



## Modélisation moléculaire et spectroscopie forensique

[Sylvain.Robert@uqtr.ca](mailto:Sylvain.Robert@uqtr.ca)  
[www.uqtr.ca/Sylvain.Robert](http://www.uqtr.ca/Sylvain.Robert)

Département de chimie, biochimie et physique (DCBP)  
Centre de recherche sur les matériaux lignocellulosiques (CRML)

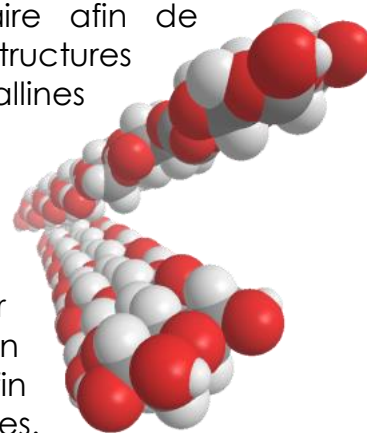


**Modélisation moléculaire** – Les recherches du professeur Sylvain Robert portant sur la modélisation moléculaire englobe toutes les méthodes théoriques et des techniques de calcul utilisées pour modéliser ou simuler le comportement des molécules. Ces techniques sont utilisées dans les domaines de la chimie computationnelle, la conception de médicaments, la biologie computationnelle et la science des matériaux pour l'étude des systèmes moléculaires allant de petits systèmes chimiques à de grosses molécules biologiques et assemblages de matériaux. Les calculs les plus simples peuvent être effectués à la main, inévitablement, les ordinateurs sont nécessaires pour effectuer la

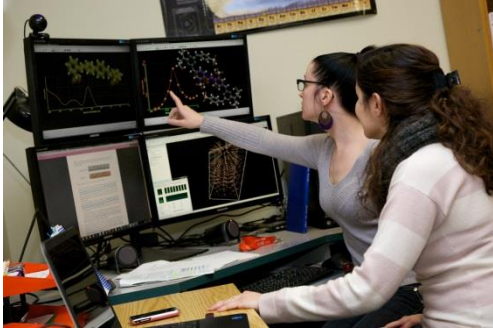
modélisation moléculaire de tout système de taille raisonnable. La caractéristique commune des techniques de modélisation moléculaire est la description de niveau atomistique des systèmes moléculaires. Cela peut inclure le traitement des atomes comme la plus petite unité individuelle (mécanique moléculaire), ou explicitement la modélisation des électrons de chaque atome (chimie quantique).

L'équipe de M. Robert utilise la modélisation moléculaire afin de comprendre les phénomènes chimiques associés aux structures lignocellulosiques comme le papier et les nanocelluloses cristallines (NCC).

La compréhension de ces phénomènes permet d'exploiter diverses approches chimiques avant de les appliquer expérimentalement au laboratoire, permettant ainsi d'économiser beaucoup d'argent de recherche. Cela leur permet d'explorer les propriétés spectaculaires de diffraction de la lumière et d'iridescence des films et particules de NCC afin de pouvoir éventuellement les incorporer dans des cosmétiques.



De plus, la compréhension des phénomènes d'adsorption des gaz (azote, oxygène, eau, dioxyde de carbone et méthane) en surface de ces mêmes structures lignocellulosiques permettra le développement de nouvelles membranes sélectives permettant une meilleure filtration des gaz ainsi que la capture plus efficace des gaz à effet de serre indésirables comme le dioxyde de carbone et le méthane.



À cette fin, ils disposent de puissants ordinateurs ainsi que des accès aux grands calculateurs canadiens, Colosse à l'Université Laval via Calcul-Québec et WestGrid à l'Université d'Alberta via Calcul-Canada.

### **Spectroscopie forensique : détection des empreintes digitales sur un support lignocellulosique**

Certains travaux ont récemment démontré qu'une des meilleures façons de révéler les empreintes digitales sur un support lignocellulosique consiste à chauffer celui-ci à plus de 300°C pour provoquer une dégradation thermique accélérée de la cellulose. Ou encore, on utilise une déposition d'or colloïdal sur le papier dans des conditions de pH et d'acidité très agressives. En ce qui concerne la détection des traces digitales sur les supports lignocellulosiques, ils souhaitent mettre à profit leurs connaissances en spectroscopie et fluorimétrie pour mettre ces traces en évidence tout en évitant la destruction du support lignocellulosique, conservant ainsi les preuves intactes. Ce projet s'effectue avec l'Université de Lausanne, le leader mondial dans le domaine de la recherche et de l'enseignement de la criminalistique, de même qu'avec la Division de l'identité judiciaire de la Sureté du Québec.

