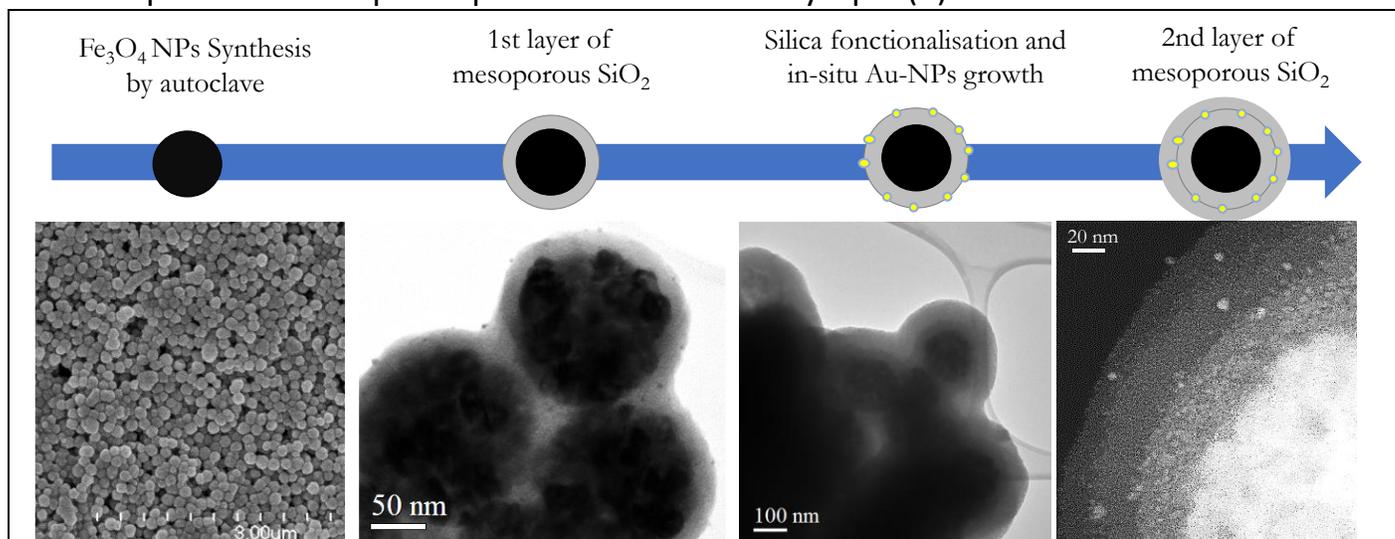
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux hybride, catalyse, caractérisation

**Mots-clés** Catalyse, nanoparticules

### Résumé du projet

Les travaux visent la synthèse de nanoparticules hybrides composées d'un cœur en ferrite recouvert d'une couche de silice mésoporeuse. Des nanoparticules d'or sont ensuite nucléées dans les pores de la silice pour constituer un matériau hybride pour la catalyse (1-2). Il s'agit alors d'utiliser ce nanomatériau hybride en tant que « nanofour », où le cœur de ferrite pourra chauffer par induction sous l'effet d'un champ magnétique et ainsi fournir la chaleur nécessaire aux nanoparticules d'or pour opérer la réaction catalytique (3).



### Publications pertinentes

- (1) Paradis-Fortin, Laura. Mémoire de maîtrise. 2016. Université de Sherbrooke
- (2) Ge et al. *Ang. Chemie – Int. Ed.* 47 (2008) 8924
- (3) Castellanos-Beltran, et al. *J Phys Chem C* **13** (2021) 7213

**Site web :** [Nadi Braidy](#)

**Personne contact :** Nadi Braidy ([nadi.braidy@usherbrooke.ca](mailto:nadi.braidy@usherbrooke.ca))

## Patrick Vermette, ingénieur

**Projet** Développement de biomatériaux à base de tissus et d'organes décellularisés pour la médecine.

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux

**Mots-clés** Biomatériaux et génie tissulaire; Culture d'îlots pancréatiques; Culture de tissus hépatiques; Bioréacteurs; Bio-adhésifs.

### Résumé du projet

Notre équipe est spécialisée dans le développement, la validation et l'homologation de nouveaux biomatériaux pour des applications concrètes en chirurgie. Par exemple, nous avons développé une nouvelle technologie permettant de décellulariser des tissus et des organes et ainsi fabriquer de nouveaux échafaudages pour la culture de tissus (pancréas et foie). Ce type d'échafaudages possède des propriétés biomimétiques uniques! Nous développons et utilisons également des bioréacteurs pour la culture tissulaire. Finalement, nous concevons une nouvelle famille de bio-adhésifs pour des applications en médecine; ex. : élimination des fuites d'air lors des chirurgies pulmonaires et traitement de plaies chroniques chez les patients diabétiques. Nous entretenons d'étroites collaborations avec plusieurs spécialistes en médecine.

### Publications pertinentes

(1) Tissue and Organ Decellularization in Regenerative Medicine. *Biotechnol. Prog.* 2018;34:1494.

(2) Decellularized pancreas as a native extracellular matrix scaffold for pancreatic islet seeding and culture. *J. Tissue Eng. Regen. Med.* 2018;12:1230.

### Laboratoire de bio-ingénierie et de biophysique

**Site web** : <https://www.usherbrooke.ca/gchimiquebiotech/departement/professeurs/patrick-vermette/>

**Personne contact** : Pr Patrick Vermette, ing., M.Sc.A., Ph.D.

**Courriel** : [Patrick.Vermette@USherbrooke.ca](mailto:Patrick.Vermette@USherbrooke.ca)

## Pierre D. Harvey

**Projet** Nano-MOFs : applications environnementales, sanitaires, biologiques et médicales

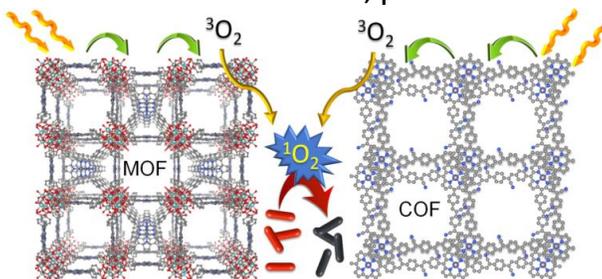
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Matériaux, Physique, Organique.

**Mots-clés** metal-organic framework (MOF), synthèse, caractérisation, photocatalyse

### Résumé du projet

Le labo Harvey conçoit des photocatalyseurs nano-MOFs pour générer les espèces réactives  $^1\text{O}_2$ ,  $\text{OH}^\bullet$  et  $\text{O}_2^{\bullet-}$  qui leur donnent des propriétés sanitaires, antimicrobiennes et anticancéreuses. Ces matériaux sont préparés et testés en laboratoire, puis à travers des collaborations, appliqués.



### Publications pertinentes

**(1)** Adrien Schlachter, Paul Asselin and Pierre D. Harvey, « Porphyrin-containing MOFs and COFs as Heterogeneous Photosensitizers for Singlet Oxygen-based Antimicrobial Nanodevices », *ACS Applied Materials & Interfaces*, **2021, Accepted**.

**(2)** Pierre D. Harvey, « Porphyrin-based MOFs as Heterogeneous Photocatalysts for the Eradication of Organic Pollutants and Toxins », *Journal of Porphyrins and Phthalocyanines*, **2021, Online**. DOI: [10.1142/S1088424621300020](https://doi.org/10.1142/S1088424621300020)

**(3)** Pierre D. Harvey and Jessica Plé, « Recent Advances in Nanoscale Metal-Organic Frameworks Towards Cancer Cell Cytotoxicity— An Overview », *Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials*, **2021, Online**. DOI: [10.1007/s10904-021-02011-3](https://doi.org/10.1007/s10904-021-02011-3)

### Harvey Group

**Site web** : <http://laboratoire-pierre-d-harvey.recherche.usherbrooke.ca/>

**Personne contact** : [Pierre.Harvey@USherbrooke.ca](mailto:Pierre.Harvey@USherbrooke.ca)

[Laboratoire Harvey USherbrooke - Accueil \(facebook.com\)](#)

## Yue Zhao

**Projet** Membranes de nanofiltration/ultrafiltration nettoyables à l'aide des gaz

**Disponibilités**  Automne x  Hiver x  Été

**Thème(s)** Matériaux, Organique

**Mots-clés** Membrane de séparation; polymères sensibles au gaz CO<sub>2</sub>; nanocristaux de cellulose

### Résumé du projet

Le projet a pour but de développer une membrane pour nanofiltration et ultrafiltration à base des nanocristaux de cellulose fonctionnalisés avec un polymère sensible au CO<sub>2</sub>. En présence du gaz en solution aqueuse, la membrane peut changer la taille de pores, la balance hydrophile-hydrophobe, et l'état de charges électriques. Cette propriété est explorée pour rendre le nettoyage de la membrane plus écologique et économiquement plus viable.

### Publications pertinentes

**(1)** L. Dong, Y. Zhao "CO<sub>2</sub>-Switchable Membranes: Structures, Functions, and Separation Applications in Aqueous Medium" *J. Mater. Chem. A* **2020**, *8*, 16738-16746.

**(2)** L. Dong, W. Fan, X. Tong, H.J. Zhang, M. Chen, Y. Zhao "CO<sub>2</sub>-responsive Graphene Oxide/Polymer Composite Nanofiltration Membrane for Water Purification" *J. Mater. Chem. A* **2018**, *6*, 6785-6791.

**(3)** D. Han, X. Tong, O. Boissière, Y. Zhao "General Strategy for Making CO<sub>2</sub>-Switchable Polymers" *ACS Macro Lett.* **2012**, *1*, 57-61.

### Laboratoire de polymères et de cristaux liquides

**Site web** : <http://zhao.recherche.usherbrooke.ca/>

**Personne contact** : Dr. Farhad Farnia ([farhad.farnia@usherbrooke.ca](mailto:farhad.farnia@usherbrooke.ca))

## **Thème porteur – Organique**

## Leonard R. MacGillivray

**Projet** Construction supramoléculaire en cristaux organiques

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Organique, Matériaux, Environnemental

**Mots-clés** ingénierie des cristaux, chimie supramoléculaire, synthèse organique, chimie verte

### Résumé du projet

La formation fiable de liaisons covalentes dans les solides organiques peut donner accès à des molécules de produits qui peuvent être totalement indisponibles en solution. Des liaisons covalentes se forment dans les solides sans utilisation de solvant et par voie mécano-chimique. Nous développons une méthode pour former des liaisons covalentes dans des cristaux en utilisant les principes de la chimie supramoléculaire. Les petites molécules, les complexes de coordination et les structures métal-organiques assemblent les réactifs en géométries pour les cycloadditions. La figure montre la construction supramoléculaire d'un cubane.



### Publications pertinentes

- (1)** Li, C.; Sinnwell, M.A.; Swenson, D.C.; MacGillivray, L.R. Cubane-forming cyclic dienes that exhibit orthogonal reactivities in the solid state. *ChemComm.* **2021**, *57*, 6725-6727.
- (2)** Sinnwell, M.A.; Groeneman, R.H.; Ingenthron, B.J.; Li, C.; MacGillivray, L.R. Supramolecular Construction of a Cyclobutane Ring System with Four Different Substituents in the Solid State. *Commun. Chem. (Nature)* **2021**, *4*, 1-7.
- (3)** Yelgaonkar, S.P.; Campillo-Alvarado, G.; MacGillivray, L.R. Phototriggered Guest Release from a Nonporous Organic Crystal: Remarkable Single-Crystal-to-Single-Crystal Transformation of a Binary Cocrystal Solvate to a Ternary Cocrystal. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 20772-20777.

### Chaire d'excellence en recherche du Canada en ingénierie des cristaux pour la chimie verte et les matériaux durables

**Site web** : <https://www.usherbrooke.ca/chimie/departement/personnel/corps-professoral/professeurs/leonard-r-macgillivray>

**Personne contact** : leonard.macgillivray2@usherbrooke.ca

**Twitter** @MacGillivrayRG

## Claude Spino

**Projet** Transposition d'alcools chiraux catalysée par le rhénium

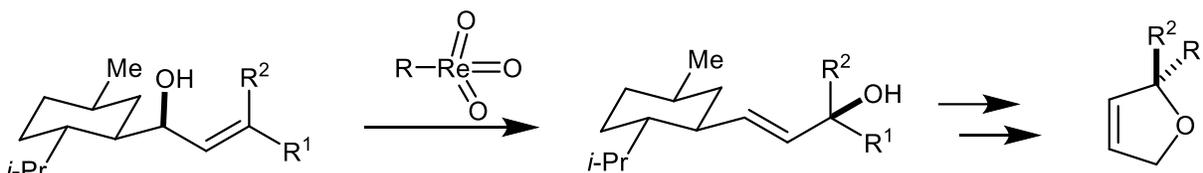
**Disponibilités**  Automne  Hiver  Été

**Thème(s)** Organique, Pharmaceutique, Matériaux.

**Mots-clés** Produits naturels, synthèse organique, cycloaddition-(4+1), auxiliaire chiral, oxydes d'amine

### Résumé du projet

Nous utilisons l'auxiliaire chiral de notre invention, basé sur le noyau menthane, pour générer des alcools allyliques chiraux par transposition catalysée au rhénium(VII). Les alcools secondaires ( $R^1$  ou  $R^2 = H$ ) fonctionnent à merveille, mais les alcools tertiaires ( $R^1$  et  $R^2 \neq H$ ) subissent une transposition non stéréosélective. Nous voulons régler ce problème en préparant de nouveaux catalyseurs de rhénium (en variant R). Les alcools transposés sont ensuite transformés en fragments utiles pour la synthèse de produits naturels.



### Publications pertinentes

- (1) Review de l'auxiliaire chiral : Spino, C. *Chem. Commun.* **2011**, 47, 4872–4883.
- (2) Review de la catalyse au rhénium : Bellemin-Laponnaz, S. *Chem. Cat. Chem.* **2018**, 1, 357–362.

### Laboratoire de synthèse de produits naturels

**Site web** : <http://www.cspino.recherche.usherbrooke.ca/>

**Personne contact** : Claude Spino, [Claude.Spino@USherbrooke.ca](mailto:Claude.Spino@USherbrooke.ca)

## Claude Spino

**Projet** Polycyclisation radicalaire

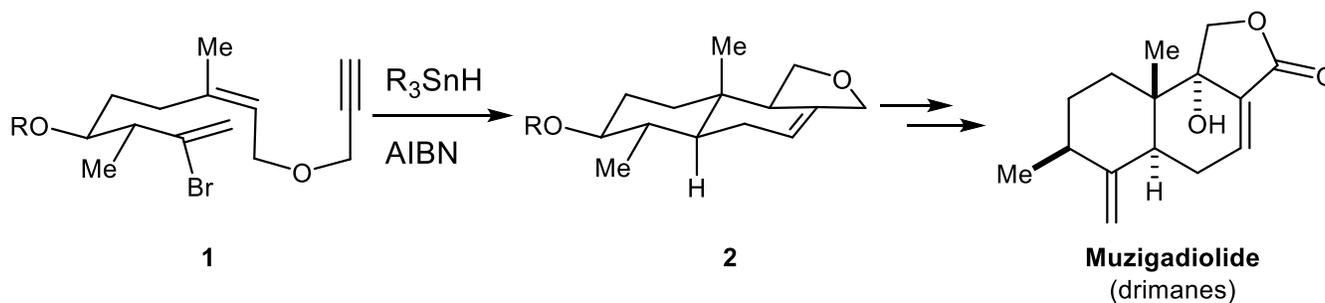
**Disponibilités**  Automne  Hiver  Été

**Thème(s)** Organique, Pharmaceutique, Matériaux.

**Mots-clés** Produits naturels, synthèse organique, cycloaddition-(4+1), auxiliaire chiral, oxydes d'amine

### Résumé du projet

Une polycyclisation radicalaire d'un bromure vinylique **1** peut, en principe, fournir le composé tricyclique **2** en une seule opération. Ces composés peuvent être utilisés pour la synthèse totale de produits naturels de la famille des drimanes. Le stagiaire sera chargé d'aider à la synthèse de précurseurs comme le bromure **1** dans le but de tester la polycyclisation, son efficacité et sa stéréosélectivité.



### Publications pertinentes

**(1)** Approche Diels-Alder à diène transmissible : Dion, A; Spino, C. *Heterocycles* **2017**, *95*, 894–919.

**(2)** Chen, X.; Zhang, D.; Xu, D.; Zhou, H.; Xu, G. *Org. Lett.* **2020**, *22*, 6993–6997.

### Laboratoire de synthèse de produits naturels

**Site web** : <http://www.cspino.recherche.usherbrooke.ca/>

**Personne contact** : Claude Spino, [Claude.Spino@USherbrooke.ca](mailto:Claude.Spino@USherbrooke.ca)

## Guillaume Bélanger

**Projet** Étude de la réaction de cycloaddition de Diels-Alder pseudo-intramoléculaire avec *N*-oxydes d'énaminones

**Disponibilités**  Automne  Hiver  Été

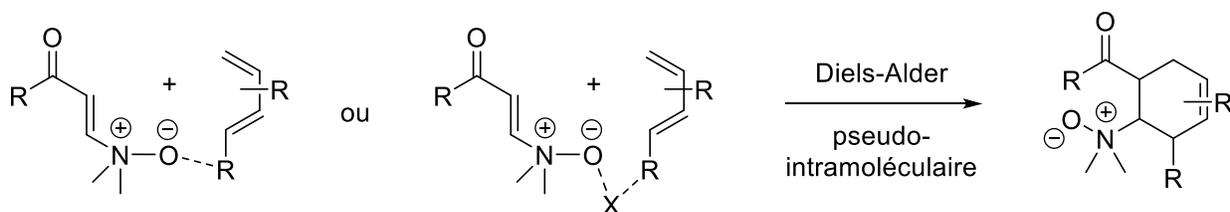
### Thème(s)

Organique

**Mots-clés** Cycloaddition-(4+2), Diels-Alder, *N*-oxyde, énamine, développement de méthode

### Résumé du projet

Les énamines sont de pauvres partenaires dans les cycloadditions de Diels-Alder, fournissant des résultats médiocres. Leur version *N*-oxydée est appauvrie en électrons, et permettrait ainsi la réaction avec des diènes relativement riches en électrons. Les cycloadduits fonctionnalisés pourront ensuite être utilisés en synthèse organique. Pour améliorer la régiosélectivité de la cycloaddition ainsi que la vitesse de réaction, l'utilisation d'une chélation à l'oxygène du *N*-oxyde est envisagée. La réaction de cycloaddition deviendrait donc pseudo-intramoléculaire (ou temporairement intramoléculaire). Le projet vise à fabriquer plusieurs composés de type *N*-oxyde d'énaminone ainsi que différents diènes pour ensuite étudier l'étendue et les limites de la réaction. L'étude d'unité de chélation, présente sur le diène (gauche) ou ajoutée au milieu réactionnel (droite), sera aussi effectuée pour déterminer les unités compatibles produisant les meilleurs résultats en rendement et en régiosélectivité. Le projet sera fait sous la supervision d'un doctorant ayant initié le projet.



**Laboratoire de synthèse organique et de développement de stratégie de synthèse**

**Site web :** <https://guillaumebelanger41.wixsite.com/labobelanger>

**Personne contact :** [Guillaume.Belanger@USherbrooke.ca](mailto:Guillaume.Belanger@USherbrooke.ca)

## Guillaume Bélanger

**Projet** Étude de la réaction de cyclisation radicalaire photocatalysée pour la génération d'indolines fonctionnalisées

**Disponibilités**  Automne  Hiver  Été

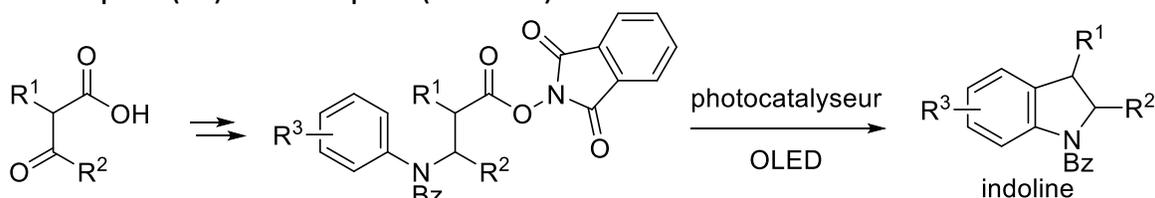
### Thème(s)

Organique

**Mots-clés** Synthèse d'indolines, décarboxylation radicalaire, photocatalyse, développement de méthode

### Résumé du projet

Les noyaux indolines sont très répandus dans les produits naturels et médicaments. Plusieurs synthèses existent déjà, mais aucune ne prend avantage de la fonctionnalisation C-H d'aniline. Le projet vise à fabriquer plusieurs composés de type aniline substituées sur l'azote par un embranchement ester qui sera activé de façon photochimique en présence d'un catalyseur pour initier la décarboxylation et la cyclisation radicalaire (voir schéma). L'étude servira à identifier les effets électroniques ( $R^3$ ) et stériques ( $R^1$  et  $R^2$ ) sur l'étendue de la réaction.



### Publications pertinentes

(1) *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 2, 1193–1201

### Laboratoire de synthèse organique et de développement de stratégie de synthèse

Site web : <https://guillaumebelanger41.wixsite.com/labobelanger>

Personne contact : [Guillaume.Belanger@USherbrooke.ca](mailto:Guillaume.Belanger@USherbrooke.ca)

**Jérôme Claverie**

**Projet** Mécanisme de réactions de synthèse de polymères

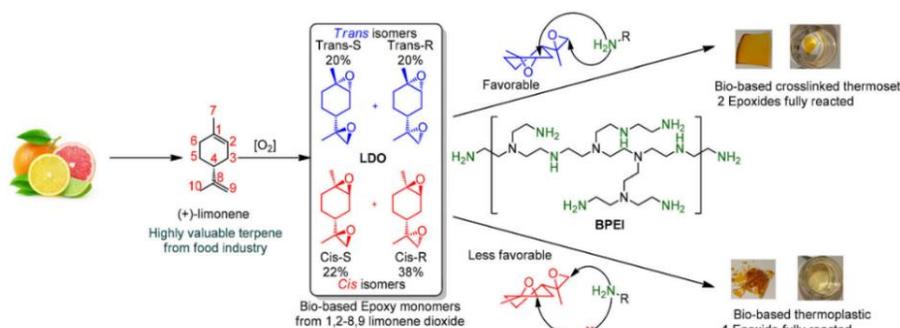
**Disponibilités** ☑ Automne ☑ Hiver ☑ Été

**Thème(s)** Organique, Polymères, Catalyse

**Mots-clés** synthèse, mécanisme réactionnel, polymère

**Résumé du projet**

Notre groupe de recherche travaille sur la synthèse de polymères en utilisant des matériaux biosourcés, et via des méthodes 'vertes'. Ainsi, nous avons préparé des



thermodurcissables époxy synthétisés à partir de limonène. Les règles de Fürst-Plattner ont expliqué la réactivité inattendue de ce terpène. Nous travaillons aussi sur un nouveau mécanisme de polymérisation, appelé rectification-insertion, en utilisant des catalyseurs au Pd innovants. Dans le cadre de ces projets, l'étudiant(e) est amené(e) à synthétiser des polymères et à élucider le mécanisme de réaction via des études spectroscopiques (RMN) et de modélisation (DFT). L'image montre un résumé des résultats sur le limonène.

**Publications pertinentes**

- (1) Schutz, L.; Kazemi, F.; Mackenzie, E.; Bergeron, J.; Gagnon, E.; Claverie, J. P. *Trans* -limonene Dioxide, a Promising bio-based Epoxy Monomer. *J. Polym. Sci.* **2021**, 59 (4), 321–328.
- (2) Kazemi, F.; Schutz, L.; Bergeron, J.-Y.; Gagnon, E.; Yap, G. P. A.; Claverie, J. P. Lanthanide Dodecyl Sulfates, a Potent Family of Catalysts for the Preparation of Biobased Epoxy Thermosetting Polymers. *Chem. Commun.* **2021**. <https://doi.org/10.1039/D1CC00808K>.
- (3) Tian, D.; Xu, R.; Zhu, J.; Huang, J.; Dong, W.; Claverie, J.; Tang, W. Asymmetric Hydroesterification of Diarylmethyl Carbinols. *Angew. Chemie Int. Ed.* **2021**, anie.202015450.

**Chaire de Recherche du Canada en Chimie des Matériaux Organiques et Hybrides Avancés**

**Site web** : <http://moha.recherche.usherbrooke.ca/>

**Personne contact** : Jérôme Claverie : [jerome.claverie@usherbrooke.ca](mailto:jerome.claverie@usherbrooke.ca)

**Twitter** @JeromeClaverie1

**Jérôme Claverie**

**Projet** Synthèses de catalyseurs organométalliques pour la réaction de Cossee-Arlman

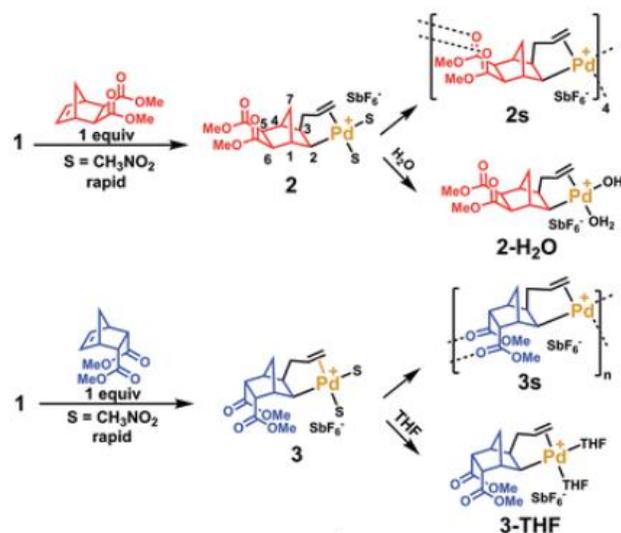
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Organique, Polymères, Catalyse

**Mots-clés** Organométallique, catalyse, mécanisme réactionnel

**Résumé du projet**

Notre groupe de recherche travaille sur la synthèse de polymères par voie catalytique en utilisant des réactions catalysées avec des complexes de Pd ou de Ni. En particulier nous sommes intéressés par la réaction d'insertion rectification dans lequel le catalyseur permet à la fois la réaction de Cossee-Arlman et aussi la réaction de retro Diels-Alder. Le but du projet consiste à synthétiser des nouvelles familles de ligands/catalyseurs, de le caractériser les produits (RMN, DRX, ESI MS) et de mesurer leur réactivité.


**Publications pertinentes**

**(1)** Potier, J.; Commarieu, B.; Soldera, A.; Claverie, J. P. Thermodynamic Control in the Catalytic Insertion Polymerization of Norbornenes as Rationale for the Lack of Reactivity of Endo-Substituted Norbornenes. *ACS Catal.* 2018, 8 (7), 6047–6054.

**(2)** Commarieu, B.; Claverie, J. P. Bypassing the Lack of Reactivity of Endo-Substituted Norbornenes with the Catalytic Rectification–Insertion Mechanism. *Chem. Sci.* 2015, 6 (4), 2172–2181.

**(3)** Daigle, J. C.; Lucien, F. P.; Zetterlund, P. B.; Claverie, J. P. Water and Carbon Dioxide: A Unique Solvent for the Catalytic Polymerization of Ethylene in Miniemulsion. *Chem. - An Asian J.* 2017, 12 (16), 2057–2061.

**Chaire de Recherche du Canada en Chimie des Matériaux Organiques et Hybrides Avancés**

**Site web :** <http://moha.recherche.usherbrooke.ca/>

**Personne contact :** Jérôme Claverie : [jerome.claverie@usherbrooke.ca](mailto:jerome.claverie@usherbrooke.ca)

**Twitter** @JeromeClaverie1

## Philippe Dauphin Ducharme

**Projet** Changement de conformation électrochimique d'un oligonucléotide

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

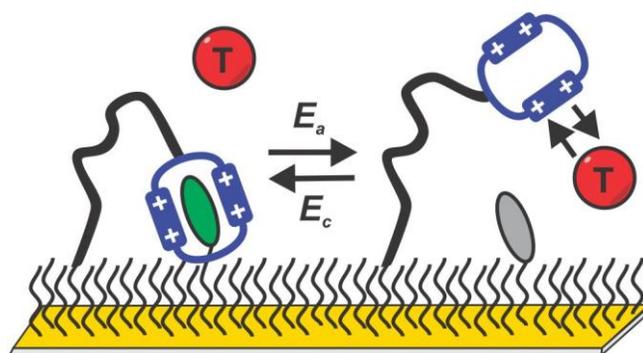
**Thème(s)** Organique, Analytique, Matériaux, Pharmaceutique, Physique

### Mots-clés

Chimie Supramoléculaire, Biocapteurs, Électrochimie, Chimie Analytique

### Résumé du projet

Le projet consiste à incorporer des éléments de reconnaissances macromoléculaires interagissant avec des classes de molécules, tel que les acides aminés aromatiques, grâce à des interactions non-covalentes directionnelles et connues. Comme systèmes modèles, nous planifions, de manière covalente, greffer des récepteurs moléculaires tel que le cyclobis(paraquat-p-phenylene) ou le cucurbituril, directement à un brin d'oligonucléotide flexible afin qu'ils interagissent avec des molécules invitées électroactives liées à des électrodes. En oscillant le potentiel de l'électrode afin de réduire/oxyder l'invité, nous pourrons, de manière programmée, initier un changement de conformation dans la structure de l'oligonucléotide et ainsi créer une machine moléculaire répondant à un stimuli électrochimique.



### Publications pertinentes

- (1) ACS Sensors **2019** 4 (10), 2832-2837
- (2) Angewandte Chemie **1988**, 27 (11), 1547-1550

### Laboratoire d'électrochimie et biocapteurs

**Site web** : <http://ebiosensors.recherche.usherbrooke.ca>

**Personne contact** : [philippe.dauphin.ducharme@usherbrooke.ca](mailto:philippe.dauphin.ducharme@usherbrooke.ca)

**Twitter** : @ebiosensors

## Yves Dory

**Projet** Synthèse de dérivés de tétrathiafulvalène pour la conductivité organique

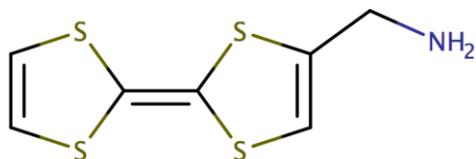
**Disponibilités**  Automne  Hiver  Été

**Thème(s)** Organique, Matériaux

**Mots-clés** Synthèse, Tétrathiafulvalène, Conductivité, Supramoléculaire

### Résumé du projet

Le tétrathiafulvalène (TTF) est une molécule qui génère facilement un radical-cation puis un di-cation par aromatisation. Son empilement supramoléculaire parfaitement contrôlé permettrait de produire des matériaux légers pouvant conduire l'électricité. Le projet consiste à préparer des dérivés du TTF qui seront liés à des analogues d'acide trimésique par des liens amides pour générer des unités s'auto-assemblant selon un processus supramoléculaire.



TTF de base

### Publications pertinentes

- (1) An expedient, cost effective large scale synthesis of tetrathiafulvalene. Medline & Elsenbaumer. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1*, **1998**, 2467-2469.
- (2) General Method for the Preparation of Substituted Tetrathiafulvalenes and Directing Effects of Substituents. Green. *J. Org. Chem.* **1979**, *44*, 1476-1479.
- (3) Substituted BEDT-TTF derivatives: synthesis, chirality, properties and potential applications. Wallis & Griffiths. *J. Mater. Chem.* **2005**, *15*, 347-365.

### <Laboratoire de Chimie Supramoléculaire et Médicinale>

**Site web** : <https://www.researchgate.net/profile/Yves-Dory/projects>

**Personne contact** : Yves Dory – [Yves.Dory@USherbrooke.ca](mailto:Yves.Dory@USherbrooke.ca)

## Yves Dory

**Projet** Synthèse de dérivés d'azobenzène pour le stockage d'énergie

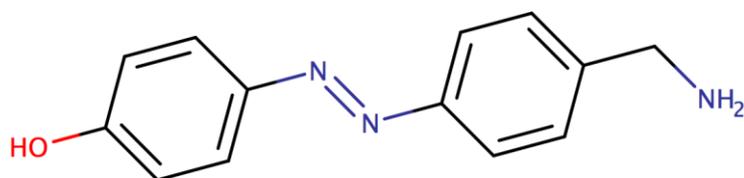
**Disponibilités**  Automne  Hiver  Été

**Thème(s)** Organique, Matériaux

**Mots-clés** Synthèse, Azobenzène, Énergie, Supramoléculaire

### Résumé du projet

L'azobenzène *cis*, qui est plus énergétique que son isomère *trans*, peut être utilisé comme réservoir d'énergie. Son empilement supramoléculaire permettrait de stocker beaucoup d'énergie réversiblement dans de petits volumes. Le projet consiste à préparer des dérivés de l'azobenzène qui seront liés à des analogues d'acide trimésique par des liens amides pour générer des unités s'auto-assemblant selon un processus supramoléculaire.



Azobenzène de base

### Publications pertinentes

- (1) <https://doi.org/10.1016/j.tet.2020.131549>
- (2) <https://doi.org/10.1007/s00706-017-2042-5>
- (3) <https://doi.org/10.1002/cplu.201402018>

### Laboratoire de Chimie Supramoléculaire et Médicinale

**Site web** : <https://www.researchgate.net/profile/Yves-Dory/projects>

**Personne contact** : Yves Dory – [Yves.Dory@USherbrooke.ca](mailto:Yves.Dory@USherbrooke.ca)

## **Thème porteur – Pharmaceutique**



## Pierre-Luc Boudreault

**Projet** Optimisation d'inhibiteurs de TTSP pour lutter contre le SARS-Cov-2 et d'autres virus respiratoires

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Pharmaceutique, Organique

**Mots-clés** SARS-CoV-2 ; inhibition enzymatique, synthèse multi-étape, design rationnel, modélisation moléculaire

### Résumé du projet

Le COVID-19 est une maladie respiratoire aiguë qui peut être très grave et qui est causée par un coronavirus nouvellement identifié, appelé SARS-CoV-2. Deux étapes importantes ont lieu pour permettre l'invasion des cellules de l'épithélium respiratoire par le SARS-CoV-2 ; la reconnaissance de la protéine Spike à la surface du virus par l'Angiotensine-Converting Enzyme 2 (ACE2) des cellules épithéliales et le clivage de la glycoprotéine Spike par la protéase TMPRSS-2, une protéase à sérine transmembranaire (TTSP), située à la surface de ces cellules. Cette dernière étape est essentielle pour amorcer la fusion de la membrane du virus avec celle de la cellule hôte. Nous avons récemment démontré que l'inhibition de TMPRSS2 constitue une approche efficace pour diminuer l'infection par le SARS-CoV-2 *in cellulo* et *in vivo*. Le projet consiste à développer une seconde génération d'inhibiteurs de TMPRSS-2, plus spécifique et ayant de meilleures propriétés pharmacocinétiques et d'élargir le spectre d'activité à d'autre virus ayant comme mécanisme d'action l'activation par des TTSPs.

### Publications pertinentes

(1) Shapira, T., et al. (2021). "A novel highly potent inhibitor of TMPRSS2-like proteases blocks SARS-CoV-2 variants of concern and is broadly protective against infection and mortality in mice." bioRxiv. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/33972944>

### Laboratoire Boudreault

**Personne contact** : Pierre-Luc Boudreault : [Pierre-Luc.Boudreault@USherbrooke.ca](mailto:Pierre-Luc.Boudreault@USherbrooke.ca)



## Pierre-Luc Boudreault

**Projet** Développement de petites molécules apélinergiques pour le traitement de maladies cardiovasculaires

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Pharmaceutique, Organique

**Mots-clés** Relation structure-activité, APJ, système cardiovasculaire, modélisation moléculaire

### Résumé du projet

L'objectif du projet est de développer et de synthétiser des analogues ciblant le récepteur apeline (APJ) ayant des propriétés pharmacologiques intéressantes. Ce récepteur agit comme régulateur important du système cardiovasculaire, ainsi il représente une cible thérapeutique intéressante pour, entre autres, l'insuffisance cardiaque et l'hypertension artérielle pulmonaire. Les conditions pathologiques étudiées sont principalement chroniques, alors une administration par voie orale de petites molécules est privilégiée. L'étude de la relation structure-activité se fait par un test d'affinité entre le récepteur APJ et les molécules synthétisées. Des tests biologiques supplémentaires sont effectués pour les composés les plus affins en collaboration avec divers laboratoires du CHUS et international.

### Publications pertinentes

**(1)** Murza, A.; Trân, K.; Bruneau-Cossette, L.; Lesur, O.; Auger-Messier, M.; Lavigne, P.; Sarret, P.; Marsault, É. Apelins, ELABELA, and Their Derivatives: Peptidic Regulators of the Cardiovascular System and Beyond. *Peptide Science* **2019**, *111* (1), e24064.

**(2)** Trân, K.; Van Den Hauwe, R.; Sainsily, X.; Couvineau, P.; Côté, J.; Simard, L.; Echevarria, M.; Murza, A.; Serre, A.; Théroux, L.; Saibi, S.; Haroune, L.; Longpré, J.-M.; Lesur, O.; Auger-Messier, M.; Spino, C.; Bouvier, M.; Sarret, P.; Ballet, S.; Marsault, É. Constraining the Side Chain of C-Terminal Amino Acids in Apelin-13 Greatly Increases Affinity, Modulates Signaling, and Improves the Pharmacokinetic Profile. *J. Med. Chem.* **2021**.

### Laboratoire Boudreault

**Personne contact** : Pierre-Luc Boudreault, [pierre-luc.boudreault@usherbrooke.ca](mailto:pierre-luc.boudreault@usherbrooke.ca)

## Pierre-Luc Boudreault

**Projet** Développement de nouveaux inhibiteurs de l'ATP synthase bactérienne

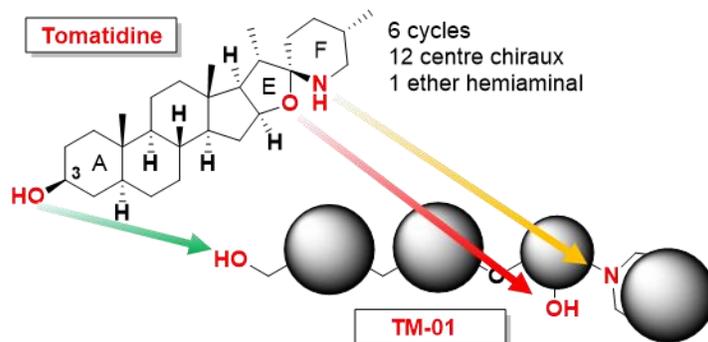
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Pharmaceutique, Organique

**Mots-clés** Antibiotiques, Relation Structure-Activité; Synthèse multi-étape; Modélisation Moléculaire

### Résumé du projet

La résistance aux antibiotiques est un problème de santé publique majeur. Récemment, notre groupe a découvert une nouvelle classe d'antibiotique potentielle dérivée de la tomatidine, un stéroïde alcaloïde naturel. Cette molécule possède une activité antibactérienne unique envers des souches résistantes de *S. aureus* (SCV, MRSA) alors que la cible thérapeutique identifiée est l'ATP synthase de *S. aureus*. Grâce au criblage virtuel et à l'utilisation d'un modèle pharmacophore, une nouvelle série de petites molécules plus simples (TM-01) a été identifiée. L'objectif du projet consiste à poursuivre l'étude de relation structure-activité (série TM-01), tout en optimisant les propriétés physicochimiques de cette classe de composés.



### Publications pertinentes

(1) Chagnon, F. et al. **2014**. *Eur. J. Med. Chem.* 80, 605-20.

(2) Guay, I. et al. **2018**, *BMC Pharmacol Toxicol.* 19, 7-19

(3) Lamontagne B. M. et al. **2018**. *Antimicrob Agents Chemother.* 62, 1-18

### Laboratoire Boudreault

**Personne contact** : Pierre-Luc Boudreault, [pierre-luc.boudreault@usherbrooke.ca](mailto:pierre-luc.boudreault@usherbrooke.ca)



## Pierre-Luc Boudreault

**Projet** Étude de la relation structure-perméabilité des macrocycles semi-peptidiques

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Pharmaceutique, Organique

**Mots-clés** Macrocycles ; interactions protéine-protéines; perméabilité cellulaire ; synthèse organique

### Résumé du projet

Les peptides sont intéressants pour la découverte de médicaments car ils peuvent être efficaces pour des cibles difficiles telles que les interactions protéines-protéines. Cependant leurs caractéristiques physicochimiques les rendent généralement inadéquat pour l'absorption orale. La littérature associe les peptides cycliques à une meilleure perméabilité membranaire, une stabilité métabolique plus grande par rapport aux peptides linéaires. L'hypothèse du projet est qu'une restriction conformationnelle au sein d'un macrocycles semi-peptidiques pourrait influencer la perméabilité cellulaire, tout en étant en dehors des règles de Lipinski. Les premiers résultats montrent que la perméabilité peut être optimisée.

### Publications pertinentes

**(1)** Le Roux A, Blaise É, Boudreault PL, Comeau C, Doucet A, Giarrusso M, Collin MP, Neubauer T, Kölling F, Göller AH, Seep L, Tshitenge DT, Wittwer M, Kullmann M, Hillisch A, Mittendorf J, Marsault E. Structure-Permeability Relationship of Semipeptidic Macrocycles-Understanding and Optimizing Passive Permeability and Efflux Ratio. *J Med Chem.* **2020** Jul 9;63(13):6774-6783. doi: 10.1021/acs.jmedchem.0c00013. Epub 2020 May 26. PMID: 32453569.

**(2)** Comeau C, Ries B, Stadelmann T, Tremblay J, Poulet S, Fröhlich U, Côté J, Boudreault PL, Derbali RM, Sarret P, Grandbois M, Leclair G, Riniker S, Marsault É. Modulation of the Passive Permeability of Semipeptidic Macrocycles: N- and C-Methylations Fine-Tune Conformation and Properties. *J Med Chem.* **2021** May 13;64(9):5365-5383. doi: 10.1021/acs.jmedchem.0c02036. Epub 2021 Mar 22. PMID: 33750117.

### Laboratoire Boudreault

**Personne contact** : <Pierre-Luc Boudreault : [Pierre-Luc.Boudreault@USherbrooke.ca](mailto:Pierre-Luc.Boudreault@USherbrooke.ca)



## Pierre-Luc Boudreault

**Projet** Optimisation de l'affinité et du passage de la BHE des agonistes sélectifs du récepteur NTS2 pour le traitement de la douleur.

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Pharmaceutique, Organique

**Mots-clés** Relation structure-activité, synthèse organique, GPCR, NTS2, douleur

### Résumé du projet

Des travaux précédemment publiés par notre groupe ont permis d'identifier des macrocycles très puissants ciblant le NTS2, un récepteur induisant une analgésie dans divers modèles précliniques (Chartier et al. 2021). En plus de leur grande affinité envers NTS2, ces composés n'activent pas NTS1 à 100  $\mu\text{M}$ , ce qui élimine les effets indésirables médiés par ce dernier. Par contre, étant donné leur nature semi-peptidique, ces composés brevetés sont très peu biodisponibles, diminuant ainsi leur potentiel thérapeutique. Récemment, notre groupe a réussi à créer une nouvelle molécule qui a le potentiel de traverser la barrière hémato-encéphalique en utilisant un transporteur peptidique. Des études précliniques très prometteuses pour cette série de molécules par injection intraveineuse sont présentement en cours. Ce projet consiste donc à optimiser cette première génération de conjugués. Notre groupe travaille actuellement avec un laboratoire de pharmacologie et de neurophysiologie (Pr Sarret) spécialisé dans les tests *in vivo* reliés à la douleur.

### Publications pertinentes

(1) Chartier et al. *J. Med. Chem.* **2021**, 64, 4, 2110–2124

### Laboratoire Boudreault

**Personne contact** : Pierre-Luc Boudreault : [Pierre-Luc.Boudreault@USherbrooke.ca](mailto:Pierre-Luc.Boudreault@USherbrooke.ca)



## Pierre-Luc Boudreault

**Projet** Synthèse d'inhibiteurs macrocycliques ciblant l'interaction protéine-protéine entre SRAS-CoV-2 et ACE-2

**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Pharmaceutique, Organique

**Mots-clés** SRAS-CoV-2 ; peptidomimétique, particules pseudo-virales, interactions protéine-protéines, design rationnel, modélisation moléculaire

### Résumé du projet

Un nouveau coronavirus 2 du syndrome respiratoire aigu sévère (SRAS-CoV-2) se propage rapidement chez l'homme, causant une pandémie mondiale qui interrompt également la stabilité économique. Jusqu'à présent, l'une des stratégies de traitement du SRAS-CoV-2 consiste à explorer l'efficacité de médicaments approuvés. Puisqu'aucun de ces médicaments n'a été optimisé pour cibler spécifiquement SRAS-CoV-2, il est normal de s'attendre à ce que leur efficacité soit très limitée. Par ailleurs, il a été démontré que l'entrée du virus passait par l'interaction entre la protéine spike (RBD) du virus et ACE-2. Dans ce contexte, le blocage de l'entrée du virus SRAS-CoV-2 avec un inhibiteur macrocyclique ciblant l'interaction protéine-protéine SRAS-CoV-2 (RBD) / ACE-2 s'avère très prometteur.

Ce projet vous permettra de découvrir le design et la synthèse d'inhibiteurs mimant les structures secondaires de ces protéines, l'optimisation de ceux-ci mais aussi la validation de ces molécules dans des modèles cellulaires.

### Publications pertinentes

**(1)** Curreli F, Victor SMB, Ahmed S, Drelich A, Tong X, Tseng CK, Hillyer CD, Debnath AK. Stapled Peptides Based on Human Angiotensin-Converting Enzyme 2 (ACE2) Potently Inhibit SARS-CoV-2 Infection *In Vitro*. *mBio*. 2020 Dec 11;11(6):e02451-20. doi: 10.1128/mBio.02451-20. PMID: 33310780;

**(2)** Crawford KHD, Eguia R, Dingens AS, Loes AN, Malone KD, Wolf CR, Chu HY, Tortorici MA, Veasler D, Murphy M, Pettie D, King NP, Balazs AB, Bloom JD. Protocol and Reagents for Pseudotyping Lentiviral Particles with SARS-CoV-2 Spike Protein for Neutralization Assays. *Viruses*. 2020 May 6;12(5):513. doi: 10.3390/v12050513. PMID: 32384820;

### Laboratoire Boudreault

**Personne contact** : Pierre-Luc Boudreault : [Pierre-Luc.Boudreault@USherbrooke.ca](mailto:Pierre-Luc.Boudreault@USherbrooke.ca)

## Leonard R. MacGillivray

**Projet** Cocristaux pharmaceutiques

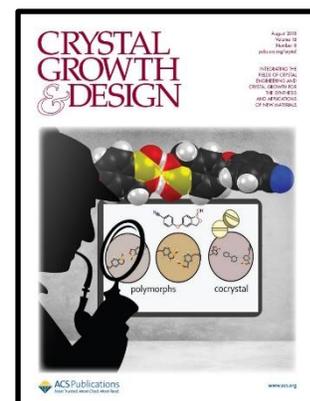
**Disponibilités** ☒ Automne ☒ Hiver ☒ Été

**Thème(s)** Pharmaceutique, Matériaux, Organique

**Mots-clés** ingénierie des cristaux, chimie supramoléculaire, pharmacologie

### Résumé du projet

Les cocristaux pharmaceutiques fournissent une plate-forme vers la conception innovante de formes solides de médicaments. Les molécules médicamenteuses existantes peuvent être transformées en solides à plusieurs composants en utilisant les principes de la chimie supramoléculaire et de l'ingénierie cristalline (des liaisons hydrogène). Dans le cadre de nos travaux en cours, nous développons des cocristaux pharmaceutiques comme nouvelles voies vers une médecine améliorée (santé de la prostate, contrôle de la douleur, cancer). La figure montre nos travaux sur les cocristaux pharmaceutiques contenant du bore.



### Publications pertinentes

- (1)** Zu, H.; Henry, R.F.; Zhang, G.Z.Z.; MacGillivray, L.R. Inhibiting Sublimation of Thymol by Cocrystallization. *J. Pharma. Sci.* **2023**, *112*, 350-353.
- (2)** Ortiz-de Leon, C.; MacGillivray, L.R. Clues from cocrystals: a ternary solid, polymorphism, and rare supramolecular isomerism involving resveratrol and 5-fluorouracil. *ChemComm.* **2021**, *57*, 3809-3811.
- (3)** Campillo-Alvarado, G.; Didden, T.D.; Oburn, S.M.; Swenson, D.C.; MacGillivray, L.R. Exploration of Solid Forms of Crisaborole: Crystal Engineering Identifies Polymorphism in Commercial Sources and Facilitates Cocrystal Formation. *Cryst. Growth Des.* **2018**, *18*, 4416-4419.

### Chaire d'excellence en recherche du Canada en ingénierie des cristaux pour la chimie verte et les matériaux durables

**Site web** : <https://www.usherbrooke.ca/chimie/departement/personnel/corps-professoral/professeurs/leonard-r-macgillivray>

**Personne contact** : leonard.macgillivray2@usherbrooke.ca

**Twitter** @MacGillivrayRG