



Rapport d'activité 2009 - Recueil des publications des laboratoires utilisateurs du Pôle de Modélisation Numérique en 2008-2009

Référence du document : T-PUBLIS-RA2009 - Révision 02 - Date de création : 21/04/2009

Validation : HP le 21/04/2010

Documents référencés : N/A

Résumé : rapport d'activité 2009 - Volet technique - Recueil des publications des laboratoires utilisateurs du Pôle de Modélisation Numérique sur la période 2008-2009

Révisions :

- 01 : version initiale (BG)
- 02 : version publiée (HP)

Accessibilité

CRIHAN : **OUI**

EXTÉRIEURS : **OUI**

RESTREINT : **NON**

Table des matières

Introduction	3
Grappe de calcul IBM P575	4
UPRES EA4258, INC3M FR CNRS 3038 - CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie)	4
CIMAP (Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique)	7
UMR 6614 - CORIA (COmplexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie)	7
UMR CNRS 5210 - CRC (Centre de Recherches de Climatologie)	11
UMR CNRS 6634 - GPM (Groupe de Physique des Matériaux)	12
UMR 6089 - GSMA (Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique)	16
UMR 8182 - ICMO (Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay)	17
UMR CNRS 6229 - ICMR (Institut de Chimie Moléculaire de Reims)	18
IRCOF (Institut de Recherche en Chimie Organique Fine de Rouen)	19
UMR CNRS 7616 - LCT (Laboratoire de Chimie Théorique)	21
EA3226 - LMI (Laboratoire de Mathématiques de l'INSA de Rouen)	23
UMR CNRS 8107 - LML (Laboratoire de Mécanique de Lille)	24
FRE-CNRS 3102 - LOMC (Laboratoire Ondes et Milieux Complexes)	24
EA3828 - LMR (Laboratoire de Mécanique de Rouen)	27
UMR CNRS 8522, FR CNRS 2416 - PC2A (Laboratoire de PhysicoChimie des Processus de Combustion et l'Atmosphère)	27
U648 INSERM - PMC (Laboratoire de Pharmacochimie Moléculaire et Cellulaire)	28
UMR CNRS 6011 - UCO2M (Unité de Chimie Organique Moléculaire et Macromoléculaire)	29
UMR CNRS 8576 - UGSF (Glycobiologie Structurale et Fonctionnelle)	30
Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire	31
FRE CNRS 3101 - BRICS (Biofilms Résistances Interactions Cellules Surfaces)	31
UPRES EA4258, INC3M FR CNRS 3038 - CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie)	34
INSERM U 413 - Laboratoire de Neuroendocrinologie Cellulaire et Moléculaire	34
IRCOF (Institut de Recherche en Chimie Organique Fine de Rouen)	48
IRCOF -UMR CNRS 6014 - ECOBS (Laboratoire de Chimie Organique et Biologie Structurale)	48
IRCOF UPRES EA 3233 - SMS (Sciences et Méthodes Séparatives)	50
UPRES EA 4358 - Glyco-MEV (Laboratoire de Glycobiologie et Matrice Extracellulaire Végétale)	53

Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIHAN sur la période octobre-2008 - septembre 2009.

Il regroupe les travaux effectués par les laboratoires utilisateurs des ressources mises à disposition par le CRIHAN dans le cadre du Pôle de Modélisation Numérique.

Les activités sont présentées par laboratoire puis par "projet scientifique" au sens de leur identification dans la base de données du CRIHAN.

Un "projet scientifique" est un programme annuel de réservation de ressources pour un thème de recherche donné : le projet est identifié par un numéro et est associé à un ou plusieurs comptes utilisateurs en charge de ce projet. Chaque projet enregistré au CRIHAN a préalablement fait l'objet d'une validation scientifique par des experts reconnus dans le domaine concerné : ceux-ci évaluent la pertinence du rapport entre le volume de ressources demandées (en nombre d'heures de calcul essentiellement) et le thème scientifique étudié.

Les informations présentes dans ce document ont toutes été transmises par les laboratoires eux-mêmes : seule la présentation a fait l'objet de retouches par le CRIHAN à des fins d'harmonisation.

A. Grappe de calcul IBM P575

1. UPRES EA4258, INC3M FR CNRS 3038 - CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie)

Localisation : Caen

Site Web : <http://www.cermn.unicaen.fr/>

Remarque : Ce laboratoire utilise également les ressources du projet RNMM (Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire).

Les activités scientifiques du CERMN concernent la conception, la synthèse et l'optimisation de molécules d'intérêts biologiques dans le domaine des neurosciences et de la cancérologie.

Le département de modélisation moléculaire du CERMN (Pr R. Bureau, 3 MCUs, 2 ingénieurs d'études à ½ temps) comprend une activité scientifique centrée sur la mise en évidence des interactions ligands - récepteurs biologiques par des logiciels informatiques (CRIHAN notamment) et une analyse expérimentale des données 3D associées aux ligands par diffraction RX.

Thématiques principales

- Conception et études structures activités de ligands sérotoninergiques.
- Conception de nouveaux agonistes / antagonistes de neuropeptides (U-II et 26RFa).
- Mise en place et exploitation des chimiothèques (screening virtuel sur la base des pharmacophores, docking).
- Analyses des données issues de diffraction RX.
- Estimation des propriétés écotoxicologiques et toxicologiques des produits chimiques (Programme ANR Innotox 2007).

Les logiciels principalement utilisées sont :

- Pour la conception de pharmacophore : Catalyst (Accelrys) et Disco / Unity de Sybyl (Tripos)
- Pour les études de relations structure-activité : CoMFA de Sybyl, module QSAR / Genetic algorithm / Vamp Descriptors de Discovery Studio (Accelrys).
- Pour les analyses de données : Unity / Selector de Sybyl (Tripos).
- Pour les modélisations des macromolécules : modules de type Modeller, Biopolymer de Discovery Studio Accelrys) et de Sybyl (Tripos).
- Pour les interactions ligands-récepteurs : Ligandfit / Ligandscore de Discovery Studio (Accelrys) et Flexx de Sybyl (Tripos).
- Pour les études des propriétés quantiques : Gaussian et Jaguar (Schrodinger).

Projet : 2005004

Responsable de projet : **Ronan Bureau**

Titre : **Découverte de nouveaux leaders par des approches structurales liées aux techniques de screening virtuel.**

Publications

1. Lescot, E.; Bureau, R.; Rault, S. Nonpeptide Urotensin-II receptor agonists and antagonists: Review and structure-activity relationships. *Peptides.*, 2008, 29, 680-690.
2. Lescot, E.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Colloc'h, N.; Rodrigo, J.; Milazzo-Segalas, I.; Bureau, R.; Rault, S. Three-dimensional Model of human Urotensine-II Receptor: Docking of human Urotensin-II and non-peptide antagonists in the binding site and comparison with an antagonist pharmacophore model. *Proteins*, 2008, 73, 173-184.
3. Lopez-Atalaya, J.P.; Roussel, B.D.; Levrat, D.; Nicole, O.; Benchenane, K.; Castel, H.; Leprince, J.; Hommet, Y.; To Van, D.; Sopkova, J.; Bureau, R.; Rault, S.; Vaudry, H.; Petersen, K.U.; Ali, K. and Vivien, D. Towards Safer Thrombolytic Agents In Stroke: Molecular Requirements For NMDA Receptor-Mediated Neurotoxicity. *Journal of Cerebral Blood Flow & Metabolism*. 2008, 28, 1212 – 1221.
4. Sopková-de Oliveira Santos J., Verhaeghe P., Lohier J.-F., Rathelot P., Vanelle P. and Rault S. Nitrated isomers of 2-trichloromethylquinoline. *Acta Cryst.*, 2008, C64, o441-o444.

- Sopková-de Oliveira Santos J., Caruso A., Lohier J.-F., Lancelot J.-C. and Rault S. 9-Ethyl-1,4-dimethyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl) -9H-carbazoles and 6-bromo-9-ethyl-1,4-dimethyl-9H-carbazole. *Acta Cryst.*, 2008, C64, o453–o455.
- Vonthron-Sénécheau C., Sopkova-de Oliveira Santos J., Mussio I. Rusig A.-M. X-ray structure of floridoside isolated from the marine red algae *Dilsea carnosa*. *Carbohydrate Research*, 2008, 343, 2697-2698. (IF=1.960)
- Omran Z., Stiebing S., Godard A.-M., Sopkova-de Oliveira Santos J., Dallemagne P. Synthesis and biological evaluation of new Donepezil-like Thiaindanones as AChE inhibitors. *J. Enzyme Inhibit. Med. Chem.*, 2008; 23(5): 696–703.
- Bureau, R.; Varin, T.; Lepailleur, A.; Daveu, C.; Lemaître, S.; Lancelot, J.C.; Lesnard, A.; Butt, S.; Dauphin, F.; Rault, S. Pharmacophores of 5-HT₄ receptor ligands: Experience of CERMN and implications for drug design. *Current Computer-Aided Drug Design*, 2008, 4, 199-208.
- Varin, T.; Saettel, N.; Villain, J.; Lesnard, A.; Dauphin, F.; Bureau, R. And Rault, S. 3D Pharmacophore, hierarchical methods, and 5-HT₄ receptor binding data. *J. Enz. Inh. Med. Chem.*, 2008, 23, 593–603.
- Lemaitre, S.; Lepailleur, A.; Bureau, R.; Butt-Gueulle, S.; Lelong-Boulouard, V.; Duchatelle, P.; Boulouard, M.; Dumuis, A.; Daveu, C.; Pfeiffer, B.; Dauphin F. and Rault, S. Novel Antagonists of Serotonin 5-HT₄ Receptors: Synthesis and Biological Evaluation of Pyrrolothienopyrazines. *Biorg. Med. Chem.* 2009, 17, (6), 2607-22.
- Rochais, C.; Vu Duc, N.; Lescot, E.; Sopkova-de Oliveira Santos J.; Bureau, R.; Meijer, L.; Dallemagne, P. and S. Rault. Synthesis of New DiPyrrolo- and FuroPyrroloPyrazinones Related to Tripentones and their Biological Evaluation as Potential Cyclin-Dependant Kinases Inhibitors. *Eur J Med Chem*, 2009, 44, (2), 708-16.
- Varin T., Bureau R., Mueller C. and Willet P. Clustering files of chemical structures using the Székely-Rizzo generation of Ward's method. *J. Mol. Graph. Model.* 2009, 28, 187-195.
- Sopková-de Oliveira Santos J., Bazin M.-A., Lohier J.-F., El Kihel L. and Rault S. 1,2,3-Trimethoxy-4-[(E)-2-phenylvinyl]benzene and 1,1'-(1E,3E)- buta-1,3-diene-1,4-diylbis(2,3,4-trimethoxybenzene). *Acta Cryst*, 2009, C65, o311-o313.
- Lozano, S.; Lescot, E.; Halm, M.P.; Lepailleur, M.; Bureau, R. and Rault, S. Prediction of acute toxicity in fish by using QSAR methods and chemical modes of action. *J. Enz. Inh. Med. Chem.*, 2009, à paraître.
- Bureau, R.; Boulouard, M.; Dauphin, F.; Lezoualc'h, F. and Rault, S. Review of 5-HT₄R ligands. State of art and clinical applications. *Current Medicinal Chemistry*, 2009, à paraître.
- Sopková-de Oliveira Santos, J. ; Primas, N. ; Lohier, J.-F.; Bouillon A. and Rault S. An intermolecular dative B←N bond in 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)thiazole. *Acta Cryst E*, 2009, à paraître.

Communications par affiches

- S. Lozano, E. Lescot-Fontaine, M-P. Halm, A. Lepailleur, R. Bureau and S. Rault, Classification of chemicals by Mode of Action, 24th International Collaborative Group Meetings (ICGMs), Cambridge, 9-10 décembre 2008.
- S. Lozano, E. Lescot-Fontaine, M-P. Halm, A. Lepailleur, R. Bureau and S. Rault, Classification par mode d'action des substances chimiques, 16ème journée des jeunes chercheurs, Paris, 5 février 2009.
- S. Lozano, J. Patrice, E. Lescot-Fontaine, M-P. Halm, R. Bureau and S. Rault, A classification method related to mode of action and QSAR in ecotoxicology, 12ème journée de l'école doctorale normande biologie intégrative santé environnement (EDNBISE), Rouen, 20 mars 2009.
- S. Lozano, G. Poezevara, B. Cuissart, M-P. Halm, E. Lescot-Fontaine, A. Lepailleur, R. Bureau and S. Rault, Supervised classification and QSAR in ecotoxicology: comparison of two methods, Journées de la société française de chémoinformatique (SFCI), Montpellier, 24-25 juin 2009.
- Lepailleur, A.; Lemaître, S.; Feng, X.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Caignard, D.H.; Pfeiffer, B.; Delagrance, P.; Boutin, J.; Renard, P.; Bureau, R.; Rault, S. Molecular Modeling Studies Focused on Novel Bithiophene Derivatives as Non-Peptidic AANAT Inhibitors. Journées nationales de Chémoinformatique. Montpellier, 24 – 25 Juin 2009.

6. Dulin F., Sopkova-de Oliveira Santos J., Leprince J., Guilhaudis L., Segalas-Milazzo I., Vaudry H., Bureau R., Rault S. 3D Molecular model of the GPR103 Receptor implicated in eating disorder and virtual screening of the CERMN pharmacolibrary. Journées Nationales de Chémoinformatique. Montpellier, 24-25 juin 2009.
7. Dulin F., Sopkova-de Oliveira Santos J., Leprince J., Guilhaudis L., Segalas-Milazzo I., Vaudry H., Bureau R., Rault S. Molecular modeling studies of new ligands for the GPR103 receptor implicated in eating disorder. 18th European Conference of GP2A "Group of Medicinal Chemists of the Atlantic Arc". Trinity College Dublin, 3-4 Septembre 2009.
8. S. Lozano, G. Poezevara, B. Cuissart, M-P. Halm, E. Lescot-Fontaine, A. Lepailleur, R. Bureau and S. Rault, Assessment of chemical risk phrases in ecotoxicology: comparison of two methods, 14th International Symposium on Toxicity Assessment (ISTA 14), Metz, 30 août au 4 septembre 2009.

Conférences invités / communications orales

1. Pharmacophores / virtual screening and 5HT ligands. Bureau, R. 6th annual Congress of International Drug Discovery Science and Technology (IDDST). Octobre 2008 (conférencier invité).
2. Classification of chemicals by toxic Mode of Action. S. Lozano, E. Lescot-Fontaine, M-P. Halm, A. Lepailleur, R. Bureau and S. Rault, , 24th International Collaborative Group Meetings (ICGMs), Cambridge, 9-10 décembre 2008.
3. Neuropeptide, GPCR et screening virtuel. Mise en évidence de nouveaux ligands potentiels. E. Lescot, R. Bureau. Journées de la chimiothèque nationale, Montpellier, juin 2009 (conférencier invité).

Thèses

1. M. Thibault Varin (soutenu en juillet 2009).
Financement par une bourse régionale.
Sujet : Détermination par modélisation moléculaire de nouveaux ligands des récepteurs sérotoninergiques de type 5A (5-HT_{5A}) et 6 (5-HT₆). Exploitation des chimiothèques locales et nationales.
2. M. Sylvain Lozano (début janvier 2008).
Financement ANR.
Sujet : (Q)SAR et classification hiérarchique pour un ensemble hétérogène de données en écotoxicologie et toxicologie.

Collaborations universitaires

1. Projet 26RFa : Unité INSERM U 413 (Dr C. Delarue, Dr. H. Vaudry) et IRCOF, laboratoire de RMN (Pr H. Oulaydi), Université de Rouen, France.
2. Projet 5-HT : Pr P. Willet, Krebs Institute for Biomolecular Research and Department of Information Studies, University of Sheffield, Royaume Uni.

Projet ANR

1. Projet INNO-TOX. Projet se plaçant dans le cadre de la thématique REACh. Collaboration PCAS (M. Bouquet) / CNRS 7186 (P. Vasseur).

Enseignements

1. Utilisation des logiciels comme base de support d'un cours de modélisation moléculaire, Master recherche M2 chimie organique : 10 étudiants.
2. Travaux pratiques de modélisation moléculaire dans le cadre de l'UFR des sciences pharmaceutiques : 80 étudiants (autour de 40 heures).
3. Utilisation des logiciels comme base de support d'un cours de modélisation moléculaire, Programme Interreg, University of Norwich and Southampton (UK). R. Bureau, Professeur invité : 20 étudiants.

2. CIMAP (Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique)

Localisation : Caen
Site Web : <http://cimap.ensicaen.fr/>

Projet : 2003009

Responsable de projet : **Pierre Ruterana**

Source des informations : **Jun Chen**

Titre : **Energie et structure électronique des défauts étendus dans les semi-conducteurs nitrures**

Article

1. Microelectronics Journal, 40 (2009) 342--345, "Microstructure analysis in strained-InGaN/GaN multiple quantum wells", Huaping Lei, Jun Chen, Xunya Jiang and Gérard Nouet.

Communication par affiche

1. E-MRS Fall Conference, Symposium A, September 14-18, 2009, Warsaw Poland, "Role of threading dislocations on Indium distribution in InGaN alloys", Huaping Lei, Pierre Ruterana, Jun Chen, Xunya Jiang.

Thèse

1. Huaping LEI : thèse soutenue le 30 juin 2009, "Dislocations et puits quantiques dans les nitrures semiconducteurs III-V par des méthodes de dynamique moléculaire et du premier principe".

Projet : 2007005

Responsable de projet : **Bessem Ben Doudou**

Source des informations : **Jun Chen**

Titre : **Fonctionnalisation et greffage des nanotubes de carbone**

Communication orale

1. Colloque International Télécom'2009 & 6^{èmes} Jfmma, 12-14 Mars 2009, Agadir, Maroc, "Etude ab-initio de la fonctionnalisation des nanotubes de carbone"

Communications par affiches

1. NT09: Tenth International Conference on the Science and Application of Nanotubes, 21-26 Juin 2009 Beijing Chine, "Structural and Electronic Properties of Covalently Functionalized Zigzag Single Walled Carbon Nanotubes: An Ab Initio Study"
2. TICC2009 : TAIBAH INTERNATIONAL CHEMISTRY CONFERENCE, 23-25 Mars 2009 à Al-Madinah Al-Munawwarah, Saudi Arabia, "Organic Functionalization of Carbon Nanotubes: experiments and simulations"

3. UMR 6614 - CORIA (COMplexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie)

Localisation : Saint Etienne du Rouvray
Site Web : <http://www.coria.fr>
Remarque : certains chercheurs du CORIA utilisent également le cluster de calcul Linux HPXO.

Projet : 1998022

Responsable de projet : **Abdellah HADJADJ**

Titre : **Écoulements Turbulents Compressibles**

Publications

1. Hadjadj, A., Onofri, M. (2009) Nozzle Flow Separation. Int. Journal of Shock Waves, 19(3): 163- 169.
2. Hadjadj, A., Dussauge, J.-P. (2009) Shock Wave Boundary layer Interaction. Int. Journal of Shock Waves, 19 (6): 449- 452.

Communications

1. Hadjadj, A. (2009) High-fidelity numerical simulation of high-speed flows including shock/shock and shock/boundary-layer interactions. Invited Seminar at the Center for Turbulence Research (CTR), 8 May 2009, Stanford University, CA, USA.
2. Hadjadj, A. (2009) High-fidelity numerical simulations of shock/turbulence and shock/vortex interactions. Invited Plenary Lecturer at the 27th International Symposium on Shock Waves, 19-24 July, Saint-Petersburg, Russia.
3. Ngomo, D., Chinnayya, A., Hadjadj, A. (2009) Assessment of high-order WENO methods for shock attenuation in narrow channels with friction and heat loss. The 27th International Symposium on Shock Waves, 19-24 July, Saint-Petersburg, Russia.
4. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Palerm, S. (2009) DNS of supersonic mixing layers in nozzles. The 3rd European Conference for Aerospace Sciences, 6-9 July, Versailles, France.
5. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Guha, C., Kutta, T.K. (2009) Numerical simulation of microscale gas flows: continuum approach. Chapter Book in "Advanced Technologies", In-Tech publisher, ISBN 978-953-7619-X-X
6. Hadjadj, A., Dubos, S. (2009) Large eddy simulation of supersonic boundary layer at $M=2.4$. Proceeding of the IUTAM Symposium on Unsteady Separated Flows and their Control, M. Braza and K. Hourigan (Ed.) Springer, e-ISBN 978-1-4020-9898-7

Collaborations industrielles

1. Projet FAURECIA (FAURECIA/As-CORIA) - (2007-2009) - Modélisation des écoulements instationnaires dans les systèmes d'échappement – application à la dépollution automobile.
2. Programme ATAC (CNES/ONERA/CNRS) - (2001-2009) - Programme de recherche sur les charges latérales des propulseurs cryogéniques.
3. Projet HARRC (CNES/DLR/CORIA) - (2007-2010)- High Aspect Ratio Regenerative Cooling systems.

Collaborations internationales

1. Projet SciDAC en collaboration avec "NASA-Ames", CA, USA - (2008-2010) - Scientific Discovery through Advanced Computing.
2. Projet SHOCK en collaboration avec "Ben-Gurion University of Negev", Israel- (2008-2011) - Shock waves mitigation and control.

Thèses de doctorat /post-doc

1. O. Ben-Nasr, thèse en cours.
2. D. Ngomo, thèse en cours.
3. D. Taieb, thèse en cours.
4. A. Chaudhuri, post-doc CNES.

Projet : 2002003Responsable de projet : **Claude Rozé**Source des informations : **Thierry Girasole**Titre : **Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses.**

Publication

1. S. Idlahcen, L. Méès, C. Rozé, T. Girasole and J.B. Blaisot. Time gate, optical layout, and wavelength effects on ballistic imaging. *JOSA A*, 26(09), 1995-2004, 2009.

Communication

1. S. Idlahcen, C. Rozé, L. Méès, T. Girasole and J.B. Blaisot. Imagerie balistique d'un spray diesel haute pression en proche sortie d'injecteur. 8ème journées des phénomènes ultra-rapides (JPU 2009), Bordeaux, 27-30 avril 2009.

Projet : 2003008Responsable de projet : **Alain Berlemont**Titre : **Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray.****Publication**

1. R. Lebas, T. Menard, P.A. Beau, A. Berlemont and F.X. Demoulin /Numerical simulation of primary break-up and atomization: DNS and modeling study, *Int. J. Multiphase Flows*, Vol. 35, pp. 247-260, 2009

Communications

1. A. Berlemont, J. Cousin, M. Doring and T. Menard A Coupling between Internal Flow and Primary Breakup Simulations - Case of a Compound Nozzle, ICLASS 2009, 11th International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Vail, Colorado USA, July 2009
2. J. Chesnel, J. Réveillon, T. Ménard, M. Doring, A. Berlemont, F.X. Demoulin LES of atomization: From the resolved liquid surface to the subgrid scale spray, ICLASS 2009, 11th International Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Vail, Colorado USA, July 2009

Collaboration

1. PREDIT Emphase PREDIT IDE2

Master

1. Emeline Noel : «Interfaces et Frontières immergées»

Projet : 2006003Responsable de projet : **Pascale Domingo**Titre : **Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.****Publications**

1. G. Lodato, L. Vervisch, P. Domingo (2009)
A compressible wall-adapting similarity mixed model for large-eddy simulation of the impinging round jet, *Phys. Fluids.*, Vol. 21, 035102.
2. G. Godel, P. Domingo, L. Vervisch (2009)
Tabulation of NOx chemistry for Large-Eddy Simulation of non-premixed turbulent flames, *Proc. Combust. Inst*, Vol.32 pp 1555-1561.
3. L. Vervisch, P. Domingo, G. Lodato, D. Veynante,
Scalar energy fluctuations in Large-Eddy Simulation of turbulent flames: Statistical budgets and mesh quality criterion, *Accepté Combust. Flame*.
4. V. Subramanian, P. Domingo, L. Vervisch,
Large-Eddy Simulation of forced ignition of an annular Bluff-body burner,
DOI information: 10.1016/j.combustflame.2009.09.014.
5. Lodato, G., Domingo, P., Vervisch, L., Veynante, D. (2009)
Scalar variances: LES against measurements and mesh optimization criterion; scalar gradient: a three-

dimensional estimation from planar measurements using DNS.

"Studying turbulence by using numerical simulation databases XII", (Eds Center for Turbulence Research) Stanford, pp. 387-398.

Affiches (conférences internationales)

1. Nguyen P.-D., Subramanian, V., Domingo, P., Vervisch L. (2009),
Multidimensional Flamelet Manifolds for hybrid combustion regimes,
4th European Combustion Meeting, April 14-17, Vienna University of Technology, Austria.
2. Enjalbert, N., Domingo, P., Vervisch L. (2009),
Flow-Controlled Chemistry Tabulation (FCCT) for Large-Eddy
Simulation of turbulent combustion with detailed chemistry,
4th European Combustion Meeting, April 14-17, Vienna University of Technology, Austria.
3. Belhi M., Domingo P., Vervisch P. (2009).
Effect of electric fields on flame stability.
4th European Combustion Meeting, April 14-17, Vienna University of Technology, Austria.

Communications (conférences internationales)

1. Vervisch, L., P. Domingo, G., Lodato, Veynante, D., (2009)
Scalar sub-grid energy in large-eddy simulation of turbulent flames: mesh quality criterion,
Quality and Reliability of Large-Eddy Simulations II, QLES2009,
9-11 September, Pisa, Italy.
2. L. Vervisch, V. Moureau, P. Domingo et G. Lodato (2009)
Scalar fields Sub-Grid Scale Energy in Large-Eddy Simulation of turbulent flames: Mesh quality
criterion. Conférence d'introduction à LESTAC09, Large-Eddy Simulation in Turbulence, Aeroacoustic and
Combustion,
Aug. 26-28, Marseille, France.
3. V. Subramanian, P. Domingo, L. Vervisch (2008)
"Large eddy simulation of forced ignition of an annular bluff-body burner", DNS and LES of reacting
flows,
22-24 Octobre 2008, Eindhoven, Netherlands

Collaborations

1. Laboratoire EM2C de l'école centrale de Paris
2. Institut Jean le Rond d'Alembert, Paris VI

Thèses

Soutenues :

1. Guido LODATO,
2. Alexandre NAUDIN

En cours:

1. Memdouh BELHI,
2. Subramaniam VALLINAYGAM,
3. Guillaume GODEL,
4. Cindy MERLIN,
5. Nicolas ENJALBERT

Projet : 2006011 et 2006010

Responsable de projet : **Francois-Xavier DEMOULIN**

Titre 2006011 : **Modélisation de l'atomisation LES pour les moteurs automobiles.**

Titre 2006010 : **Etude du mélange dans le cadre d'un PaSR**

Publications

1. Luret, G., T. Menard, Blokkeel, G., Berlemont, A. Reveillon, J. Demoulin, F. X. "Spray interactions: Modeling of collisions/coalescence phenomena ", Atomisation and Spray Technology, Submitted after selection among the five best papers at 22nd ILASS-Europe, 2008. (publication soumise)
2. Lebas, R., Menard, T., Beau, P. A., Berlemont, A. and Demoulin, F. X., "Numerical simulation of primary break-up and atomization: DNS and modelling study", International Journal of Multiphase Flow, 35 (3), 247-260, 2009

Conférences

1. Chesnel J, Reveillon J, Menard T, Doring M, Berlemont A, Demoulin F X. "LES of atomization: From the resolved liquid surface to the subgrid scale spray", 11th ICLASS International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems. Vail, Colorado, 2009
2. Chesnel J, Reveillon J, Demoulin F.X., Ménard T., "Subgrid modeling of liquid atomization"/, 22nd European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems 8-10 September, Como Lake, Italy, 2008.
3. G. Luret, G. Blokkeel, R. Lebas, T. Ménard, A. Berlemont, F.X. Demoulin "Spray interactions modelling of collision/coalescence phenomena", 22nd European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, 8-10 September, Como Lake, Italy, 2008

Projet : 2008018Responsable de projet : **Alexis Coppalle**Titre : **Benchmark de modèles d'incendie.****Publication**

1. Une publication

Affiche

1. Une affiche

Projet : 2009003Responsable de projet : **Guillaume Ribert**Titre : **Supercritical Simulations (SUSI).****Thèses**

1. David Taieb
2. François Troadec

Collaboration

1. GaTech

4. UMR CNRS 5210 - CRC (Centre de Recherches de Climatologie)

Localisation : Dijon

Site Web : <http://www.u-bourgogne.fr/climatologie/>

Projet : 2009002Responsable de projet : **Thierry Castel**Titre : **Régionalisation des changements climatiques.**

Publications

1. Roucou, P., T. Castel, N. Vigaud, B. Fontaine, Y. Richard, P. Camberlin, B. Bois, 2009, Régionaliser le climat pour en évaluer les impacts : l'apport des modèles numériques. *Révue annuelle de la recherche*, Université de Bourgogne, p 122-128.
2. Bonnefoy, M. Madelin et T. Castel, 2009, Regionalization of a grapevine agroclimatic index, 9^{ème} rencontres TheoQuant, 4-6 mars Besançon, 10p.
3. Castel T., Y. Xu, Y. Richard, C. Cuccia, B. Bois, P. Roucou, Regional climate model performance to simulate high resolution seasonal variability of temperature and precipitation over temperate area. In preparation.

Communications

1. Lamy C., M. Ubertosi, A. Vautier, P. Curmi, T. Castel, Yves Richard, H. Toussaint and P. Amiotte-Suchet, 2009, Evaluation de la réserve en eau à l'échelle des pédocapots de Bourgogne, XXXV^{èmes} Journées Scientifiques du GFHN, Aix-en-Provence (France), 25 et 26 novembre. <http://www-cgi.ensmp.fr/gfhn/Affiche_GFHN2010.pdf>
2. Lamy C., P. Amiotte-Suchet, T. Castel, Yves Richard, M. Ubertosi, P. Curmi, A. Vautier and H. Toussaint, 2009, Evaluation de la réponse des sols aux changements climatiques - Exemple des sols de Bourgogne, XXXV^{èmes} Journées Scientifiques du GFHN, Aix-en-Provence (France), 25 et 26 novembre. <http://www-cgi.ensmp.fr/gfhn/Affiche_GFHN2010.pdf>

Collaborations

1. CNRS/Univ. Bourgogne : UMR 5561 Biogeosciences,
2. INRA Dijon : UMRs 102 LEG & 1210 BGA,
3. INRA Nancy : UMR 1092 LERFOB,
4. AgroSup Dijon : UP MPE,
5. Alterre Bourgogne : Agence pour l'Environnement et le développement soutenable,
6. Bureau Interprofessionnel des Vins de Bourgogne.

Thèse

1. Cédric Cuccia sur « Changements climatiques et potentialités viticole du pinot noir et du Chardonnay en Bourgogne ». Université de Bourgogne, Ecole Doctorale E2S.

Masters

1. Mémoire présenté par M. Cyril Bonnefoy portant sur « Impact de la variabilité climatique sur la vigne en Bourgogne : apport du modèle climatique régional WRF » Master Géobiosphère, Université de Bourgogne, 50p.

5. UMR CNRS 6634 - GPM (Groupe de Physique des Matériaux)

Localisation : Rouen

Site Web : <http://www.univ-rouen.fr/gpm/>

Projets 1999006, 2005003, 2006007, 2006008, 2007003

Responsables des projets :

1999006 : **Hélène Zapolsky**

2005003 : **Denis Ledue**

2006007 : **Nicolas Lecoq**

2006008 : **Denis Ledue**

2007003 : **Nicolas Lecoq**

Titres :

1999006 : **Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V.**2005003 : **Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins".**2006007 : **Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc.**2006008 : **Cinétique de transformation de phase et propriétés magnétiques dans les alliages binaires. Ni_{3+x}Fe_{1-x}.**2007003 : **Modélisation de l'évolution de la microstructure dans un acier modèle au cours de traitements thermiques.**Source des informations : **Renaud Patte****Publications**

1. "Modeling of Memorial Effects in Spinodal Decomposition of a Binary Systems", N. Lecoq, H. Zapolsky and P. Galenko, Proceeding of the 2009 Fall Meeting of the Material Research Society, Boston, 30 novembre - 4 décembre 2008, 2008 Fall meeting proceedings
2. N. Lecoq, H. Zapolsky and P. Galenko "Evolution of the structure factor in a hyperbolic model of spinodal decomposition", Europ. Phys. J., V. 177, N 1, 2009, pp.165-175.
3. "Magnetization reversal in amorphous Fe/Dy multilayers: a Monte Carlo study", E. Talbot, D. Ledue and P.E. Berche, Journal of Applied Physics 106 (2009) 023901
4. H. Zapolsky, S. Ferry, X. Sauvage, D. Blavette and L.Q. Chen "Selective growth of DO22 variants in Ni-V alloys" Phil. Mag., accepted.

Affiches

1. "Modeling of Memorial Effects in Spinodal Decomposition", N. Lecoq, H. Zapolsky and P. Galenko, Proceedings of the 2008 Fall Meeting of the Material Research Society, Boston, 30 novembre - 4 décembre 2008
2. "Influence des interactions dipolaires sur la susceptibilité alternative d'assemblées d'agrégats magnétiques", D. Ledue, L. Lenoble, H. Kachkachi, 12ème Colloque Louis Néel, La Grande Motte(1-3 octobre 2008)

Communications

1. H. Zapolsky, J. Boisse, R. Patte and N. Lecoq "Phase Field Simulations of Coarsening Kinetics in Al-Sc and Al-Sc-Zr Alloys", MRS , 1-4 Décembre 2008, Boston
2. M. Certain, H. Zapolsky « Phase field simulation of kinetics in Al-Sc and Al-Zr-Sc alloys », Eurotherm Seminar 84 "Thermodynamics of phase changes", Namur, 24-27 mai 2009.
3. "Modélisation des microstructures dans les alliages à l'échelle microscopique", H. Zapolsky, N. Lecoq, R. Patte, J. Boisse, M. Certain , Journée Mécanique Matériaux de l'Institut des Matériaux de Rouen, Rouen, 17 décembre 2008
4. "Effets des interactions dipolaires sur les mécanismes d'aimantation dans les assemblées d'agrégats", L. Lenoble, D. Ledue, H. Kachkachi, R. Patte, Journées «Simulation Numérique», Boucicaut, Paris (11-12 juin 2009)
M. Certain, H. Zapolsky and R. Patte "Methode de champ de phases cristallin", Journée de doctorant, 19 Juin, 2008, Rouen, GPM.
5. H. Zapolsky "Phase field Method for microstructure evolution in alloys", invited Lecture ,Linkoping University, Mai 2009
6. H. Zapolsky "Phase Field Crystal method. Modeling of fcc to bcc transitions", invited Lecture, Linkoping University, Mai 2009.
7. H. Zapolsky "Phase field modeling of microstructural evolution in alloys", invited Lecture, Institute of Materials Physics in Space by German Aerospace Center, Cologne, Allemagne, Avril 2009

Collaborations

1. Pr Hamid Kachkachi (Université de Perpignan)
2. Peter Galenko (Institut für MaterialPhysik im Weltraum, Cologne, Allemagne)

3. Pr Armen Khachaturyan (Université du New Jersey, Etats-Unis)
4. Société Nexans
5. Pr Igor Abrikosov (Université de Linköpings, Suede)
6. Dr Faïçal CHEMAM (Université de Tebessa (Algérie),

Thèses

1. Johan Akre "Caractérisation à la sonde atomique tomographique de séquences de précipitation dans un acier expérimental" (soutenue le 22 octobre 2008)
2. Iryna Vernhyora "Modélisation à l'échelle atomique de l'évolution microstructurale dans les alliages Ni-Fe : Corrélation entre propriétés magnétiques et structurales" (soutenue le 19 octobre 2009)
3. Marilyne Certain "Etude de coalescence des précipités tétraogonaux dans une matrice cubique pour les alliages à base de Ni" (septembre 2008-)
4. Laurent Lenoble (septembre 2008- aout 2009, these interrompue en raison du décès de Laurent Lenoble)
5. Nicolas Masquelier "Caractérisation et modélisation de transformations microstructurales pour la mise au point d'une nouvelle génération d'alliages d'aluminium pour conducteurs électriques" (sept 2009-)
6. Saoussen Djedai "Simulations numériques des propriétés de multicouches magnétiques" (janv 2007-)
7. Adeline Maitre "Etude par simulations numériques du renversement d'aimantation dans les multicouches IrMn/Co/Pt à anisotropie d'échange" (sept2009-).

Master

1. Jonathan Michel "Caratérisation des alliages Al-Zr - Analyse des microstrutures et optimisation des traitements thermiques" (Master2 Science de la Matière et Nanoscience, Université de Rouen, février-juin 2009)

Projet : 2003014Responsable de projet : **Mickael Arnoult**Titre : **Simulation de la relavation des polymères.****Publication**

1. "Bond fluctuation model to describe physical aging in polymeric materials."
M. Arnoult, J. M. Saiter, C. Pareige, J. M. Meseguer Dueñas, J. L. Gómez Ribelles, J. Molina Mateo
J. Chem. Phys. 130, 214905 (2009); doi:10.1063/1.3134685

Projet : 2004002Responsable de projet : **Pierre Emmanuel Berche**Titre : **Étude par simulation numérique du comportement magnétique de tricouches Fe/Dy/Fe.****Publications**

1. "Magnetization reversal in amorphous Fe/Dy multilayers: a Monte Carlo study."
E. Talbot, D. Ledue, P.E. Berche
Journal of Applied Physics 106 (2009) 023901-023911
2. "Monte Carlo investigation of the magnetic anisotropy in Fe/Dy multilayers."
E. Talbot, P.E. Berche, D. Ledue
Journal of Magnetism and Magnetic Materials 320 (2008) 2814-2822

Projet : 2005014Responsable de projet : **Cristelle Pareige**

Titre : **Etudes cinétiques des transformations de phases dans des alliages modèles des aciers.**

Publication

1. C. Pareige, C. Domain, P. Olsson
"Short and long range order in Fe-Cr: a Monte Carlo study"
JAP (2009) to be published (106, 1 ?)

Communications

1. C. Pareige, C. Domain, P. Olsson
"Short and long range order in Fe-Cr: a Monte Carlo study"
Workshop Fe-Cr, Genoa, 30-31 march 2009
2. C. Pareige, M. Roussel, S. Novy, P. Olsson, C. Domain, P. Pareige
"Phase transformation in a high chromium content Fe-Cr alloy : simulation versus experiment"
FeCr workshop, Madrid, 2-3 novembre 2009

Collaboration

1. EDF – R&D MMC

Thèse

1. Bourse industrielle - EDF : "Mécanismes de vieillissement à très longue échéance des aciers inoxydables austéno-ferritiques" - soutenance prévue le 27 novembre 2009

Projet : 2008001

Responsable de projet : **Pierre-Emmanuel Berche**

Titre : **Etude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe₂/YFe₂.**

Communication

1. "Investigation of the magnétization reversal in DyFe₂/YFe₂ exchange-coupled superlattices by Monte Carlo simulation."
P.E. Berche, T. Philippe, E. Talbot, C. Dufour
Joint European Magnetic Symposia (JEMS08)
Trinity College, Dublin (14/19-09-2008)

Affiche

1. 12ème colloque Louis Néel à La Grande Motte (30/09-3/10/2008)
"Processus de retournement de l'aimantation dans des super-réseaux DyFe₂/YFe₂ : comparaison expérience - simulation numérique."
P.E. Berche, E. Talbot, T. Philippe, C. Dufour, K. Dumesnil

Collaboration

1. Collaboration initiée avec les universités de Nancy 1 et de Tebessa en Algérie. Dans ce cadre, notre laboratoire (le Groupe de Physique des Matériaux - UMR CNRS 6634) accueille à compter du 1er novembre 2009 pour une durée de 18 mois Saoussen DJEDAI, doctorante algérienne, afin de lui permettre de finaliser ses travaux pour sa thèse de doctorat. Son projet de recherche au GPM porte sur l'étude des propriétés magnétiques de super-réseaux DyFe₂/YFe₂ élaborés et caractérisés expérimentalement à l'université de Nancy 1.

Communication orale

1. "Retournement de l'aimantation dans des super-réseaux DyFe₂/YFe₂ couplés antiferromagnétiquement."
P.E. Berche, E. Talbot, T. Philippe, C. Dufour, K. Dumesnil
Rencontre thématique du GDR Nanoalliages, Lyon (19/20-01-2009)

Autre

On peut ajouter, en lien avec ce projet, le projet 2004002 ainsi qu'avec le projet plus ancien 2000007, une soutenance d'habilitation à diriger des recherches pour laquelle le support du CRIHAN aura été souligné avec insistance :

"Systèmes modèles et systèmes magnétiques : étude par simulations Monte Carlo"

Pierre-Emmanuel Berche

Discipline : Physique - spécialité : Science des matériaux

Soutenu le 26/10/09

Projet : 2008014

Responsable de projet : **Cristelle Pareige**

Titre : **Modélisation des premiers stades de précipitation dans des alliages de magnésium modèles.**

Communication

1. Viktor Kopp, Cristelle Pareige, Williams Lefebvre
"Etude de la cinétique de précipitation dans le système Mg-Nd par modélisation Monte-Carlo et sonde atomique tomographique"
GDR transdiff, Grenoble, 16 juin 2009

Thèse

1. "Analyse et modélisation de transformations de phase par précipitation dans des alliages de magnésium modèles", Viktor Kopp

6. UMR 6089 - GSMA (Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique)

Localisation : Reims

Site Web : <http://www.univ-reims.fr/GSMA/>

Projet : 2005009

Responsable de projet : **Thibaud Cours**

Titre : **Etudes théoriques de processus atmosphériques : études cinétiques de réactions élémentaires et capture d'un composé organique volatil par une goutte d'eau.**

Communication

1. Cours T., Canneaux S., Louis F. et Hanoune B.,
What is the Reaction Mechanism between Formaldehyde and Water?
237th ACS National Meeting and Exhibition, Poster, Salt Lake City (USA), 22-26 mars 2009.

Master

1. un étudiant en Physique-Chimie, spécialité "Physicochimie Moléculaire et Optique Avancées"

Projet : 2008006

Responsable de projet : **Emmanuel Rivière**

Titre : **Etude de l'impact de la convection profonde tropicale sur la composition chimique de la haute troposphère et de la basse stratosphère.**

Publication en préparation à soumettre

1. Liu, X., E. D. Rivière, V. Marécal, G. Durry, A. Hamdouni, and J. Arteta, Water vapor budget associated to overshoots in the tropical stratosphere: mesoscale modeling study of August 4-5, 2006 during SCOUT-AMMA, à soumettre à Atmospheric Chemistry and Physics, issue spéciale SCOUT-O3.

Thèse

1. Xiaoman Liu, doctorante au GSMA (Actuellement en début de troisième année) sur un financement de la région Champagne-Ardenne

Présentations poster

1. X. Liu, E. D. Rivière, V. Marécal, G. Durry, A. Hamdouni and J. Arteta, Water Budget associated with Overshoots during SCOUT-AMMA: mesoscale modeling study of the case of August 4-5 2006. Présentation aux congrès SCOUT-O3 et COST à Schliersee, Allemagne, en Juin 2009.
2. X. Liu, E. D. Rivière, V. Marécal, G. Durry, A. Hamdouni and J. Arteta, Water Budget associated with Overshoots during SCOUT-AMMA: mesoscale modeling study of the case of August 4-5 2006. Présentation à l'école d'été WAVACS-COST, Cargèse, Corse, Septembre 2009.

Autres

1. Ces travaux ont été cités dans les « highlights » du projet Européen SCOUT-O3 du FP6
2. Ces travaux ont été cités dans un article de revue de la campagne SCOUT-AMMA (Cairo et al., 2009 ; Atmos. Chem. Phys. Discuss.)

7. UMR 8182 - ICMO (Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay)

Localisation : Paris

Site Web : <http://www.icmo.u-psud.fr/>**Projet : 2006013**Responsable de projet : **Vincent Gandon**Titre : **Etude par DFT du mécanisme de la cooligomérisation 2:1 d'Alcynes et d'alcènes catalysée par les complexes du cobalt.****Publications**

1. Cyclopentadienyl Ligands as Perfect Anion Receptors: Teamwork between π -Anion Interaction and C-H...Anion Hydrogen Bonds. Amouri, H.; Moussa, J.; Malacria, M.; Gandon, V. Cryst. Growth & Design, 2009, DOI: 10.1021/cg900812t.
2. Silver- and Brønsted Acid-Catalyzed Nazarov-Type Cyclizations to Benzofulvenes. Cordier, P.; Aubert, C.; Malacria, M.; E. Lacôte; Gandon, V. Angew. Chem. Int. Ed. 2009, 48, 8757-8760.
3. An Unusual Anion- π Interaction in Irido Organometallic Assembly: Synthesis, First Crystal Structure and Computational Study. Moussa, J.; Gandon, V.; Rager, M. N.; Malacria, M.; Chamoreau, L.-M.; Amouri, H. Eur. J. Inorg. Chem. 2009, 3703-3707 (couverture).
4. The Role of Water in Platinum-Catalyzed Cycloisomerization of 1,6-Enynes: A Combined Experimental and Theoretical Gas Phase Study. Baumgarten, S.; Lesage, D.; Gandon, V.; Goddard, J.-P.; Malacria, M.; Tabet, J.-C.; Gimbert, Y.; Fensterbank, L. ChemCatChem. 2009, 1, 138-143.
5. Generation and Trapping of Cyclopentenylidene Gold Species: Four Pathways to Polycyclic Compounds. Lemièrre, G.; Gandon, V.; Cariou, K.; Hours, A.; Fukuyama, T.; Dhimane, A.-L.; Fensterbank, L.; Malacria, M. J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 2996-3006.

6. Silicon–Hydrogen Bond Activation and Hydrosilylation of Alkenes mediated by CpCo Complexes: a Theoretical Study. Gandon, V.; Agenet, N.; Vollhardt, K. P. C.; Malacria, M.; Aubert, C. J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 3007-3015.
7. The Role of Bent Acyclic Allene Gold Complexes in Axis-to-Center Chirality Transfers. Gandon, V.; Lemiere, G.; Hours, A.; Fensterbank, L.; Malacria, M. Angew. Chem. Int. Ed. 2008, 47, 7534–7538 (couverture intérieure).
8. Thermal Intramolecular Alder-ene Cycloisomerization of 1,6-Allenynes. Buisine, O.; Gandon, V.; Aubert, C.; Fensterbank, L.; Malacria, M. Synlett 2008, 751–754 (invitation à participer au "Cluster on Acetylene and Allene Chemistry").
9. Cobalt-Mediated Regio- and Stereoselective Assembly of Dienamides by Hydroaminative Alkyne Coupling of α,ω -Diynes. Gandon, V.; Aubert, C.; Malacria, M.; Vollhardt, K. P. C. Chem. Commun. 2008, 1599–1601.

Thèse

1. Ophélie Kwasnieski

Master

1. Gaétan Burnens

8. UMR CNRS 6229 - ICMR (Institut de Chimie Moléculaire de Reims)

Localisation : Reims

Site Web : <http://www.univ-reims.fr/ICMR>**Projet : 2005010**Responsable de projet : **Eric Hénon**Titre : **Etude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.****Publications**

1. Inorganic Chemistry Communications, 12 (2009) 17720:
"Co(II)(L-proline)₂(H₂O)₂ solid complex: Characterization, magnetic properties, and DFT computations. Preliminary studies of its use as oxygen scavenger in packaging films"
Ziad Damaj, Aude Naveau, Laurent Dupont, Eric Hénon, Guillaume Rogez, Emmanuel Guillon
2. Tetrahedron 64 (2008) 9480-9489
Molecular dynamics simulation study on the interaction of KRN 7000 and three analogues with human CD1d
Eric Henon, Manuel Dauchez, Arnaud Haudrechy, Aline Banchet
3. Carbohydrate Research (submitted)
An Unexpected Rearrangement giving a new Thiosubstituted Carbohydrate
Agathe Martinez, Eric Hénon, Claire Coiffier, Aline Banchet, Dominique Harakat, Jean-Marc Nuzillard, Arnaud Haudrechy
4. Eur. J. Org. Chem. (submitted)
Access to a new potentially bioactive C-Galactoside ester analogue of KRN 7000 by using NEO strategy
Aline Bancheta, Stéphane Guillarme, Eric Hénon, Jean-Hugues Renault, Véronique Parriettie, Fanny Monneaux-Gadroye and Arnaud Haudrechy

Thèses co-encadrées

1. Ziad Damaj 08/12/2008, « Synthèse, caractérisation et propriétés de nouveaux matériaux actifs absorbant l'oxygène: emballages actifs ».
ICMR _ URCA

2. Marie Buchotte, 12/12/2008, « Synthèse d'une nouvelle série de thiosucres et sulfoniures insaturés à partir de dithioacétals de cétène dérivés de sucres ».
ICMR _ URCA

Master

1. Chantal Barberot, avril-juillet 2009, « Etude par modélisation de la réactivité chimique d'un dérivé de l'acide lévulinique dans le cadre de sa valorisation en chimie thérapeutique ».
ICMR _ URCA

9. IRCOF (Institut de Recherche en Chimie Organique Fine de Rouen)

Localisation : Rouen

Site Web : <http://ircof.crihan.fr/>

Remarque : de nombreux chercheurs de l'IRCOF participent également au projet RNMM (Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire)

Projets : 2004004 et 2005002

Responsables des projets :

2004004 : **Jacques Maddaluno**

2005002 : **Catherine Fressigné**

Titres :

2004004 : **Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium de 3-aminopyrrolidines chirales.**

2005002 : **Etude théorique du mécanisme d'une réaction d'hétérocyclisation anionique cascade.**

Laboratoire : **Macromoléculaire et Médicinale (FR CNRS 3038) - IRCOF**

Publications

1. "Enantioselective conjugate addition of a lithium ester enolate catalyzed by chiral lithium amides: a possible intermediate characterized" Lecachey, B.; Duguet, N.; Oulyadi, H.; Harrison-Marchand, A.; Fressigné, C.; Yamamoto, Y.; Tomioka, K.; Maddaluno, J. *Org. Lett.* 2009, 11, 1907-1910.
2. "Is elimination of lithium alkoxide easier from a vinylolithium or from an alkyllithium? A DFT study of the aromatization of 3-vinyliden-2,3-dihydrobenzofuran into benzofurans" Fressigné, C.; Girard, A.-L.; Durandetti, M.; Maddaluno, J. *Eur. J. Org. Chem.* 2009, 721-729.

Communications

1. "Intramolecular carbometallation of alkynes: a versatile route to heterocycles"
Special Research Project of Green Science of Kochi University
Tokyo (Japon), 10 janvier 2009
2. "Organolithium mixed aggregates in asymmetric synthesis"
Université Tohoku (Pr Yoshinori Kondo)
Sendai (Japon), 14 janvier 2009
3. "Organolithium mixed aggregates in asymmetric synthesis"
Université de Chiba (Pr Tsutomu Ishikawa)
Chiba (Japon), 15 janvier 2009
4. "Intramolecular carbometallation of alkynes: application to heterocycles synthesis"
RSC Organic Division Regional Meeting, South of England
Southampton (Royaume-Uni), 21 janvier 2009
5. "Mixed aggregates of chiral organolithium derivatives in asymmetric synthesis"
Kobe Pharmaceutical University (Pr. Takeaki Naito et Pr. Okiko Miyata)
Kobe (Japon), 14 avril 2009

- "Mixed aggregates of chiral organolithium derivatives in asymmetric synthesis"
Kyoto University (Pr. Kiyoshi Tomioka)
Kyoto (Japon), 15 avril 2009
- "Intramolecular carbometallation of alkynes: application to heterocycles synthesis"
Osaka Prefecture University (Pr. Masahiro Toyota)
Osaka (Japon), 28 avril 2009
- "Mixed aggregates of chiral organolithium derivatives in asymmetric synthesis"
Indian Institute of Science (Pr. Srinivasan Chandrasekaran and Pr. Goverdhan Metha)
Bangalore (India), 28 juillet 2009
- "Mixed aggregates of chiral organolithium derivatives in asymmetric synthesis"
University of Hyderabad (Pr. Deevi Basavaiah)
Hyderabad (India), 30 juillet 2009
- "Mixed aggregates of chiral organolithium derivatives in asymmetric synthesis"
Indian Institute of Chemical Technology (Pr. Srivari Chandrasehkar and Pr. J. S. Yadav)
Hyderabad (India), 30 juillet 2009

Collaboration

- Projet 2004-004 : Université de Kyoto, Japon

Projet : 2005013

Responsable de projet : **Isabelle Chataigner**

Titre : **Etude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.**

Laboratoire : **Laboratoire des Fonctions Azotées et Oxygénées Complexes – IRCOF – UMR CNRS 6014 (COBRA).**

Les travaux réalisés dans le cadre de ce projet font appel simultanément à la synthèse organique et à la chimie théorique. C'est ce dernier point qui explique la place occupée par le calcul dans cette équipe. Une grande partie des problèmes que nous étudions fait en effet appel à des réactions de cycloadditions. Nous nous intéressons en particulier à l'étude de réactions de désaromatization par cycloaddition. L'étude de chimie théorique que nous réalisons en parallèle de l'étude expérimentale permet d'élucider les mécanismes régissant ces réactions et l'apport synergique des deux parties s'avèrent très efficace pour comprendre les phénomènes mis en jeu.

Les approches combinant synthèse et théorie tendent actuellement à se répandre dans le monde académique de la chimie et la stratégie que nous utilisons repose sur le perfectionnement d'approches DFT classiques utilisant le calcul statique effectué avec les logiciels considérés comme les standards de la profession (Gaussian et Jaguar, chacun répondant parfaitement à une catégorie de problèmes spécifiques). Ce travail est dirigé, à l'IRCOF, par le Dr Isabelle Chataigner.

L'ensemble de ces activités a permis, depuis 2006, la publication d'articles dans des journaux internationaux reconnus :

- Isabelle Chataigner, Cécilia Panel, Hélène Gérard, Serge R. Piettre Chem. Commun. 2007, 3288-3290.
"Sulfonyl vs carbonyl group: which is the more electron-withdrawing?"
- Nathalie Chopin, Hélène Gérard, Isabelle Chataigner, Serge R. Piettre J. Org. Chem. 2009, 74, 1237-1244.
"Benzofurans as Efficient Dienophiles in Normal Electron Demand [4+2] Cycloadditions"

Projet : 2008002

Responsable des projets : **Georges Dupas**

Titres : **Etude des structures et des mécanismes de formation d'arylmagnésiates.**

Laboratoire : **IRCOF**

Thèses

1. Marc Brestaz, dans le cadre du projet 2008003 : Copolymérisation de cétones disubstitués avec des cétones. Titre de la thèse soutenue le 22 octobre 2009 : Synthèse et caractérisation de polyesters à base de diméthylcétène et de composés carbonyles.
Collaboration avec le L2M de l'INSA de Rouen. Le rapport final détaillé a été rédigé et sera envoyé sous peu au CRIHAN pour l'appel à projets.
2. Gérald Lemonnier : Collaboration avec le groupe du Dr. Philippe Jubault de l'UMR 6014, COBRA. Calculs d'espèces intermédiaires zinciques bromo-fluorées. La thèse a été soutenue en novembre 2008.
1 publication parue en 2009: Diethylzinc-Mediated One-Step Stereoselective Synthesis of α -Fluoroacrylates from Aldehydes and Ketones. Two Different Pathways Depending on the Carbonyl Partner. Lemonnier, G.; Zoute, L.; Dupas, G.; Quirion, J.-C.; Jubault, P. Journal of Organic Chemistry (2009), 74(11), 4124-4131
3. Sergiy Mykhaylychenko: conversion de γ -lactones en 2,2,2-trifluoroéthyl γ -lactames et pyridazinones. Collaboration avec l'EA 3233 du Pr. Jean-Philippe Bouillon.
Une publication est parue au Journal of Fluorine Chemistry : Synthesis of (2,2,2-trifluoroethyl) substituted pyridazin-3(2H)-ones versus 1,5-dihydropyrrol-2-ones from α,β -unsaturated γ -lactones and hydrazines Mykhaylychenko, Sergiy; Harakat, Dominique; Dupas, Georges; Shermolovich, Yuriy G.; Bouillon, Jean-Philippe, Journal of Fluorine Chemistry (2009), 130(4), 418-427.

Publication

1. Push-pull structures with a pyrazine core and hexatriene chain: synthesis and light-emitting properties. Hebbbar, Nordine; Ramondenc, Yvan; Plé, Gerard; Dupas, Georges; Plé, Nelly. Tetrahedron (2009), 65 (21), 4190-4200.

Projets antérieurs en cours de finalisation

Projet 2005008, dans le cadre d'une collaboration avec le LASOC dirigé par le Pr. Paul-Louis Desbène à Evreux.

1. Une publication parue dans Analytical and Bioanalytical Chemistry : Enantioseparation of underivatized amino acids by ligand exchange capillary electrophoresis in a counter-electroosmotic mode Ait Adoubel, Abderrahim; Morin, Christophe J.; Mofaddel, Nadine; Dupas, Georges; Desbene, Paul-Louis. Analytical and Bioanalytical Chemistry (2009), 394(2), 597-608.
walls, the authors used hexadimethrine bromide to reverse the electroosmotic flow. Using this original strategy, the studied enantiomers m...
2. Un second article est soumis au Journal of Computational Chemistry : Theochem: Molecular Modeling of complexes between two amino acids and Copper(II). Correlation with Ligand Exchange Capillary Electrophoresis.
Abderrahim Ait Adoubel, Christophe J Morin. . Nadine Mofaddel. Georges Dupas. Paul-Louis Desbène

Appréciation du service sur le plan technique et humain

Le service réunit des gens compétents et conviviaux qui savent bien mettre à la portée des utilisateurs des moyens de calculs sophistiqués. La réactivité du service devant les problèmes est excellente et l'information en temps réel des utilisateurs est hautement appréciée.

10. UMR CNRS 7616 - LCT (Laboratoire de Chimie Théorique)

Localisation : Paris

Site Web : <http://www.lct.jussieu.fr>

Projet : 2008011

Responsable de projet : **Jean-Philip Piquemal**

Titre : **Modélisation multiéchelle pour la chimie bioinorganique.**

Affiches

1. Congrès GDR DFT++, 02/2009, Dourdan, France.
2. Congrès Theobio 2009, 06/29/09-07/03/09, Roscoff, France.

Communications orales

1. Towards quantitative modelling of biological and complex systems using polarizable force fields
Fifth International meeting Mathematical Methods for Ab Initio Quantum Chemistry, 10/15-17/2009, Nice, France.
2. Champs de forces pour les systèmes biologiques
Atelier méthodes théoriques pour les systèmes moléculaires complexes, GDR 2758 : « Agrégation, fragmentation et thermodynamique de systèmes moléculaires complexes isolés », 11/26-27/2009, Paris, France.
3. Understanding many-body effects in complex systems: from QM interpretative techniques to new generation polarizable force fields.
ICCMSE 2009, Seventh International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering, 09/29/09-10/04/09, Rhodes, Greece.
4. "New generation force fields"
Workshop: From clusters to the condensed phase: progress in polarizable force fields and simulation, National Meeting of the American Chemical Society, March 22-26 2009, Salt Lake City, USA.

Publications

1. Progress towards accurate molecular modeling of metal complexes using polarizable force fields.
R. Chaudret, S. Ulmer, M-C van Severen, N. Gresh, O. Parisel, G. A. Cisneros, T. A. Darden, J-P Piquemal,
Proceedings of the International Conference on Theory and Application of Computational Chemistry (TACC 2008), AIP Conf. Proc., 2009, 1102, 185. DOI:10.1063/1.3108373
2. Design of next generation polarizable force fields from ab initio computations: beyond point charges.
G. A. Cisneros, T. A. Darden, N. Gresh, P. Reinhardt, O. Parisel, J. Pilmé, J-P Piquemal
Multi-scale Quantum Models for Biocatalysis: Modern Techniques and Applications, for the Book Series: Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics, ed. D. M. York and T.-S. Lee, 2009, 137-172, Springer Verlag. Invited Book Chapter, DOI:10.1007/978-1-4020-9956-4_6
3. Importance of lone pair interactions/redistribution in hard and soft ligands within the active site of alcohol dehydrogenase Zn metalloenzyme: Insights from Electron Localization Function.
B. de Courcy, N. Gresh, J-P Piquemal,
Interdiscip. Sci. Comput. Life Sci., 2009, 1, 55 DOI: 10.1007/s12539-008-0027-0
4. Beyond holo/hemidirectionality in Pb(II) complexes: can the valence lone pair be bisdirected?
M-C. van Severen, J-P. Piquemal et O. Parisel,
Chem. Phys. Lett., 2009, 478, 17 DOI: 10.1016/j.cplett.2009.07.036

Collaborations principales

1. Wayne State University (Detroit, USA)
2. NIEHS (Research Triangle Park, NC, USA)
3. NIH (Bethesda, MA, USA)
4. Univ. Calgary (Canada)
5. Univ. Texas at Austin (USA)
6. CEA Saclay
7. IRSAMC (Toulouse)
8. Université d'Orsay
9. Université de Rouen

Thèses

1. soutenue: Marie Céline van Severen, thèse soutenue le 30/09/2009
2. en cours: Robin Chaudret (UPMC); Aude Marjolin (UPMC/CEA)

Master

1. master II (Aude Marjolin, juin 2009)

11. EA3226 - LMI (Laboratoire de Mathématiques de l'INSA de Rouen)

Localisation : Rouen

Site Web : <http://lmi.insa-rouen.fr/>

Projet : 1998007

Responsable de projet : **Jean-Guy Caputo**

Titre : **Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique.**

Livre

1. [[cp09]] "Biomaths", Special Issue of ECMI Newsletter, édité par J. G. Caputo et C. Prudhomme, (2009).
<http://www.mafy.lut.fi/EcmiNL/issues.php>

Publications

1. [[ckm09]] "Fast electromagnetic response of a thin film of resonant atoms with permanent dipole" J.-G.Caputo, E. V.Kazantseva and A.I.Maimistov
J. Phys. A , in press (2009).
<http://arxiv.org/abs/0906.3473>
2. [[gbcc09]] "Analytical solutions of jam pattern formation on a ring for a class of optimal velocity traffic models ", Yu. B. Gaididei, R. Berkemer, J. G. Caputo, P. L. Christiansen, A. Kawamoto, T. Shiga, M. P. Sørensen, and J. Starke,
New J. Phys. 11 (2009) 073012.
3. [[cklm08]] "Cavity with an embedded polarized film: an adapted spectral approach", J.-G.Caputo, E. V.Kazantseva, L. Loukitch and A.I.Maimistov
J. Phys. A 42, 165204, (2009).
<http://arxiv.org/abs/0807.1287>

Publications de Conférences invitées

1. "Fast electromagnetic response of a thin film of resonant atoms with permanent dipole" J.-G.Caputo, E. V.Kazantseva and A.I.Maimistov
présentation invitée lors de la Conférence "International Conference on Numerical analysis and applied Mathematics 2009",
Minisymposium: Nonlinear waves and Singularities in Optics, Hydrodynamics and Plasmas, tenue à Rethymnon, Grèce du 18 au 22 Septembre 2009.

Conférences

1. Présentation journée "Biomaths" en mémoire de Loic Forest, INSA de Rouen
2. Deux présentations aux journées Supra 2009, Saint Raphael

Organisation de séminaires et conférences

1. Co-organisateur avec P. Febvre et M. Salez de la journée "Futurs dispositifs supraconducteurs terahertz", Saint Raphael, Mai 2009
<http://sefira.univ-savoie.fr>

Principales collaborations internationales

1. A. Maimistov, Engineering Physics Moscow, 2 fois professeur invité à l'INSA de Rouen
2. Y. Gaididei, Inst. Bogoliubov de Physique théorique, Kiev, Ukraine
3. M. P. Soerensen, Dept de Mathématiques, Université Technique du Danemark
Bourse de l'ambassade de France en 2002 et 2003
4. I. Gabitov, Dept of Mathematic, University of Arizona, USA
5. E. Simo, Dept de physique, Université de Yaounde, Cameroun
6. N. Efremides, Dept of applied mathematics, University of Crete, Heraklion, Grece
7. V. Konotop, Dept of Physics, University of Lisbon, Portugal

12. UMR CNRS 8107 - LML (Laboratoire de Mécanique de Lille)

Localisation : Lille

Site Web : <http://lmlm6-62.univ-lille1.fr/lml/>**Projet : 2007008**Responsable de projet : **Gilmar Mompean**Source des informations : **Laurent Thais**Titre : **Simulations d'écoulements viscoélastiques turbulents par DNS et LES.****Article**

1. Thais, L., Tejada-Martínez A.E., Gatski, T.B. Mompean G.
Large eddy numerical simulations of FENE-P drag reduction flows. Phys. of Fluids (sous presse)

Communications

1. Thais, L., Tejada-Martínez, A. E., Gatski, T. B., Mompean, G.
Numerical simulations of turbulent viscoelastic drag reduction.
Second International Conference on Turbulence and Interaction, Sainte-Luce, Martinique, Juin 2009.
2. Thais, L., Tejada-Martínez, A. E., Gatski, T. B., Mompean, G., Naji, H.
Direct and large eddy numerical simulations of turbulent viscoelastic drag reduction.
Wallturb Workshop, Université Lille I-Sciences et Technologies,
Villeneuve d'Ascq, Avril 2009.

13. FRE-CNRS 3102 - LOMC (Laboratoire Ondes et Milieux Complexes)

Localisation : Le Havre

Site Web : <http://www.univ-lehavre.fr/recherche/lomc/index.php>**Projet : 2003013**Responsable de projet : **Grégory Pinon**Titre : **Développements et applications des méthodes particulières**

Publications

1. 2009 G. Pinon, J.-M. Cherfils, X. Bouteiller, M. Bendaoud, L. Blin, E. Rivoalen Thrust reverser's jet trajectories prediction for a civil aircraft in landing phase En révision pour Aerospace Science and Technology
2. 2008 S. Huberson, E. Rivoalen and S. Voutsinas Vortex Particle Methods in Aeracoustic Calculations Volume 227, Issue 21, 10 November 2008, Pages 9216-9240 J. Comp. Physics

Valorisation et transfert

1. 2009 G. Pinon, J.-M. Cherfils, E. Rivoalen et S. Huberson, Dépôt de licence APP en cours du logiciel « 3D_particulaire ».

Collaborations industrielles

1. Depuis 1999 : Collaboration avec Aircelle (Entreprise du groupe SAFRAN de la région havraise) autour des application aéronautique du code 3D particulaire.
2. Depuis 2007 : Collaboration avec l'IFREMER (Brest et Boulogne sur Mer) autour des applications hydroliennes dans le cadre du projet autour de la thèse de F. Maganga.

Conférences

1. 2009, Experimental study to determine flow characteristic effects on marine current turbine behaviour, F. Maganga, G. Germain, J. King, G. Pinon, E. Rivoalen, 8th European Wave and Tidal, Energy Conference 7-10 September 2009, Uppsala Sweden
2. 2009, J.-M. Cherfils, L. Blonce, G. Pinon, E. Rivoalen, Towards the simulation of wave-body interactions with SPH – 4ème Workshop SPHERIC – Nantes, France, 27-29 mai 2009
3. 2009 J.-M. Cherfils, L. Blonce, E. Rivoalen, Modélisation de l'interaction houle – plaque horizontale immergée par la méthode SPH – 19ème Congrès Français de Mécanique (CFM) – Marseille, France, 24 – 28 août 2009
4. 2009, Croquet, J.-M. Cherfils, G. Pinon, Simulation parallèle d'écoulements instationnaires par la méthode SPH – 19ème Congrès Français de Mécanique (CFM) – Marseille, France, 24 – 28 août 2009
5. 2008 J.-M. Cherfils, L. Blonce, G. Pinon and E. Rivoalen, Simulation numérique des interactions houle-ouvrages marins. XXIVème Rencontres universitaires de Génies Civil, Nancy

Thèses

1. Débutée en 2007, Pierre Arnaud Duclos, « Impacts morpho-sédimentaires de l'extraction de granulats sur les fonds marins » Bourse CIFRE, co-direction avec Robert Lafite du laboratoire M2C Rouen.
2. Débutée en 2007, Fabrice Maganga, « Etude du comportement hydrodynamique de systèmes de récupération d'énergie des courants / Etude de l'impact sur l'environnement connexe » Thèse co-financée Région Haute Normandie / IFREMER,
3. Débutée en 2006, Jean Marc Cherfils, « Modélisation numérique des écoulements grand échelle par la méthode SPH » Financement MESR

Projet : 2006015Responsable de projet : **Anthony Beaudoin**Titre : **Modélisation physique et numérique du colmatage dans les sols.****Thèse**

1. Doctorante : Hui Wang
Sujet de thèse : Modélisation physique et numérique des transferts de masse en milieux poreux
Date de commencement de thèse : Octobre 2008.

Directeur de thèse : Hua Qing Wang, professeur des Universités
Co-encadrant : Abdellah Alem, maître de Conférences

Master

1. Ibrahim Zangré, Etude de la convergence de l'approche Monte Carlo utilisée dans le logiciel PARADIS (PARAllél DISpersion), Master 1, ENSMN – Département du Génie Industriel – Ingénierie Mathématique, stage ingénieur 2009.

Publications

1. J.R. De Dreuzy, A. Beaudoin, J. Erhel, Reply to Comment on Asymptotic Dispersion in 2D Heterogeneous Porous Media Determined by Parallel Numerical Simulations by A. Fiori, G. Dagan and I. Jankovic. *Water Resources Research*. Volume: 44, 2008, W06604, doi:10.1029/2008WR007010.
2. J. Erhel, J.R. de Dreuzy, A. Beaudoin, E. Bresciani, D. Tromeur-Dervout, H.T. Ismail, Ulgen Gulcat; David R. Emerson & Kenichi Matsuno, (ed.) A parallel scientific software for heterogeneous hydrogeology *Parallel Computational Fluid Dynamics 2007, Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, 2009, 39-48.

Logiciels

1. PARADIS (J. Erhel, A. Beaudoin et J.R. De Dreuzy)
2. GW_NUM (A. Beaudoin, E. Bresciani, J. Erhel et J.R. De Dreuzy)

Conférence invité

1. A. Beaudoin, S. Oukfif, H.Q. Wang, A. Benamar, S. Huberson, E. Rivoalen, J.R. De Dreuzy et J. Erhel, Simulation des transferts de masse dans des milieux poreux par une approche lagrangienne, CFM 2009, Marseille, 24 au 28 Août 2009.

Congrès Internationaux

1. J. Erhel, A. Beaudoin, J. Charrier, A. Debussche, J.R. De Dreuzy, Stochastic groundwater simulations for highly heterogeneous porous media, MAMERN'09, Pau, June 2009.
2. A. Beaudoin, Solute transport simulated by a parallel particle tracker, CSC09, The 2009 International Conference on Scientific Computing, Las Vegas, Nevada, USA, July 2009.
3. A. Beaudoin, S. Huberson and E. Rivoalen, Particle Simulation of Unsaturated Flows ... in Porous Media, Scaling Up and Modeling for Transport and Flow in Porous Media, Dubrovnik, October 2008.

Congrès Nationaux

1. A. Beaudoin, Impact de la dispersion locale sur la macro dispersion, 19ème congrès français de mécanique, Marseille, Août 2009.
2. A. Beaudoin, S. Huberson et E. Rivoalen, Simulation particulière de l'écoulement de l'eau dans un sol partiellement saturé, 19ème congrès français de mécanique, Marseille, Août 2009.
3. S. Oukfif, A. Beaudoin, A. Benamar and H.Q. Wang, Modélisation de la filtration par une approche lagrangienne, 19ème congrès français de mécanique, Marseille, Août 2009.
4. A. Beaudoin, Impact de la dispersion locale sur la macro dispersion, Propagation ultrasonore et milieux complexes, Le Havre, 14 – 15 Mai, 2009.
5. S. Oukfif, A. Beaudoin, A. Benamar and H.Q. Wang, Modélisation de la filtration dans les sols par une approche lagrangienne, XXVI èmes Rencontres Universitaires de Génie Civil, Nancy, 4 au 6 juin 2008.
6. A. Beaudoin, J.R. De Dreuzy et J. Erhel, Dispersion dans des milieux hétérogènes, XXVI èmes Rencontres Universitaires de Génie Civil, Nancy, 4 au 6 juin 2008.

Séminaires

1. A. Beaudoin, J.R. de Dreuzy and J. Erhel, Influence of local hydrodynamic dispersion on 2D Macro dispersion, Géosciences de Rennes, 5 Mai 2009.

2. S. Oukfif, A. Beaudoin, H. Wang et A. Benamar, Modélisation de la filtration dans les sols par une approche lagrangienne, Projets ERINOH, Aix-Les-Bains, Juillet 2008.
3. A. Beaudoin, Réunion de lancement du projet MICAS, Challenge scientifique n°1 Macro dispersion dans des milieux poreux hétérogènes 3D, Rennes, Janvier 2008.

Posters

1. A. Beaudoin, J.R de Dreuzy and J. Erhel, Stochastic simulation of mass transport in saturated heterogeneous porous media, TERATEC09, Juin 2009.
2. J.R. De Dreuzy, A. Beaudoin and J. Erhel, Asymptotic dispersion in 2D heterogeneous porous media, Geophysical Research Abstracts, Vol. 10, EGU2008-A-00000, 2008.

14. EA3828 - LMR (Laboratoire de Mécanique de Rouen)

Localisation : Rouen

Site Web : <http://www.insa-rouen.fr/recherche/laboratoires/plonearticle.2005-04-08.5905807685/>

Remarque : certains chercheurs du laboratoire utilisent également le cluster de calcul Linux HPXO.

Projet : 2003006

Responsable de projet : **Fabrice Barbe**

Titre : **Approche par éléments finis de la transformation de phase solide-solide.**

Article de revue

1. Quey, R., Barbe, F., Hoang, H., Taleb, L., "Effect of the random spatial distribution of nuclei on the transformation plasticity in diffusively transforming steel". International Journal of Microstructure and Materials Properties (accepté pour publication).

Communications

1. Barbe, F., Quey, R., Musienko, A., "Morphological characterization of stress and strain localization in 3D high resolution elastoplastic polycrystals". Proceedings of the 7th EUROMECH Solid Mechanics Conference, J. Ambrosio and M.T. Silva (Eds), pp. 261-262, Lisbon, Portugal, September 7th-11th, 2009.
2. Tahimi, A., Taleb, L., Barbe, F., "Plasticité induite par transformation de phase martensitique, investigations expérimentales sur l'acier 35NCD16 et modélisation numérique micromécanique basée sur le principe d'homogénéisation". Congrès Algérien de Mécanique CAM2009, Biskra, 16-19 Novembre 2009.
3. Tahimi, A., Taleb, L., Barbe, F., "Plasticité induite par transformation de phase martensitique, dans l'acier 35NCD16 ". CFM '09, Marseille, France, août 2009.
4. L. Blondeau and F. Barbe, "Localisation des contraintes et des déformations dans un polycristal élastoplastique 3D simulé par éléments finis". Congrès Algérien de Mécanique CAM2009, Biskra, 16-19 Novembre 2009.

15. UMR CNRS 8522, FR CNRS 2416 - PC2A (Laboratoire de PhysicoChimie des Processus de Combustion et l'Atmosphère)

Localisation : Lille

Site Web : <http://www.univ-lille1.fr/umr8522>

Projet : 2007001

Responsable de projet : **Florent Louis**

Titre : **Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clefs impliquées dans la formation des polluants automobiles.**

Publication

1. A CASPT2 Theoretical Study of the Kinetics of the 2-, 3-, and 4-Methylbenzylperoxy Radicals Isomerization
Journal of Physical Chemistry A, 113, 2995-3003, 2009
CANNEAUX S., LOUIS F., RIBAUCCOUR M., EL BAKALI A., PAUWELS J.F.

Communication orale

1. Application of Computational Chemistry to Combustion Processes : Generation of Reliable Thermokinetic Data for the Aromatics Oxidation Mechanisms
237th American Chemical Society National Meeting, Salt Lake City, Utah (USA), March 22-26, 2009
LOUIS F., CANNEAUX S., RIBAUCCOUR M., EL BAKALI A., PAUWELS J.F.

Affiche

1. A Thermokinetic Theoretical Study of the Isomerization Processes in Toluene and o-Xylene Oxidation
4th European Combustion Meeting, Vienne (Autriche), April 14-17, 2009
CANNEAUX S., LOUIS F., RIBAUCCOUR M., EL BAKALI A., PAUWELS J.F.

16. U648 INSERM - PMC (Laboratoire de Pharmacochimie Moléculaire et Cellulaire)

Localisation : Paris

Site Web : http://www.biomedicale.univ-paris5.fr/ifr95/C107_u648.htm

Remarque : certains chercheurs du laboratoire utilisent également le cluster de calcul Linux HPXO.

Projet : 1998053

Responsable de projet : **Nohad Gresh**

Titre : **Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable.**

Publications

1. Energy analysis of Zn polycordination in a metalloprotein environment and of the role of a neighboring aromatic residue. What is the impact of polarization? B.de Courcy, J.-P. Piquemal, N. Gresh. J. Chem. Theory and Comput. 4, 1659-1668 (2008).
2. Design of next generation force fields from ab initio computations: beyond point charge electrostatics. G. A. Cisneros, T. A. Darden, N. Gresh, J. Pilmé, P. Reinhardt, O. Parisel, J.-P. Piquemal. Chapitre de livre invité, "Multi-scale quantum models for biocatalysis: modern techniques and applications", Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics, D. M. York et T.-S. Lee, 2009, éditeurs, Springer Verlag, 137-172.
3. An electron localization function analysis of the binding site of alcohol dehydrogenase Zn-metalloenzyme. Importance of lone pair interactions/redistribution. B. de Courcy, N. Gresh, J.-P. Piquemal, Interdisciplinary Sciences: Computational life sciences, 1, 55-60 (2009).
4. Progress towards accurate molecular modeling of metal complexes using polarizable force fields. R. Chaudret, S. Ulmer, M.-C. van Severen, N. Gresh, O. Parisel, O., G.-A. Cisneros, T. A. Darden, J.-P. Piquemal. Theory and applications of computational chemistry. American Institute of Physics Conference Proceedings, 1102, 185-192 (2009).
5. Synthesis and evaluation of non-hydrolyzable d-mannose 6-phosphate surrogates reveal 6-deoxy-6-dicarboxymethyl-d-mannose as a new strong inhibitor of phosphomannose isomerases. J. Foret, B. de Courcy, N. Gresh, J.-P. Piquemal, L. Salmon. Bioorg. Med. Chem 17, 7100-7107 (2009).
6. Polarizable water molecules in ligand-macromolecule recognition. I. Impact on the relative affinities of competing pyrrolopyrimidine inhibitors for FAK kinase. B. de Courcy, J.-P. Piquemal, C. Garbay, N. Gresh. J. Am. Chem. Soc. (soumis; révisions en cours).

7. Analysis of the interactions taking place in the recognition site of a bimetallic Mg(II)-Zn(II) enzyme, isopentenyl diphosphate isomerase. A parallel quantum-chemical and polarizable molecular mechanics study. N. Gresh, N. Audiffren, J.-P. Piquemal, J. de Ruyck, M. Ledecq, J. Wouters. J. Phys. Chem. B (soumis; révisions en cours).

Congrès internationaux

1. Theobio 09 à Roscoff
2. MIB ('Modelling Interactions in Biomolecules' IV) en République Tchèque.

Collaborations

1. collaboration avec le laboratoire de Chimie Théorique de l'Université Pierre et Marie Curie,
2. collaboration avec l'Institut Curie de Paris;
3. collaboration avec le Laboratoire de Chimie Bioorganique et Bioinorganique de l'Université Paris-Sud.

Appréciation du service

Je suis redevable au CRIHAN des moyens de calcul mis à disposition, et de la grande disponibilité de ses Ingénieurs.

17. UMR CNRS 6011 - UCO2M (Unité de Chimie Organique Moléculaire et Macromoléculaire)

Localisation : Le Mans

Site Web : <http://sciences.univ-lemans.fr/uco2m/index.htm>

Projet : 2002005

Responsable de projet : **Pascal Gosselin**

Titre : **Modélisation des états de transition de réactions de diels-alder asymétriques**

Collaborations

Université du Maine :

1. Prof. Laurent Fontaine
2. Dr Gilles Dujardin (DR CNRS)
3. Dr Charles Cougnon (CR CNRS)
4. Dr Sagrario Pascual (MCF)
5. Dr Stéphanie Legoupy (CR CNRS)

Université de Nantes :

6. Prof. Jacques Lebreton

Thèse

1. Melle Jane Totobenazara

Master

1. M. Thibault Maunoury

Projet : 2008007

Responsable de projet : **Arnaud Martel**

Titre : **Etude de la catalyse de réactions de Diels-Alder par les sels d'étain (IV).**

Publication

1. Maingot, L.; Leconte, S.; Chataigner, I.; Martel, A.; Dujardin, G. Organic Letters 2009, 11, 1619–1622.

Collaboration

1. Une collaboration a été initié avec l'Université du Havre. Equipe Adam Daich et Sébastien Comesse.

18. UMR CNRS 8576 - UGSF (Glycobiologie Structurale et Fonctionnelle)

Localisation : Lille

Site Web : <http://ugsf-umr-glycobiologie.univ-lille1.fr/>**Projet : 2007010**Responsable de projet : **Philippe Lagant**Titre : **Etudes structurales de Polysaccharides anioniques formant des hydrogels : chondroïtine-sulfate.****Publication**

1. "Phenylalanine 35 and Tyrosine 82 are involved in the uptake and release of ligand by porcine odorant-binding protein"
P. Nagnan-Le-Meillour, P. Lagant, J.P. Cornard, F. Brimau, C. Le Danvic, G. Vergoten, J.C. Michalski
Biochimica Biophysica Acta 1794 (2009) 1142-1150

B. Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire

1. FRE CNRS 3101 - BRICS (Biofilms Résistances Interactions Cellules Surfaces)

Localisation : Rouen

Source des informations : Thierry Jouenne

Site Web : <http://plateforme-proteomique.crihan.fr>

La Plate-forme de Protéomique (<http://plateforme-proteomique.crihan.fr>) a été labellisée par le GIS IBISA en 2008. Elle est maintenant dotée des équipements lourds, systèmes d'analyse, robots exciseurs, spectromètres de masses ESI et MALDI et couplages LC-MS... La plate-forme de protéomique offre un ensemble très complet et performant d'approches analytiques permettant d'identifier, visualiser et quantifier des populations protéiques dans le cadre de problématiques scientifiques majeures dans les domaines de la microbiologie, des neurosciences, de la physiologie/biologie humaine et des biotechnologies végétales. Un "Programme Pluri Formation" nouvellement labellisé dans le cadre du CQD 2008-2011 et animé par le Dr Pascal Cosette sur le thème " Nouveaux outils pour un protéome ciblé", contribuera à l'animation de cette plate-forme.

La plate-forme est directement impliquée dans 4 programmes ANR (programmes ENAPACAP GLYCO-CHLOROPLAST, SURFANBAC et BACCIO) et dans des programmes internationaux : programme ERA-NET Pathogenomics « EPS-MATRIX », Programme de Coopération CNRS-DGRSRT Tempus (Tunisie). Deux programmes Interreg 3A ont été, ou sont actuellement menés en collaboration avec l'Université de Brighton (GB) : programmes AMACOM et APROBIO. Des partenariats privilégiés sont entretenus avec des entreprises locales, notamment avec la Société « Proteomic Solutions » localisée à St Marcel (27). Un gros projet « Recherche de biomarqueurs par approches protéomiques » vient d'être engagé par l'Institut Fédératif de recherche Multidisciplinaire sur les Peptides (IFRMP23), dans le cadre des grands réseaux de recherche

Les développements technologiques sont aussi au cœur de l'activité de la Plate-forme. Parmi ces développements on citera :

1. L'élaboration de nanoparticules biofonctionnelles pour l'étude des interactions Protéine-Ligand. Cet outil est basé sur l'élaboration de nanoparticules magnétiques de Fe₂O₃ fonctionnalisées par une protéine par un processus d'autoassemblage et capable d'identifier ainsi une panoplie de ligands. Le caractère magnétique de ces particules permet une séparation par simple aimantation. Cette technique une fois développée peut ensuite être directement couplée avec notre plateforme protéomique pour la détection et l'identification directes « in situ » par spectrométrie de masse de la protéine et des différents ligands « partenaires » présents.
2. Développement d'un LIMS (Laboratory Information Management Systems). Face à la quantité de résultats générés (images, analyses, protocoles ...), nous avons réalisé un système de gestion informatisée permettant la traçabilité des échantillons tout au long de leur analyse. Ce système est basé sur une architecture SQL-PHP, donne la possibilité aux utilisateurs de gérer leurs projets, échantillons, gel-2D et identifications via une interface WEB dans laquelle il est très simple de naviguer. Cette solution, PrIMS, propose par exemple un module d'édition de gel permettant de sélectionner directement en ligne les spots d'intérêts par un simple clic sur une image interactive. Notre système crée également le paramétrage des fichiers de configuration des différents instruments dédiés à notre plate-forme d'analyse comme par exemple le robot réalisant les digestions tryptiques ou encore le spectromètre MALDI-TOF. De plus, afin de faire face à un flux important de résultats de spectrométrie de masse par la méthode de l'empreinte peptidique, PrIMS intègre directement dans l'application un système d'identification automatisé, basé sur le programme open-source EMOWSE. Enfin, nous allons très prochainement proposer de mettre à la disposition de la communauté scientifique nos cartes protéomiques, sous forme de pages WEB interactives faisant le lien direct entre le spot et la protéine identifiée, interface qui sera accessible depuis PrIMS. Ce logiciel a été déposé à l'Agence de Protection des Programmes (Serres et col., 2007), et est en cours d'installation et développement sur le plateau protéomique de Strasbourg dans le cadre un contrat de co-développement technologique

Publications

1. Souiri M., Mora-Ponsonnet, L., Glinel, K., Othmane, A., Jouenne T. and A. Duncan. Surface assembly on biofunctional magnetic nanobeads for the study of protein-ligand interactions. *Colloids Surf. B : Biointerf B*, 2009, 68:125-129.
2. Glinel, K., , A. M. Jonas, T. Jouenne, J. Leprince, L. Galas and W. T. S. Huck Antibacterial and Antifouling Polymer Brushes Incorporating Antimicrobial Peptide. *Bionconj. Chem.*, 2009, 20: 71-77.
3. Goeb V, Thomas M, Daveau R, Charlionet R, Fardellone P, Tron F, Le Loët X, Gilbert D and O. Vittecoq. The autoimmune response in very early RA is mainly directed against citrullinated and native forms of molecular chaperonins and proteins of the glycolytic enzyme family. *Arthritis Research and Therapy* (sous presse)
4. Bénard, L., Litzler, P.-Y., Cosette, P., Lemeland, J.F., Jouenne, T. and G.A. Junter. .Proteomic analysis of staphylococcus aureus biofilms grown in vitro on mechanical heart valve leaflets. *J. Biomed. Mat. Res.*, 2009, 88A: 1069-1078
5. Conlon, M. , Y. H.A. Abdel-Wahab,, P.R. Flatt, J. Leprince, H. Vaudry, T. Jouenne and E. Condamine. A glycine-leucine-rich peptide structurally related to the plasticins from the skin of the frog *Leptodactylus laticeps* (Leptodactylidae) , *Peptides*, 2009, 30: 888-892.
6. Conlon, J.M., Coquet, L., Jouenne, T., Leprince, J., Vaudry, H., and J.D. King . Peptides with potent cytolytic activity from the skin secretions of the North American leopard frogs, *Lithobates blairi* and *Lithobates yavapaiensis*. *Toxicon*, 2009, 53: 699-705.
7. Desclos, P. Etienne, L. Coquet, T. Jouenne, T. J. Bonnefoy, R. Segura, S. Reze, A. Ourry et J.C. Avice. A combined ^{15}N tracing / proteomics study in *Brassica napus*/ reveals the chronology of proteomics events associated with N remobilisation during leaf senescence induced by nitrate limitation or starvation. *Proteomics*, 2009, 9: 3580-3608 (couverture du numéro)
8. Conlon, J.M., Raza, H., Coquet L., Jouenne, T., Leprince, J., Vaudry, H. and J. King. Purification of peptides with differential cytolytic activities from the skin secretions of the Central American frog, *Lithobates vaillanti* (Ranidae) *Comparative Biochemistry and Physiology*, part C, 209, 150: 150-154..
9. Borghol, N., Ponsonnet, L., Jouenne, T., Jaffézic-Renault, N., Sakly, N., Duncan, A.C. Chevalier, Y., Lejeune, P. and A. Othmane. Monitoring of *E. Coli* immobilization on modified gold electrode: a new bacterial based glucose sensor. *Biotechnol Bioprocess. Eng.*,
10. Rosenberg, M., Coquet, L., El-Many, A., Staples, M., Jouenne T. and Savage D. Moderate drinking during pregnancy alters placental protein expression. *Alcohol. Clin. Exp. Res.*, 2009, 33 (S1) : 131-132 (IF : 3,16)
11. Conlon, M., Meetani, M., Coquet, L., Jouenne, T., Leprince, J., Vaudry, H., Kolodziejek, J. Nowotny, N. and J.D. King. Antimicrobial peptides from the skin secretions of the New World frogs *Lithobates capito* and *Lithobates warszewitschii* (Ranidae), *Peptides*, 2009, 30: 1775-1781
12. Souiri, M., Gammoudi, I., Ben Ouada, H.B., Mora, L., Jouenne, T., Jaffrezic-Renault, N., Dejous, C. , Othmane A. and A; Duncan. *Escherichia coli*-functionalized magnetic nanobeads as an ultrasensitive biosensor for heavy metals. *Proced. Chem.*. 2009, 1: 1027-1030.
13. Le Dréau G., Nicot A., Bénard M., Thibout H., Vaudry D., Martinerie C. & Laurent M. NOV/CCN3 promotes maturation of cerebellar granule neuron precursors. *Mol Cell Neurosci.* 2009, sous presse, PMID: 19286457.
14. Conlon, J.M., Coquet, L., Jouenne, T., Leprince, J., Vaudry, H. and S. Iwamuro. Evidence from the primary structures of dermal antimicrobial peptides that *Rana tagoi okiensis* and *Rana tagoi tagoi* (Ranidae) are not conspecific subspecies. *Toxicon*, sous presse
15. Jolivel V., Basille M., Aubert N., de Jouffrey S., Ancian P., Le Bigot J.F., Noack P., Massonneau M., Fournier A., Vaudry H., Gonzalez B.J. & Vaudry D. Distribution and functional characterization of pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide receptors in the brain of non-human primates. *Neuroscience.* 2009, sous presse. PMID: 19236905.
16. Dé, E., Cosette, P., Coquet, L. Siroy, A., Alexandre, S., Duncan, A, Naudin, B., Rihouey, C., Schaumann, A., Junter, G.A. and T. Jouenne. Membrane proteomes of *Pseudomonas aeruginosa* and *Acinetobacter baumannii*. *Path. Biol.*, 2009, sous presse.

17. Al-Ghaferi, N., J Kolodziejek J., Nowotny N., Coquet, L. Jouenne, T., Leprine, J., t Vaudry, H., King, J.D. and J.M. Conlon. Antimicrobial peptides from the skin secretions of the South-East Asian frog *Hylarana erythraea* (Ranidae). Peptides, sous presse

Thèse

1. CAMILLE MACE : Identification de nouvelles cibles moléculaires contre les biofilms à *P. aeruginosa*. Thèse de l'Université de Rouen en biologie cellulaire, spécialité microbiologie, 18 Décembre 2008

Communications orales dans des congrès internationaux

1. GLINEL, K., JOUENNE, T., PUROHIT, V., JONAS, AM., LEPRINCE, J and T.S. HUCK. New Biocidal Coatings Incorporating Antimicrobial Peptides. 237th Annual American Chemical Society Spring 2009 Meeting. Salt Lake City, 22-26 march 2009.
2. DAKHLAOUI-DKHIL, S, ELKAHOUI, S., RHOUMA, S., LIMAM, F., TRIFI, M. et T. JOUENNE. Analyse protéomique de la maladie des feuilles cassantes (MFC) par spectrométrie de masse. Cas du cultivar Deglet nour. , Vème Congrès International de Biotechnologie de l'Association maghrébine de Biotechnologie. Hammamet Yasmine, Tunisie, 22-25 mars 2009.
3. GLINEL., G., Jouenne, T., Purohit, V., Jonas, A.M., , Leprince, J., and W. T. S. Huck. New Biocidal Coatings Incorporating Antimicrobial Peptides. 2nd International Symposium on Antimicrobial Peptides. Saint-Malo, France, 17-19 Juin 2009
4. YALA, J.F., HEQUET, A., THEBAULT, P., HUMBLLOT, V., PRADIER, C.M., GLINEL, K., T. JOUENNE and J.M. BERJEAUD. Development of antibiofilm surfaces using antimicrobial peptides. Eurobiofilms 2009 Congress, Rome, Italie, 2-5 Septembre 2009.
5. MARTI, S., CATEL-FERREIRA, M., RIHOUEY, C., ALEXANDRE, S., RODRIGUEZ-BAÑO, J. VILA, T. JOUENNE and E. DE. Structural analysis and characterization of the pellicle formed by *Acinetobacter baumannii* ; implication of this structure in nosocomial infections. Eurobiofilms 2009 Congress, Rome, Italie, 2-5 Septembre 2009.
6. CATEL-FERREIRA, M., MOLLE, V., SIROY, A., PESTEL-CARON, M., JOUENNE, T. and E. DE. Functional analyses of the carbapenem resistance Associated outer membrane protein carO from *Acinetobacter baumannii*. 49th Interscience Conference on Antimicrobial Agents and Chemotherapy (ICAAC), San Francisco, USA, 12-15 Septembre 2009.

Affiches dans des Congrès internationaux

1. ROSENBERG, M., COQUET, L., EL EMAWY, A., STAPLES, M., JOUENNE T. and D.D. SAVAGE. Moderate drinking during pregnancy alters placental protein expression. 32nd Annual Scientific Meeting of the Research Society on Alcoholism (RSA), San Diego, CA, USA, 20-25 Juin 2009.
2. YALA, J.F., HEQUET, A., FRERE, J., IMBERT, C., THEBAULT, P., HUMBLLOT, V., PRADIER, C.M., GLINEL, K., JOUENNE, T. and J.M. BERJEAUD. Development of antimicrobial surfaces. 2nd International Symposium on Antimicrobial Peptides. Saint-Malo, France, 17-19 Juin 2009
3. SOUIRI, M., GAMMOUDI, I., BEN OUADA, H.B., MORA, L., JOUENNE, T., JAFFREZIC-RENAULT, N., DEJOURS, C. , OTHMANE, A. and A; DUNCAN. *Escherichia coli*-functionalized magnetic nanobeads as an ultrasensitive biosensor for heavy metals. Eurosensors 09, Lausanne, Suisse, 6-9 Septembre 2009
4. YALA, J.F., HEQUET, A., FRERE, J., IMBERT, C., THEBAULT, P., HUMBLLOT, V., PRADIER, C.M., GLINEL, K., JOUENNE, T. and J.M. Berjeaud. Development of antimicrobial surfaces. Eurobiofilms 2009 Congress, Rome, Italie, 2-5 Septembre 2009.
5. GLINEL, K., HUMBLLOT, V., GUYOMARD, A., THEBAULT, P., PUROHIT, V., YALA, J.F., BLIN, T., HEQUET, A., BERJEAUD, J.M., PRADIER, C. and T. JOUENNE. Organic nanocoatings based on antimicrobial peptides to prevent biofilm formation. Eurobiofilms 2009 Congress, Rome, Italie, 2-5 Septembre 2009.
6. MACE, C., SEYER, D., CHEMANI, C., COSETTE, P., DI-MARTINO, P., GUERY, B., FILLOUX, A., FONTAINE, M., MOLLE, V., JUNTER, G.A. and T. JOUENNE. Identifiication of biofilm-associated cluster (bac) in *Pseudomonas aeruginosa* involved in biofilm formation and virulence. Eurobiofilms 2009 Congress, Rome, Italie, 2-5 Septembre 2009

Communications orales dans Congrès nationaux

1. CATEL-FERREIRA, M., MOLLE, V., SIROY, A., PESTEL-CARON, M., JOUENNE T. Et E. DE. Etudes fonctionnelles d'une protéine membranaire carO impliquée dans la résistance aux carbapénèmes chez A. baumannii. 15ème Journée de IIFRMP23, Mont-Saint-Aignan, 5 Juin 2009.
2. BLIN, T., JOUENNE, T et K. GLINEL. Nano-revêtements macromoléculaires antibactériens 30èmes journées du Groupe Français des Polymères, Section Ouest - Caen ,11-12 juin 2009

Affiches dans Congrès nationaux

1. Blin, T., Purohit, V., Jouenne T. and K. GlineL. IAntimicrobial Macromolecular Nanocoatings. Journées Nord-Ouest Européennes des Jeunes Chercheurs, Société Française de Chimie, Mont-Saint-Aignan, 18-20 mai 2009.
2. MARTI, S., NAIT CHABANE Y., BEN ALI, S., RIHOUEY, C., ALEXANDRE, S., VILA, J., JOUENNE, T. et E. DE. caractérisation de la matrice des biofilms formés par Acinetobacter baumannii à l'interface air-eau. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP23, Mont-Saint-Aignan, 5 Juin 2009.
3. CHAN, P., COSETTE, P., GALLAND, A., FILEZAC DE L'ETANG, A., FALLUEL-MOREL, A., GORECKI, D., VAUDRY, H., JOUENNE, T. et D. VAUDRY. Amélioration du taux de couverture protéomique des milieux complexes grâce au système OFFGEL AGILENT 3100. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP23, Mont-Saint-Aignan, 5 Juin 2009.
4. ROSENBERG, M., COQUET, L., EL-EMAWY, A., STAPLES, M., JOUENNE T. and D. SEWAGE. Moderate drinking during pregnancy alters placental protein expression. 26ème Journée de la Société française d'Electrophorèse et d'analyse protéomique, 26ème Journée Française de spectrométrie de masse, Dijon, 14-17 Septembre 2009.
5. COSETTE, P., BEN MLOUKA, M., CHAN P., VAUDRY, D. et T. JOUENNE. Caractérisation du protéome membranaire minoritaire chez pseudomonas aeruginosa en utilisant l'approche proteominerTM. 26ème Journée de la Société française d'Electrophorèse et d'analyse protéomique, 26ème Journée Française de spectrométrie de masse, Dijon, 14-17 Septembre 2009

2. UPRES EA4258, INC3M FR CNRS 3038 - CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie)

Localisation : Caen

Source des informations : Ronan Bureau

Site Web : <http://www.cermn.unicaen.fr/>

Remarque : Ce laboratoire utilise également les ressources de modélisation numérique. Les activités liées aux projets scientifiques 2005004 et 2007015 figurent en première partie de ce document.

3. INSERM U 413 - Laboratoire de Neuroendocrinologie Cellulaire et Moléculaire

Localisation : Rouen

Source des informations : David Vaudry

Site Web : http://www.univ-rouen.fr/LNCM/0/fiche_structure/

Publications

1. Louiset, E., Isvi, K., Gasc, J.M., Duparc, C., Cauliez, B., Laquerrière, A., Kuhn, J.M. and Lefebvre, H.: Ectopic expression of serotonin7 (5-HT7) receptors in an adrenocortical carcinoma cosecreting renin and cortisol. Endocr Relat Cancer 15:1025-1034 (2008) (IF = 5.2)
2. Malagon, M.M., Molina, M., Gahete, M.D., Duràn-Prado, M., Martinez-Fuentes, A.J., Alcain, F.J., Tonon, M.C., Leprince, J., Vaudry, H., Castaño, J.P. and Vásquez-Martinez, R.: Urotensin II and urotensin II-related peptide activate somatostatin receptor subtype 2 and 5. Peptides 29:711-720 (2008). (IF = 2,5)
3. Molendi-Coste, O., Mairesse, J., Aubert, N., Ghzili, H., Abbadie, C., Vaudry, H., Gonzalez, B., Anouar, Y., Vieau, D., Breton, C. and Laborie, C.: Maternal perinatal undernutrition impairs chromaffin cell proliferation in the postnatal rat. Horm. Metab. Res. 40:386-390 (2008). (IF = 1,7)

4. Montero-Hadjadje, M., Vaingankar, S., Elias, S., Tostivint, H., Mahata, S.K. and Anouar, Y.: Chromogranins A and B and secretogranin II: evolutionary and functional aspects. *Acta Physiol (Oxf)*. 192:309-324 (2008). (IF = 1,6).
5. Parmentier, C., Hameury, E., Lihrmann, I., Taxi, J., Hardin-Pouzet, H., Vaudry, H., Calas, A. and Tostivint, H.: Comparative distribution of the mRNAs encoding urotensin I and urotensin II in zebrafish. *Peptides* 29:820-829 (2008). (IF = 2,5)
6. Ravni, A., Vaudry, D., Gerdin, M., Eiden, M.V., Falluel-Morel, A., Gonzalez, B.J., Vaudry, H. and Eiden, L.E.: A cAMP-dependent, protein kinase A-independent signaling pathway mediating neurogenesis through Egr1 in PC12 cells. *Mol. Pharmacol.* 73:1688-1708 (2008). (IF = 5,1)
7. Richard, J.A., Meyer, Y., Jolivel, V., Massonneau, M., Dumeunier, R., Vaudry, D., Vaudry, H., Renard, P.Y. and Romieu, A.: Latent fluorophores based on a self-immolative linker strategy and suitable for protease sensing. *Bioconjugate Chemistry* 19:1707-1718 (2008). (IF = 3,8)
8. Sakurai, N., Maruo, K., Haraguchi, S., Uno, Y., Oshima, Y., Tsutsui, K., Matsuda, Y., Do Rego, J.L., Pelletier, G., Vaudry, H. and Nakamura, M.: Immunohistochemical detection and biological activities of CYP17 (P450C17) in the indifferent gonad of the frog *Rana rugosa*. *J. Steroid Biochem. Mol. Biol.* 112:5-12 (2008). (IF = 2,7)
9. Séveno, M., Cabrera, G., Triguero, A., Burel, D., Leprince, J., Rihouey, C., Vézina, L., D'aoust, M.A., Rudd, P.M., Royle, L., Dwek, R.A., Harvey, D.J., Lerouge, P., Cremata, J.A. and Bardor, R.: Plant N-glycan profiling of minute amounts of material. *Anal. Biochem.* 379:66-72 (2008). (IF = 2,9)
10. Sicard, F. and Vaudry, H.: Neuroendocrine regulation of amphibian adrenocortical cells by hormones, neurotransmitters and neuropeptides. In "Recent Advances in Non-Mammalian Adrenal Gland Research", Edt A. Capaldo. Pp 31-56 (2008).
11. Tabarin, A., Bardet, S., Bertherat, J., Dupas, B., Chabre, O., Hamoir, E., Laurent, F., Tenenbaum, F., Cazalda, M., Lefebvre, H., Valli, N., Rohmer, V.: French Society of Endocrinology Consensus. Exploration and management of adrenal incidentalomas. French Society of Endocrinology Consensus. *Ann. Endocrinol. (Paris)*. 69:487-500 (2008).
12. Tokay, T., Hachem, R., Masmoudi-Kouki, O., Gandolfo, P., Desrues, L., Leprince, J., Castel, H., Diallo, M., Amri, M., Vaudry, H. and Tonon, M.C.: Beta-amyloid peptide stimulates endozepine release in cultured rat astrocytes through activation of N-formyl peptide receptors. *Glia* 56:1380-1389 (2008). (IF = 5,4)
13. Tostivint, H., Lihrmann, I. and Vaudry, H.: New insight into the history of the somatostatin family. *Mol. Cell. Endocrinol.* 286:5-17 (2008). (IF = 3,0)
14. Trabucchi, M., Trudeau, V., Drouin, G., Tostivint, H., Vallarino, M., Lihrmann, I. and Vaudry, H. : Molecular characterization and comparative localization of the mRNAs encoding two glutamic acid decarboxylases (GAD65 and GAD67) in the brain of the African lungfish, *Protopterus annectens*. *J. Comp. Neurol.* 506:979-988 (2008). (IF = 3,9)
15. Vaudry, H.: Urotensin II, urotensin II-related peptide and UT receptor. Editorial. *Peptides* 29:647-648 (2008). (IF = 2,5).
16. Vuillermet, P., Cauliez, B., Fréger, P., Vannier, J.P., Pellerin, A., Kuhn, J.M. : Simultaneous suprasellar and pineal germ cell tumors in five late stage adolescents: endocrinological studies and prolonged follow-up. *J. Pediatr Endocrinol. Metab.* 21:1169-1178 (2008).
17. Zhokhov, S.S., Desfeux, A., Aubert, N., Falluel-Morel, A., Fournier, A., Laudenbach, V., Vaudry, H. and Gonzalez, B.J.: Bax siRNA promotes survival of cultured and allografted granule cell precursors through blockade of caspase-3 cleavage. *Cell Death Differ* 15:1042-1053 (2008). (IF = 7,5)
18. Bardou, I., Maubert, E., Leprince, J., Chichery, R., Cocquerelle, C., Launay, S., Vivien, D., Vaudry, H. and Agin, V.: Distribution of oxytocin- and vasopressin-like immunoreactivity within the central nervous system in the cuttlefish, *Sepia officinalis*. *Cell Tissue Res.* 336:249-266 (2009) (IF = 2,6)
19. Benjdia, A., Leprince, J., Sandström, C., Vaudry, H., Johnson, M.K. and Berteau, O.: Mechanistic investigations of anaerobic sulfatase-maturing enzyme: Direct C β -H atom abstraction catalyzed by a radical AdoMet enzyme. *J. Am. Chem. Soc.* 131:8348-8349 (2009). (IF = 7,9)
20. Botia, B., Castel, H., Lefebvre, T., Seyer, D., Bénard, M., Falluel-Morel, A., Aubert, N., Cosette, P., Jouenne, T., Fournier, A., Vaudry, H., Gonzalez, B.J. and Vaudry, D.: Effets du PACAP et de l'éthanol sur la survie des

- neurones en grain du cervelet de rat in vitro et in vivo : étude des mécanismes d'action. Cahiers de l'IRES 19 :57-51 (2009).
21. Bourgault, S., Vaudry, D., Ségalas-Milazzo, I., Guilhaudis, L., Couvineau, A., Laburthe, M., Vaudry, H. and Fournier, A.: Molecular and conformational determinants of pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide (PACAP) for activation of the PAC1 receptor. *J. Med. Chem.* 52:3308-3316 (2009). (IF = 5,6)
 22. Cailleux-Bounacer, A., Rohmer, V., Lahlou, N., Lefebvre, H., Roger, M. and Kuhn, J.M.: Impact level of dihydrotestosterone on the hypothalamic-pituitary-leydig cell axis in men. *Int. J. Androl.* 32:57-65 (2009). (IF = 3,0)
 23. Castaño, J.P., Martínez-Fuentes, J., Gutiérrez-Pascual, E., Vaudry, H., Tena-Sempere, M., and Malagón, M.M. : Intracellular signaling pathways activated by kisspeptins through GPR54 : do multiple signals underlie function diversity ? *Peptides* 30:10-15 (2009). (IF = 2,7)
 24. Cevasco, A., Pittaluga, A., Do Rego, J.L., Luu-The, V., Pelletier, G., Vaudry, H. and Mandich, A.: Immunohistochemical localization of hydroxysteroid sulfotransferase and sulfatase in the brain of *Rana esculenta* tadpoles. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1163:365-368 (2009).
 25. Conlon, J.M., Ahmed, E., Coquet, L., Jouenne, T., Leprince, J., Vaudry, H. and King, J.D.: Peptides with potent cytolytic activity from the skin secretions of the North American leopard frogs, *Lithobates blairi* and *Lithobates yavapaiensis*. *Toxicon* 53:699-705 (2009). (IF = 2,5)
 26. Conlon, J.M., Demandt, A., Nielsen, P.F., Leprince, J., Vaudry, H. and Woodhams, C.: The alyteserins: two families of antimicrobial peptides from the skin secretions of the midwife toad *Alytes obstetricans* (Alytidae). *Peptides* 30:1069-1073 (2009). (IF = 2,4)
 27. Conlon, J.M., Abdel-Wahad, Y.H.A., Flatt, P.R., Leprince, J., Vaudry, H., Jouenne, T. and Condamine, E.: A glycine-leucine-rich peptide structurally related to the plasticins from the skin of the frog *Leptodactylus laticeps* (Leptodactylidae). *Peptides* 30:888-892 (2009). (IF = 2,4)
 28. Conlon, J.M., Raza, H., Coquet, L., Jouenne, T., Leprince, J., Vaudry, H. and King J.D. : Purification of peptides with differential cytolytic activities from the skin secretions of the Central American frog, *Lithobates vaillanti* (Ranidae). *Comp. Biochem. Physiol.* 150:150-154 (2009). (IF = 1,5)
 29. Do-Rego, J.L., Seong, J.Y., Burel, D., Luu-The, V., Larhammar, D., Tsutsui, K., Pelletier, G., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Steroid biosynthesis within the frog brain: a model of neuroendocrine regulation. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1163:83-92 (2009). (IF = 1,9)
 30. Do-Rego, J.L., Seong, J.Y., Burel, D., Leprince, J., Luu-The, V., Tsutsui, K., Tonon, M.C., Pelletier, G. and Vaudry, H.: Neurosteroid biosynthesis in vertebrates: enzymatic pathways and neuroendocrine regulation. *Front. Neuroendocrinol.* 30:259-301 (2009). (IF = 11,5)
 31. Galas, L., Raoult, E., Tonon, M.C., Okada, R., Jenks, B.G., Castaño, J.P., Kikuyama, S., Malagon, M., Roubos, E.W. and Vaudry, H.: TRH acts as a multifunctional hypophysiotropic factor in vertebrates. *Gen. Comp. Endocrinol.* 164:46-50 (2009). (IF = 2.3) VERIFIER L'IF
 32. Glinel, K., Jonas, A.M., Jouenne, T., Leprince, J., Galas, L. and Huck, W.T.: Antibacterial and antifouling, polymer brushes incorporating antimicrobial peptide. *Bioconjug. Chem.* 20 :71-77 (2009). (IF = 4.6)
 33. Gutiérrez-Pascual, E., Leprince, J., Martínez-Fuentes, A.J., Ségalas-Milazzo, I., Pineda, R., Roa, J., Duran-Prado, M., Guilhaudis, L., Desperrois, E., Lebreton, A., Pinilla, L., Tonon, M.C., Malagon, M.M., Vaudry, H., Tena-Sempere, M. and Castaño, J.P.: In vivo and in vitro structure-activity relationships and structural conformation of kisspeptin-10-related peptides. *Mol. Pharmacol.* 76:58-67 (2009) (IF = 5,6)
 34. Haraguchi, S., Matsunaga, M., Koyama, T., Do Rego, J.L. and Tsutsui, K.: Seasonal changes in the synthesis of the neurosteroid 7 α -hydroxypregnelone stimulating locomotor activity in newts. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1163:410-413 (2009). (IF = 1,9)
 35. Hwang, J.I., Kim, D.K., Kwon, H.B., Vaudry, H. and Seong, J.Y.: Phylogenetic history, pharmacological features, and signal transduction of neurotensin receptors in vertebrates. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1163:169-178 (2009). (IF = 1,9)
 36. Jolivel, V., Basille, M., Aubert, N., de Jouffrey, S., Ancian, P., Le Bigot, F., Noack, P., Massonneau, M., Fournier, A., Vaudry, H., Gonzalez, B.J. and Vaudry, D.: Distribution and functional characterization of pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide receptors in the brain on non-human primates. *Neuroscience* 160:434-451 (2009). (IF = 3,2)

37. Koyama, T., Haraguchi, S., Vaudry, H. and Tsutsui, K.: Diurnal changes in the synthesis of the neurosteroid 7 α -hydroxypregnenolone stimulating locomotor activity in newts. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1163:444-447 (2009). (IF = 1,9)
38. Lectez, B., Jeandel, L., El-Yamani, F.Z., Arthaud, S., Alexandre, D., Mardargent, A., Jégou, S., Mounien, L., Bizet, P., Magoul, R., Anouar, Y. and Chartrel, N.: The Orexigenic Activity of the Hypothalamic Neuropeptide 26RFa is Mediated by the Neuropeptide Y and Proopiomelanocortin Neurons of the Arcuate Nucleus. *Endocrinology* vol ? pages ? 2009. (IF = 5,0)
39. Lee, Y.R., Tsunekawa, K., Moon, M.J., Um, H.N., Hwang, J.I., Osugi, T., Otaki, N., Sunakawa, Y., Kim, K., Vaudry, H., Kwon, H.B., Seong, J.Y. and Tsutsui, K.: Molecular evolution of multiple forms of kisspeptins and GPR54 receptors in vertebrates. *Endocrinology* 150:2837-2846 (2009). (IF = 5,0)
40. Lefebvre, H., Duparc, C., Cartier, D., Contesse, V., Perraudin, V., Bertherat, J., Plouin, P.F., Reznik, Y., Kuhn, J.M. and Louiset, E.: Autocrine/paracrine regulations of steroidogenesis in adrenocortical hyperplasias and tumors. *Ann Endocrinol (Paris)* 70:192-193 (2009).
41. Marconnet, C., Houari, A., Galas, L., Vaudry, H., Heim, V. and Di Martino, P.: Biodegradable dissolved organic carbon concentration of feed water and NF membrane biofouling: a pilot train study. *Desalination* 242:228-235 (2009). (IF = 0,8)
42. Montero-Hadjadje, M., Elias, S., Chevalier, L., Bénard, M., Tanguy, Y., Turquier, V., Galas, L., Yon, L., Malagon, M.M., Driouich, A., Gasman, S. and Anouar, Y.: Chromogranin A promotes peptide hormone sorting to mobile granules in constitutively and regulated secreting cells: role of conserved N- and C-terminal peptides. *J. Biol. Chem.* 284:12420-12431 (2009). (IF = 5,6).
43. Moons, J.S., Lee, Y.R., Oh, D.Y., Hwang, J.I., Lee, J.Y., Kim, J.I., Vaudry, H., Kwon, H.B. and Seong J.Y.: Molecular cloning of the bullfrog kisspeptin receptor GPR54 with high sensitivity to *Xenopus* kisspeptin. *Peptides* 30:171-179 (2009). (IF = 2,7)
44. Mounien, L., Do-Régo, J.C., Bizet, P., Boutelet, I., Gourcerol, G., Fournier, A., Brabet, P., Costentin, J., Vaudry, H. and Jégou, S.: Pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide inhibits food intake in mice through activation of the hypothalamic melanocortin system. *Neuropsychopharmacology* 34:424-435 (2009). (IF = 5,2)
45. Okada, R., Kobayashi, T., Yamamoto, K., Nakakura, T., Tanaka, S., Vaudry, H. and Kikuyama, S.: Neuroendocrine regulation of thyroid-stimulating hormone secretion in amphibians. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1163:262-270 (2009). (IF = 1,9)
46. Tena-Sempere, M. and Vaudry, H.: Kisspeptins. *Peptides* 30:1-3 (2009). (IF = 2,4)
47. Thouënon, E., Pierre, A., Yon, L., Eisenhofer, G. and Anouar, Y.: Genetic markers for the diagnosis and prognosis of pheochromocytoma. *Exp. Rev. Endocrinol. Metab.* 4:45-52 (2009). (IF =)
48. Tsutsui, K., Haraguchi, S., Inoue, K., Miyabara, H., Suzuki, S., Ogura, Y., Koyama, T., Matsunaga, M. and Vaudry, H.: Identification, biosynthesis, and function of 7 α -hydroxypregnenolone, a new key neurosteroid controlling locomotor activity, in nonmammalian vertebrates. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* 1163:308-315 (2009). (IF = 1,9)
49. Barbier, E., Pierrefiche, O., Vaudry, D., Gonzalez, B., Vaudry, H., Daoust, M., and Naassila, M.: Long-term alterations in vulnerability to addiction to drugs of abuse and in brain gene expression after early life ethanol exposure. *Neuropharmacology* (in press). (IF = 3,2)
50. Bardou, I., Maubert, E., Leprince, J., Chichery, R., Vaudry, H. and Agin, V.: Ontogeny of oxytocin-like immunoreactivity in the central nervous system of the cuttlefish, *Sepia officinalis*. *Develop. Neurosci.* (in press). (IF = 3,0)
51. Bourgault, S., Vaudry, D., Dedja, A., Doan, N.D., Vaudry, H. and Fournier, A.: Pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide: a potential therapeutic neuroprotective drug. *Curr. Med. Chem.* (in press) (IF = 4,9)
52. Bourgault, S., Vaudry, D., Dejda, A., Doan, N.D., Vaudry, D. and Fournier, A.: Pituitary adenylate Cyclase-Activating Polypeptide: Focus on Structure-Activity Relationships of a Neuroprotective Peptide. *Cur. Med Chem.* (in press).

53. Bruzzone, F., Do-Régo, J.L., Luu-The, V., Pelletier, G., Vallarino, M. and Vaudry, H.: Immunohistochemical localization and biological activity of 3β -hydroxysteroid dehydrogenase and 5α -reductase in the brain of the frog, *Rana esculenta*, during development. *J. Chem. Neuroanat.* (in press). (IF = 2,2)
54. Cailleux-Bounacer, A., Reznik, Y., Cauliez, B., Menard, J.F., Duparc, C. and Kuhn, J.M.: Evaluation of endocrine testing of Leydig cell function using extractive and recombinant human chorionic gonadotropin and different doses of recombinant human LH in normal men. *Eur. J. Endocrinol.*, 2008 (in press). (IF 3,1)
55. Chu, J.Y.S., Lee, L.T.O., Lai, C.H., Vaudry, H., Chan, Y.S., Yung, W.H. and Chow, B.K.C.: Secretin as a neurohypophysial factor regulating body water homeostasis. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* (in press). (IF = 10,3)
56. Cohade, C., Broussaud, S., Louiset, E., Bennet, A., Huyghe, E. and Caron, P.: Ectopic cushing's syndrome due to a pheochromocytoma: A new case in the post partum and review of literature. *Gynecological Endocrinology* (in press). (IF = 1,4)
57. Conlon, J.M., Meetani, M., Coquet, L., Jouenne, T., Leprince, J., Vaudry, H., Kolodziejek, J., Nowotny, N. and King, J.D.: Antimicrobial peptides from the skin secretions of the New World frog *Lithobates capito* and *Lithobates warszewitschii* (Ranidae). *Peptides* (in press). (IF = 2,4)
58. Le Dreau, G., Nicot, A., Bénard, M., Thibout, H., Vaudry, D., Martinerie, C. and Laurent, M. : NOV/CCN3 promotes maturation of cerebellar granule neuron precursors. *Mol. Cell. Neurosci.* (in press). (IF = 5,4)
59. Louiset, E., Stratakis, C.A., Perraudin, V., Griffin, K.J., Libé, R., Cabrol, S., Fève, B., Young, J., Groussin, L., Bertherat, J. and Lefebvre, H.: The paradoxical increase in cortisol secretion induced by dexamethasone in primary pigmented nodular adrenocortical disease involves a glucocorticoid receptor-mediated effect of dexamethasone on protein kinase A catalytic subunits. *J. Clin. Endocrinol. Metab.* (in press). (IF = 5,8).
60. Rodriguez-Pacheco, F., Vázquez-Martinez, R., Martinez-Fuentes, A.J., Pulido, M.R., Gahete, M.D., Vaudry, H., Dieguez, C., Castano, J.P. and Malagón, M.M.: Resistin regulates pituitary somatotrope cell function through the activation of multiple signaling pathways. *Endocrinology* (in press). (IF = 5,0)
61. Rod, A., Voicu, M., Bazille, C., Mitre, H., Louiset, E., Chiche, L. and Reznik, Y.: Cushing's syndrome associated with a nested stromal epithelial tumor of the liver: hormonal, immunohistochemical and molecular studies. *Eur. J. Endocrinol.* (in press).. (IF = 3,1)
62. Shioda, S., Vaudry, H., May, V., Braas, K., Reglodi, D. and Gozes, I.: In memory of our teacher, Dr Akira Arimura. *J. Mol. Neurosci.* (in press).
63. Tanguy, Y., Manecka, D.L. and Anouar, Y.: Selenium and selenoprotein function in the central nervous system. *Curr. Med. Chem.* (in press). (IF = 4,9)
64. Vallarino, M., Bruzzone, F. and Vaudry, H.: Neuroanatomical distribution of MCH in the brain and pituitary of submammalian vertebrates. *Peptides* (in press). (IF = 2,4)
65. Vaudry, D., Falluel-Morel, A., Bourgault, S., Basille, M., Burel, D., Wurtz, O., Fournier, A., Chow, B.K.C., Hashimoto, H., Galas, L. and Vaudry, H.: Pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide: twenty years after the discovery. *Pharmacol. Rev.* (in press). (IF = 27,1)
66. Agirregoitia, N., Bizet, P., Ruiz, F., Boutelet, I., Agirregoitia, E., Vaudry, H. and Jegou, S.: Prolyl endopeptidase mRNA expression in the central nervous system during rat development. *J. Neurochem.* (soumis). (IF = 4,8)
67. Allais, A., Burel, D., Roy, V., Arthaud, S., Galas, L., Isaac, E.R., Fournier, A., Chapillon, P., Sherwood, N.M., Vaudry, H. and Gonzalez, B.J.: Balanced effect of PACAP and FasL on granule cell death during cerebellar development: a morphological, functional and behavioural characterization. *J. Neurochem.* (soumis). (IF = 4,8)
68. Bardou, I., Leprince, J., Chichery, R., Vaudry, H. and Agin, V.: Vasopressin/oxytocin-related peptides influence long-term memory of a passive avoidance task in the cuttlefish, *Sepia officinalis*. *Learn. Mem.* (soumis). (IF =)
69. Belmeguenai, A., Leprince, J., Vaudry, H. and Louiset, E.: Neurotensin stimulates calcium-activated chloride and potassium currents in frog pituitary melanotrophs. *Neuroscience* (soumis). (IF = 3,6)

70. Benjdia, A., Subramanian, S., Leprince, J., Vaudry, H., Johnson, M.K. and Berteau, O.: Anaerobic sulfatase-maturing enzymes: a mechanistic link with glycy radical-activating enzymes? *FEBS Lett.* (soumis) (IF = 3,6)
71. Bidaud, I., Ladram, A., Galas, L., Vaudry, H., Nicolas, P. and Bulant, M.: Molecular evolution of TRH receptors in vertebrates. Identification of four genes encoding TRH receptors in *Fugu rubripes* and *Tetraodon nigroviridis*. *Endocrinology* (soumis). (IF = 5,1)
72. Botia, B., Jolivel, V., Burel, D., Le Joncour, V., Roy, V., Naassila, M., Bénard, M., Fournier, A., Vaudry, H. and Vaudry, D.: Neuroprotective effects of PACAP against ethanol-induced toxicity in the developing rat cerebellum. *J. Neurosci.* (soumis). (IF = 3,4)
73. Bourgault, S., Vaudry, D., Vaudry, H. and Fournier, A.: Characterization of PACAP analogs resistant to dipeptidyl peptidase IV. *Proceedings of the European Peptide Society.*
74. Bucharles, C., Vaudry, D., Rousselle, C., Galas, L., Falluel-Morel, A., Aubert, N., Fournier, A., Vaudry, H. and Gonzalez, B.J.: Somatostatin sst2 receptors undergo internalization via the clathrin coated-pits pathway in immature cerebellar granule cells. *Neuroscience* (soumis). (IF = 3,2)
75. Chafai, M., Basille, M., Galas, L., Rostène, W., Gressens, P., Vaudry, H., Gonzalez, B.J. and Louiset, E.: PACAP and VIP promote the genesis of calcium currents in differentiating mouse embryonic stem cells. (soumis).
76. Cohade, C., Broussaud, S., Louiset, E., Bennet, A., Huyghe, E., Caron, P.: Ectopic cushing's syndrome due to a pheochromocytoma. a new case in the post partum and review of literature. (soumis).
77. Compère, V., Lanfray, D., Sturzenegger, N., Lefrançois, C., Bougerol, F., Dureil, B., Pelletier, G., Vaudry, H. and Tonon, M.C.: Effect of cecal ligation and puncture on the production of diazepam-binding inhibitor in rat. *Am. J. Physiol.* (soumis). (IF = 4,1)
78. Condamine, E., Courchay, K., Do Rego, J.C., Leprince, J., Mayer, C., Davoust, D., Costentin, J. and Vaudry, H.: Structural and pharmacological characteristics of chimeric peptides derived from peptide E and β -endorphin reveal the crucial role of the C-terminal YGGFL and YKKGE motifs in their analgesic properties. *Journal ?* (soumis).
79. Conlon, J.M., Coquet, L., Jouenne, T., Leprince, J., Vaudry, H. and Iwamuro, S. : Evidence from the primary structures of dermal antimicrobial peptides that *Rana tagoi okiensis* and *Rana tagoi tagoi* (Ranidae) are not conspecific subspecies.. (soumis).
80. Dejda, A., Chan, P., Seaborn, T., Coquet, L., Jouenne, T., Fournier, A., Vaudry, H. and Vaudry, D.: Involvement of stathmin1 in the neurotrophic effects of PACAP in PC12 cells. *Mol. Cell. Biol.* (soumis).
81. Diallo, M., Jarry, M., Desrues, L., Tokay, T., Chatenet, D., Leprince, J., Rossi, O., Vaudry, H., Tonon, M.C., Castel, H. and Gondolfo, P.: The vasoactive peptides Ull and URP regulate astrocyte activity through common and distinct mechanisms. Involvement in cell proliferation. *Biochem. J.* (soumis). (IF = 4,3)
82. Fauquembergue, E., Toutirais, O., Tougeron, D., Drouet, A., Le Gallo, M., Désille, M., Cabillic, F., Thomas de la Pintièrre, C., Iero, M., Rivoltini, L., Baert-Desurmont, S., Leprince, J., Vaudry, H., Sesboué, R., Frébourg, T., Latouche, J.B. and Catros, V. : Human carcinoembryonic antigen is not a suitable target for T cell-based immunotherapy. *Cancer Res.* (soumis). (IF = 7,7)
83. Garnier, M., Galas, L., Lamacz, M., Lenglet, S., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Acetylcholine inhibits α -MSH release from the intermediate lobe of the rat pituitary through activation of M2 muscarinic receptors. *Endocrinology* (soumis). (IF = 5,1)
84. Haraguchi, S., Koyama, T., Hasunuma, I., Vaudry, H. and Tsutsui, K.: Prolactin increases the synthesis of 7α -hydroxypregnenolone, a key factor for induction of locomotor activity, in breeding male newts. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* (soumis). (IF = 10,3)
85. Louiset, L., Stratakis, C.A., Perraudin, V., Griffin, K.J., Libé, R., Cabrol, S., Fève, B., Young, J., Groussin, L., Bertherat, J. and Lefebvre, H.: The paradoxical increase in cortisol secretion induced by dexamethasone in primary pigmented nodular adrenocortical disease involves a glucocorticoid receptor-mediated effect of dexamethasone on protein kinase A catalytic subunits. (JCEM en cours de correction)
86. Lozach, A., Castel, H., Garrel, G., Vaudry, H. and Counis, R. : Characterization and functional expression of cyclic nucleotide-gated channels in rat pituitary gonadotrophs. *Endocrinology* (soumis). (IF = 5,1)

87. Masmoudi-Kouki, O., Hamdi, Y., Kaddour, H., Jenhani, F., Gandolfo, P., Vaudry, D., Mokni, M., Leprince, J., Hachem, R., Vaudry, H., Tonon, M.C. and Amri, M.: Protective effects of the octadecaneuropeptide ODN on hydrogen peroxide-induced oxidative stress and cell death in cultured rat astrocytes. (soumis).
88. Nigaud, Y., Cosette, P., Chan Tchi Song, P., Vaudry, D., Vaudry, H., Junter, G.A. and Jouenne, T.: Biofilm-induced modification in the proteome of *Pseudomonas aeruginosa* planktonic cells. *Applied Environmental Microbiology* (soumis). (IF =)
89. Ravni, A., Seaborn, T., Au, R., Chow, B.K.C., Fournier, A., Wurtz, O., Vaudry, H., Eiden, L. and Vaudry, D.: PACAP and NGF increase serpin b1a expression through the calcium and MAP-kinase pathways to protect PC12 cells from apoptosis. *J. Neurochem.* (soumis). (IF = 4,8)
90. Rod, A., Voicu, M., Bazille, C., Mittre, H., Louiset, E., Chiche, L. and Reznik, Y.: Cushing's syndrome associated with a nested stromal epithelial tumor of the liver : hormonal, immunohistochemical and molecular studies. *JCEM* (soumis).
91. Thébault, S., Deniel, N., Galland, A., Lecleire, S., Charlionet, R., Coëffier, M., Tron, F., Vaudry, H. and Dechelotte, P.: Human duodenal proteome modulations by glutamine and antioxidants. *Gastroenterology* (soumis). (IF = 11,7)
92. Thorel, N., Jégou, J.F., Schouft, M.T., Cosette, P., Vaudry, H. and Fontaine, M.: CR2 signaling in astrocytes requires its association with TAPA-1 and L-caldesmon and its translocation in lipid drafts. *J. Neuroinflam.* (soumis). (IF = 3,2)
93. Ukena, K., Tachibana, T., Iwakoshi-Ukena, E., Minakata, H., Kawaguchi, R., Tobari, Y., Vaudry, H. and Tsutsui, K.: A novel avian hypothalamic neuropeptide: identification, localization and function of 26RFa. *Endocrinology* (soumis). (IF = 5,0)
94. Wahab, F., Salahuddin, H., Anees, M., Leprince, J., Vaudry, H., Tena-Sempere, M. and Shahab, M.: Study of the effect of 26RFa and 43RFa on the neuroendocrine reproductive axis in the adult male rhesus monkey (*Macaca mulatta*). *Peptides* (IF = 2,4)
95. Zatylny, C., Bernay, B., Zanutti, B., Leprince, J., Vaudry, H. and Henry, J.: Characterization of a novel LFRFamide neuropeptide in the cephalopod *Sepia officinalis*. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* (soumis). (IF = 2,8)

Communications

1. Development of new approaches in fluorescence microscopy on PRIMACEN: fluorescence lifetime imaging microscopy (FLIM) and total internal reflection fluorescence (TIRF) techniques. 12th Meeting of the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. n° P4.
2. Bénard, M., Vaudry, D., Montero, M., Vaudry, H. and Galas, L. : New approaches in fluorescence microscopy on PRIMACEN : fluorescence lifetime imaging microscopy (FLIM) and total internal reflection fluorescence (TIRF) techniques. 2ème Rencontres Normandes en Chimie-Biologie-Santé, Caen, 21 novembre 2008, Abst. n° P1.
3. Jolivel, V., Roy, V., Burel, D., Naassila, M., Shintani, N., Fournier, A., Vaudry, H. and Vaudry, D.: Neuroprotective effects of PACAP on alcohol toxicity during cerebellar development. Third joint research symposia between Inserm and the National Institute on Alcohol Abuse & Alcoholism. Paris, October 3, 2008.
4. Botia, B., Jolivel, V., Le Joncour, V., Roy, V., Burel, D., Naassila, M., Fournier, A., Vaudry, H. and Vaudry, D. : Neuroprotective effects of PACAP against alcohol-induced cell death in the developing rat cerebellum. 12th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. n° P6.
5. Chan, P., Piquenot, J., Cosette, P., Vaudry, H., Jouenne, T. and Vaudry, D. : Presentation of the agilent 6520Q-TOF LC/MS system. 12th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. n° P15.
6. , V., Vaudry, H. and Gonzalez, B. : The siRNA strategy, a powerful tool to favour survival of allografted granule cell precursors through blockage of apoptosis. 12th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. n° 04.
7. Do-Rego, J.L., Leprince, J., Luu-The, V., Pelletier, G., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Control of neurosteroid biosynthesis in the frog brain by the endozepine ODN: structure-activity relationships and

- characterization of the receptor. 12th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. n° P20.
8. Do-Rego, J.L., Leprince, J., Luu-The, V., Pelletier, G., Seong, J.Y., Tsutsui, K., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Regulation of neurosteroid production in the frog brain by the endozepine ODN: structure-activity relationships and characterization of the receptor. 33rd Conference of the Japan Society for Comparative Endocrinology, Higashi-Hiroshima, Japan, December 5-6, 2008, Abst. n° SP-1.
 9. Do-Rego, J.L., Seong, J.Y., Luu-The, V., Pelletier, G., Tsutsui, K., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Control of neurosteroid biosynthesis in the frog brain by neuropeptides related to arginine vasotocin. 33rd Conference of the Japan Society for Comparative Endocrinology, Higashi-Hiroshima, Japan, December 5-6, 2008, Abst. n° SP-2.
 10. Dubessy, C., Cartier, D., Lectez, B., Bucharles, C., Chartrel, N., Montero-Hadjadje, M., Bizet, P., Chatenet, D., Tostivint, H., Scalbert, E., Leprince, J., Vaudry, H. and Jégou, S. : Characterization of Ull in mouse, localization of Ull and URP mRNAs in mononeurons and characterization of Ull-immunoreactivity at the neuromuscular junction altogether indicate a role in neuromuscular function. 12th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. n° P22.
 11. Duparc, C., Louiset, E., Perraudin, V., Gobet, F., Meatchi, T., Plouin, P.F., Zennaro, M.C. and Lefebvre, H.: Caractérisation immunohistochimique de la sérotonine et des mastocytes dans les adénomes de Conn. SFE 2008, Lille, 01-04 octobre 2008.
 12. Falluel-Morel, A., Lin, L., Sokolowski, K. and DiCicco-Bloom, E. : N-acetyl cysteine (NAC) reduces mercury-induced neurotoxicity in the developing hippocampus. 12th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. n° P27.
 13. Haraguchi, S., Koyama, T., Kikuyama, S., Do Rego, J.L., Vaudry, H. and Tsutsui, K. : Prolactin regulates seasonal changes in the synthesis of the neurosteroid 7 alpha-hydroxypregnenolone. 33rd Conference of the Japan Society for Comparative Endocrinology, Higashi-Hiroshima, Japan, December 5-6, 2008, Abst. n° P-45.
 14. Lanfray, D., Vaudry, H., Tonon, M.C. and Morin, F.: Potential implication of endozepines in central glucose-sensing. 12th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. n° P37.
 15. Lecointre, C., Morin, F., Jarry, M., Desrues, L., Lefebvre, T., Vaudry, H., Gandolfo, P., Tonon, M.C. and Castel, H.: Identification of UT-associated proteins potentially involved in glioma tumorigenesis. 12th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. n° P41.
 16. Lecointre, C., Morin, F., Jarry, M., Desrues, L., Schouft, M.T., Lefebvre, T., Vaudry, H., Gandolfo, P., Tonon, M.C. and Castel, H.: Identification des partenaires protéiques du récepteur de l'urotensine II potentiellement impliqués dans le développement de tumeurs gliales. 2èmes Rencontres Normandes en Chimie-Biologie-Santé, Caen, 21 novembre 2008, Abst. n° P3.
 17. Lee, Y.R., Hwang, J.I., Vaudry, H. and Seong, J.Y.: Kisspeptins and their receptors in nonmammalian species. First World Conference on Kisspeptin Signaling in the Brain, Cordoba, Spain, October 8-10, 2008.
 18. Lefebvre, T., Desrues, L., Gandolfo, P., Diallo, M., Lecointre, C., Leprince, J., Dubessy, C., Vaudry, H., Tonon, M.C. and Castel, H.: Interaction directe entre le récepteur de l'urotensine II et le récepteur GABAA. Rôle dans la prolifération astrocytaire. 2èmes Rencontres Normandes en Chimie-Biologie-Santé, Caen, 21 novembre 2008, Abst. n° P11.
 19. Lefebvre, V., Fabis, F., Lescot-Fontaine, E., Sopkova-de Oliveras Santos, J., Lesnard, A., Dubessy, C., Vaudry, H., Bureau, R. and Rault, S. : Synthesis of new potential ligands for the human urotensin II receptor. 12th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. n° P43.
 20. Louiset, E., Duparc, C., Laquerrière, A., Kuhn, J.M., Reznik, Y., Bertherat, J., Lefebvre, H.: Recherche d'une sensibilité anormale au glucagon dans des lésions corticosurrénales responsables d'un syndrome de Cushing. SFE 2008, Lille, 01-04 octobre 2008.
 21. Louiset, E., Gobet, F., Libé, R., Bertherat, J., Clauser, E., Kuhn, J.M., Lefebvre, H.: Un cas complexe de syndrome de Cushing ACTH-indépendant associant hyperplasie micronodulaire bilatérale des surrénales et adénome corticosurrénalien ectopique. SFE 2008, Lille, 01-04 octobre 2008.
 22. Perraudin, V., Libe, R., Louiset, E., Groussin, L., Duparc, C., Kuhn, J.M., Bertherat, J. and Lefebvre, H.: Un cas familial de complexe de Carney à expression surrénalienne exclusive: coségrégation de la mutation de PRKAR1A avec l'hypercortisolisme. SFE 2008, Lille, 01-04 octobre 2008.

23. Raoult, E., Roussel, B., Lefebvre, T., Bénard, M., Vivien, D., Fournier, A., Vaudry, H., Vaudry, D. and Galas, L. : Implication of tPA in the effect of PACAP on granule cell migration in the developing cerebellum. 12th Annual Meeting of the LARC-Neurosciences Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. N° P54.
24. Salahuddin, H., Wahab, F., Anees, M., Leprince, J., Vaudry, H., Tena-Sempere, M. and Shahab, M.: Evidence that evolutionary conserved RFamide neuropeptides stimulate prolactin secretion in the adult male rhesus monkey (*Macaca mulatta*). 1st South Asian Conference of Physiological Societies and 11th Biennial Conference of Pakistan Physiological Society, Islamabad, Pakistan, November 6-8, 2008.
25. Sebert, M.E., Franceschini, I., Lomet, D., Leprince, J., Vaudry, H. and Caraty, A. : Kp10, the shortest peptide of the kisspeptin family, is a very minor form in the sheep hypothalamus : an immunological study. First World Conference on Kisspeptin Signaling in the Brain, Cordoba, Spain, October 8-10, 2008.
26. Sharif, A., Dugay, M., Vaudry, D., Loyens, A., Gonzalez, B., Vaudry, H. and Prévot, V.: Characterization of the human VIP/PACAP signaling system in astrocytes of the normal brain and astrocytes. 12th Annual Meeting the LARC-Neuroscience Network, Rouen, October 17, 2008, Abst. N° P58.
27. Tostivint, H., Hameury, E., Parmentier, C., Dubessy, C., Vaudry, H., Calas, A. and Lihmann, I.: Molecular evolution of the urotensin II family. Third Mediterranean Neuroscience Congress, Alexandria, Egypt, December 13-16, 2008.
28. Tsunekawa, K., Lee, Y.R., Osugi, T., Otakil, N., Sunakawa, Y., Vaudry, H., Seong, J.Y. and Tsutsui, K.: Identification of the novel kisspeptin KiSS-2 peptide and its receptor. 33rd Conference of the Japan Society for Comparative Endocrinology, Higashi-Hiroshima, Japan, December 5-6; 2008, Abst. n° P-37.
29. Vaudry, D.: The PC12 cell line as a model to identify genes involved in the neurotrophic activities of PACAP School of Life Sciences, Fudan University, Shanghai, China, October 27, 2008.
30. Vaudry, D.: Effect of PACAP on cerebellar granule cell migration. Institute of Neuroscience and Key Laboratory of Neurobiology, Shanghai Institute of Biological Sciences, Shanghai, China, October 29, 2008.
31. Vaudry, D.: Characterization of the neurotrophic effects of PACAP and development of new analogs for therapeutic applications. State Key Laboratory of Medical Neurobiology, Fudan University, Shanghai, China, October 30, 2008.
32. Vaudry, D.: Effects of PACAP on granule cells in the developing cerebellum School of Life Sciences, Fudan University, Shanghai, China, October 31, 2008.
33. Vaudry, D.: Caractérisation d'effets du PACAP in vivo et développement d'analogues à visée thérapeutique. Centre Xavier Bichat, Paris, France, November 25, 2008.
34. Vaudry, H., Tostivint, H., Lihmann, I., Chartrel, N., Fournier, A., Seong, J.Y., Tsutsui, K., Kikuyama, S., Leprince, J., Tonon, M.C. and Conlon, J.M.: From frog to human: the singular contribution of amphibians to the discovery of mammalian neuropeptides. 33rd Conference of the Japan Society for Comparative Endocrinology, Higashi-Hiroshima, Japan, December 5-6, 2008, Abst. n° PL1.
35. Wada, K., Maruyama, K., Uchiyama, M., Leprince, J., Tonon, M.C., Vaudry, H. and Matsuda, K.: The effect of the octadecaneuropeptide on anxiety-like behavior in goldfish. 33rd Annual Meeting of Japan Society for Comparative Endocrinology, Higashi-Hiroshima, Japan, December 5-6, 2008.
36. Wahab, F., Salahuddin, H., Anees, M., Leprince, J., Vaudry, H., Tena-Sempere, M. and Shahab, M.: Study of effect of 26 RF and 43 RF amides on neuroendocrine reproductive axis in the adult male rhesus monkey (*Macaca mulatta*). Annual Meeting of the Society for Neurosciences, Washington, DC, USA, November 15-20, 2008.
37. Basille-Dugay, M., Tassery, C., Raisman-Vozari, R., Vaudry, D. and Burel, D. : Effect of pleiotrophin on the cerebellum histogenesis in the weaver mice. 9ème Colloque de la Société des Neurosciences, Bordeaux, 26-29 mai 2009.
38. Bénard, M., Raoult, E., Vaudry, D., Falluel-Morel, A., Leprince, J., Galas, L., Vaudry, H. and Fontaine, M. : Implication of complement anaphylatoxin receptors (C3aR, C5aR) in the development of the rat cerebellum. 9ème Colloque de la Société des Neurosciences, Bordeaux, 26-29 mai 2009.
39. Botia, B., Jolivel, V., Le Joncour, V., Roy, V., Burel, D. Naassila, M., Fournier, A., Vaudry, H. and Vaudry, D. : Neuroprotective effects of PACAP against alcohol-induced cell death in the developing rat cerebellum. 9ème Colloque de la Société des Neurosciences, Bordeaux, 26-29 mai 2009.

40. Botia, B. Jolivel, V. Le Joncour, V. Roy, V., Burel, D., Naassila, M., Gorecki, D., Fournier, A., Vaudry, H. and Vaudry, D.: Neuroprotective effects of PACAP against alcohol-toxicity in the developing rat cerebellum. 36ème Colloque de la Société de Neuroendocrinologie, Nice, 15-18 septembre 2009, Abst. n° P50.
41. Bourgault, S., Vaudry, D., Ségalas-Milazzo, I., Guilhaudis, L., Couvineau, A., Laburthe, M., Vaudry, H. and Fournier, A.: Molecular and Conformational Determinants of Pituitary Adenylate Cyclase-Activating Polypeptide (PACAP) for Activation of the PAC1 Receptor. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009, Abst. n° P8.
42. Bourgault, S., Vaudry, D., Couvineau, A., Laburthe, M., Vaudry, H. and Fournier, A.: Probing the active conformation of the neuropeptide PACAP. 5th International Symposium on Peptide Receptors and Kinin 2009, Québec, Canada, June 26-30, 2009, Abst. n° P2.
43. Cameron, D.B., Galas, L., Raoult, E., Jiang, Y., Vaudry, H., Vaudry, D. and Komuro, H.: Involvement of PACAP in the control of cerebellar granule cell migration. 5th International Symposium on Peptide Receptors & Kinin 2009, Québec, Canada, June 26-30, 2009, Abst. n° P81.
44. Cervetto, C., Mazzotta, M.C., Marcoli, M., Bruzzone, F., Diaspro, A., Bianchini, P., Vallarino, M., Leprince, J., Vaudry, H. and Maura, G.: Presynaptic urotensin receptors in the cervical spinal motoneurons: facilitation of acetylcholine release. 34th Congress of the Italian Society of Pharmacology, Rimini, Italy, October 14-17, 2009.
45. Cevasco, A., Mandich, A., Massari, A., Luu-The, V., Pelletier, G., Vaudry, H. and Do Rego, J.L.: P450 aromatase localization in the brain of *Rana esculenta* tadpoles and modulation of mRNA expression after exposure to an estrogenic mixture. 5th International Symposium on Amphibian and Reptilian Endocrinology and Neurobiology, Berlin, September 20-23, 2009, Abst. n° PP1.
46. Chan, P., Cosette, P., Galland, A., Filézac de L'Etang, A., Falluel-Morel, A., Gorecki, D., Vaudry, H., Jouenne, T. and Vaudry, D.: Amélioration du taux de couverture protéomique des milieux complexes grâce au système OFFGEL Agilent 3100. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009, Abst. n° P11.
47. Charpentier, T., Letendre, J., Rocher, B., Durand, F., Vaudry, D., Chan, P., Vaudry, H. and Leboulenger, F. : Etude du protéome de tissus branchiaux chez la Moule bleue (*Mytilus edulis* L.) exposée au polychlorobiphényle CB153. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009, Abst. n° P12.
48. Cohade, C., Broussaud, S., Louiset, E., Bennet, A., Huyghe, E. and Caron, P.: ACTH-dependent Cushing's syndrome due to a pheochromocytoma in the post partum: a new case. 52èmes Journées Internationales d'Endocrinologie Clinique Henri-Pierre Klotz, Paris 14-15 mai 2009.
49. de Mota, N., Iturrioz, X., Alvear, R., Chartrel, N., Bonnet, D., Dabire, H., Berdeaux, A., Moos, F., Maigret, B., Galvi, J.L., Hibert, M., Vauray, H. and Llorens-Cortes, C. : Apelin receptors in body fluid homeostasis and cardiovascular functions. 5th International Symposium on Peptide Receptors and Kinin 2009, Québec, Canada, June 26-30, 2009, Abst. n° O5.
50. Desrues, L., Lecoindre, C., Lefebvre, T., Prézeau, L., Vole, C., Pin, J.P., Gandolfo, P., Leprince, J., Tonon, M.C. and Castel, H.: Rôle potentiel de l'homo- et l'hétéro-dimérisation du récepteur de l'urotensine II dans la prolifération astrocytaire. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009.
51. Doan, N.D., Bourgault, S., Chatenet, D., Vaudry, D., Vaudry, H. and Fournier, A.: Structure-activity relationship studies of N-terminal domain of PACAP. 5th International Symposium on Peptide Receptors and Kinin 2009, Québec, Canada, June 26-30, 2009, Abst. n° P4.
52. Do-Rego, J.L., Moon, M.J., Haraguchi, S., Hasunuma, I., Luu-The, V., Pelletier, G., Tsutsui, K., Seong, J.Y. and Vaudry, H.: Neurosteroidogenesis in the frog brain: regulation by neuropeptides related to arginine vasotocin and corticotrophin-releasing hormone. 16th International Congress of Comparative Endocrinology, Hong Kong, June 22-26, 2009, Abst. n° PL2.
53. Do-Rego, J.L. Bruzzone, F., Luu-The, V., Pelletier, G., Vallarino, M. and Vaudry, H.: Immunohistochemical localization and biological activity of 3 β -hydroxysteroid dehydrogenase (3 β -HSD) and 5 α -reductase (5 α -R) in the brain of the frog, *Rana esculenta*, during development. 5th International Symposium on Amphibian and Reptilian Endocrinology and Neurobiology, Berlin, September 20-23, 2009, Abst. n° PP12.
54. Do-Rego, J.L., Haraguchi, S., Moon, M.J., Koyama, T., Hasunuma, I., Luu-The, V., Pelletier, G., Seong, J.Y., Tsutsui, K. and Vaudry, H.: Regulation of neurosteroid biosynthesis in the frog brain. Involvement of

- corticotrophin-releasing hormone and related peptides. 5th International Symposium on Amphibian and Reptilian Endocrinology and Neurobiology, Berlin, September 20-23, 2009, Abst. n° PP14.
55. Dubois, M., Roy, V., Gandolfo, M., Joly, F., Hilber, P. and Castel, H.: Impact d'une chimiothérapie sur les fonctions cognitives et la plasticité cérébrale chez la souris.. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009.
56. Duparc, C., Louiset, E., Perraudin, V., Gobet, F., Meatchi, T., Plouin, P.F., Zennaro, M.C. and Lefebvre, H.: Immunohistochemical characterization of mast cells in aldosterone-producing adenoma. International Aldosterone Conference, Washington DC, USA, June 8-9, 2009.
57. Elias, S., Marais, S., Delestre, C., Gasman, S., Malagon, M.M., Anouar, Y. and Montéro-Hadjadje, M. : Etude fonctionnelle du trafic intracellulaire et de l'exocytose des granules de sécrétion induits par l'expression de la chromogranine A dans les cellules non-endocrines COS-7. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009.
58. Fauquembergue, E., Toutirais, O., Tougeron, D., Drouet, A., Iero, M., Rivoltini, L., Baert-desurmont, S., Leprince, J., Vaudry, H., Sesboué, R., Frébourg, T., Latouche, J.B. and Catros, V. : L'antigène carcino-embryonnaire n'est pas une cible appropriée pour l'immunothérapie basée sur le transfert de lymphocytes T spécifiques. 2èmes Journées Scientifique du Cancéropôle Nord-Ouest, Le Tronquet Paris-Plage, 5-6 mai 2009.
59. Fauquembergue, E., Toutirais, O., Tougeron, D., Drouet, A., Iero, M., Rivoltini, L., Baert-Desurmont, S., Leprince, J., Vaudry, H., Sesboué, R., Frébourg, T., Latouche, J.B. and Castro, V.: L'antigène carcino-embryonnaire n'est pas une cible appropriée pour l'immunothérapie basée sur le transfert de lymphocytes T spécifiques. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009, Abst. n° P25.
60. Fauquembergue, E., Toutirais, O., Tougeron, D., Drouet, A., Iero, M., Rivoltini, L., Baert-Desurmont, S., Leprince, J., Vaudry, H., Sesboué, R., Frébourg, T., Latouche, J.B. and Catros, V. : Human carcinoembryonic antigen is not a suitable target for T cell-based immunotherapy. 8th Annual Meeting of the French Society of Cell and Gene Therapy, Paris, June 21-23, 2009, Abst. n° P22. Hum. Gene Ther. 20:678, 2009.
61. Glinel, K., Jonas, A.M., Jouenne, T., Leprince, J., Galas, L. and Huck, Z.T.S.: Non adhesive polymer brush-nanocoatings modified by a natural antimicrobial peptide. 237th American Chemical Society National Meeting, Salt Lake City, Utah, USA, March 22-26, 2009.
62. Guérin, M., Guillemot, J., Elias, S., Thouënnon, E., Montero-Hadjadje, M., Leprince, J., Cailleux, A-F., Weber, J., Kuhn, J-M., Fréger, P., Anouar, Y. and Yon L.: The EM66 peptide, a marker of neuroendocrine TUMORS: application for the diagnosis of pituitary gonadotroph adenoma. 12ème Journée de l'EdNBISE, Rouen, 20 mars 2009.
63. Guérin, M., Guillemot, J., Elias, S., Cailleux, A-F., Barlier, A., Thouënnon, E., Montero-Hadjadje, M., Leprince, J., Weber, J., Fréger, P., Kuhn, J-M., Anouar, Y. and Yon, L.: Intérêt de l'EM66, un peptide dérivé de la sécrétogranine II, en tant que marqueur diagnostique des adénomes hypophysaires. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009.
64. Guérin, M., Guillemot, J., Elias, S., Cailleux, A-F., Barlier, A., Thouënnon, E., Montero-Hadjadje, M., Leprince, J., Weber, J., Fréger, P., Kuhn, J-M., Anouar, Y. and Yon, L.: Etude du peptide EM66, un marqueur biologique des tumeurs neuroendocrines : distribution, caractérisation et intérêt pour le diagnostic des adénomes hypophysaires. 36ème Colloque de la SNE, Nice, 15-18 septembre 2009.
65. Hachem, R., Tokay, T., Masmoudi-Kouki, O., Gandolfo, P., Desrues, L., Leprince, J., Castel, H., Diallo, M., Amri, M., Vaudry, H. and Tonon, M.C.: Mechanisms involved in beta-amyloid peptide-induced endozepine release and astrocyte proliferation. 12ème Journée de l'EdNBISE, Rouen, 20 mars 2009.
66. Haraguchi, S., Koyama, T., Hasunuma, I., Yamamoto, K., Kikuyama, S., Do Rego, J.L., Vaudry, H. and Tsutsui, K.: Stress-induced regulation of the synthesis of the neurosteroid 7 α -hydroxypregnenolone stimulating locomotor activity in newts. 16th International Congress of Comparative Endocrinology, Hong Kong, June 22-26, 2009, Abst. n° P72.
67. Haraguchi, S., Koyama, T., Hasunuma, I., Yamamoto, K., Kikuyama, S., Do-Rego, J.L., Vaudry, H. and Tsutsui, K.: Stress-induced changes in the synthesis of 7 α -hydroxypregnenolone stimulating locomotor activity in newts. 5th International Symposium on Amphibian and Reptilian Endocrinology and Neurobiology, Berlin, September 20-23, 2009; Abst. n° PP15.

68. Jarry, M., Diallo, M., Desrues, L., Leprince, J., Vaudry, H., Tonon, M.C., Castel, H. and Gandolfo, P. : Comparison of the effects of urotensin II and its paralog urotensin II-related peptide on rat astrocyte activity. 12ème Journée de l'EdNBISE, Rouen, 20 mars 2009.
69. Jarry, M., Lecointre, C., Diallo, M., Schouft, M.T., Vaudry, H., Tonon, M.C., Compère, V., Langlois, O., Proust, F., Ouafik, L., Castel, H. and Gandolfo, P.: Effet potentiel du système urotensinergique sur le développement de tumeurs cérébrales. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009, Abst. n° P34.
70. Koyama, T., Haraguchi, S., Vaudry, H. and Tsutsui, K.: The role of melatonin in the regulation of diurnal changes in the synthesis of 7 alpha-hydroxypregnenolone stimulating locomotor activity in the newt brain. 6th International Symposium on Amphibian and Reptilian Endocrinology and Neurobiology, Berlin, September 20-23, 2009, Abst. n° PP16.
71. Lanfray, D., Ouellet, J., Arthaud, S., Pelletier, G., Vaudry, H., Tonon, M.C. and Morin, F.: Potential involvement of endozepines in central regulation of food intake by glucose. 12ème Journée de l'EdNBISE, Rouen, 20 mars 2009.
72. Lanfray, D., Ouellet, J., Arthaud, S., Pelletier, G., Vaudry, H., Tonon, M.C. and Morin, F.: Rôle des cellules gliales dans le glucosensing hypothalamique: implication des endozépines. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009, Abst. n° P37.
73. Lanfray, D., Ouellet, J., Arthaud, S., Pelletier, G., Vaudry, H., Tonon, M.C. and Morin, F.: Implication des cellules gliales dans le glucosensing hypthalamique: rôle des endozépines. 36ème Colloque de la Société de Neuroendocrinologie, Nice, 15-18 septembre 2009, Abst. N° 32.
74. Lecointre, C., Morin, F., Jarry, M., Desrues, L., Schouft, M.T., Lefebvre, T., Vaudry, H., Gandolfo, P., Tonon, M.C. and Castel, H.: Role of the urotensin II receptor in glioma. Involvement of tumoral stem cells. 12ème Journée de l'EdNBISE, Rouen, 20 mars 2009.
75. Lecointre, C., Morin, F., Jarry, M., Le Joncour, V., Desrues, L., Schouft, M.T., Lefebvre, T., Vaudry, H., Tonon, M.C., Langlois, O., Proust, F., Gandolfo, P. and Castel, H. : Rôle de l'urotensine II et des partenaires protéiques de l'UT dans la migration des cellules tumorales gliales. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009, Abst. n° O10.
76. Lefebvre, H., Duparc, C., Perraudin, V., Kuhn, J.M. and Louiset, E.: Autocrine/paracrine regulations of steroidogenesis in adrenocortical hyperplasias and tumors. 52emes Journées Internationales d'Endocrinologie Clinique Henri-Pierre Klotz, Paris 14-15 mai 2009.
77. Lefebvre, V., Fabis, F., Lescot-Fontaine, E., Sopkova-de Oliveira Santos, J., Lesnard, A., Dubessy, C., Vaudry, H., Bureau, R. and Rault, S.: The human urotensin II receptor: a target for the synthesis of new antagonists in treating vascular diseases. 12ème Journée de l'EdNBISE, Rouen, 20 mars 2009.
78. Leprince, J., Gutiérrez-Pascual, E., Martínez-Fuentes, A.J., Pinilla, L., Guilhaudis, L., Segalas-Milazzo, I., Tena-Sempere, M., Malagon, M.M., Castaño, J.P. and Vaudry, H.: Structure-activity relationship study of KiSS-10: identification of an antagonist of GPR54. 5th International Symposium on Peptide Receptors and Kinin 2009, Quebec, Canada, June 26-30, 2009, Abst. n° P6.
79. Letendre, J., Rocher, B., Durand, F., Vaudry, D., Chan, P., Vaudry, H. and Le Boulenger, F. : Modifications d'expression protéique dans les branchies de la moule bleue, *Mytilus edulis*, après exposition a un mélange de HAP : focus sur la major vault protein. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009 , Abst. n° P39.
80. Marais, S., Elias, S., Bénard, M., Anouar, Y. and Montero-Hadjadje, M.: Les techniques de microscopie au service de l'étude du trafic vésiculaire des cellules endocrines. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009.
81. Matsuda, K., Wada, K., Leprince, J., Tonon, M.C., Maruyama, K., Uchiyama, M. and Vaudry, H. : Effect of the diazepam-binding inhibitor-derived peptide, octadecaneuropeptide, on feeding and emotional behaviors in goldfish. 16th International Congress of Comparative Endocrinology, Hong Kong, June 22-26, 2009, Abst. n° P-77.
82. Montero-Hadjadje, M., Elias, S., Marais, S., Delestre, C., Chevalier, L., Bénard, M., Driouich, A., Malagon, M.M., Gasman, S. and Anouar, Y.: Chromogranine A et mécanismes intracellulaires de la sécrétion hormonale dans les cellules neuroendocrines. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009.

83. Moon, E.S., Hwang, J.I., Vaudry, H., Tsutsui, K. and Seong, J.Y.: Comparative genomics to discover novel neuropeptides and their receptors. 16th International Congress of Comparative Endocrinology, Hong Kong, June 22-26, 2009, Abst. n° PL-3.
84. Perrot, V., Chartrel, N., Alexandre, D., Jeandel, L. and Anouar, Y. : REST, an important player in neuroendocrine differentiation of prostate cancer? 36ème Colloque de la SNE, Nice, 15-18 septembre 2009.
85. Raoult, E., Bénard, M., Roussel, B., Lefebvre, T., Vivien, D., Fournier, A., Vaudry, H., Vaudry, D. and Galas, L.: Effect of PACAP and tPA on the migration of rat cerebellar granule cells. 12ème Journée de l'EdNBISE, Rouen, 20 mars 2009.
86. Raoult, E. Bénard, M., Komuro, H., Roussel, B., Lefebvre, T., Vivien, D., Fournier, A., Vaudry, H., Vaudry, D. and Galas, L.: Migration des cellules en grain du cervelet au cours du développement: implication du PACAP et du tPA. 15ème Journée Scientifique de l'IFRMP 23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009, Abst. n° O5.
87. Thouënon, E., Guillemot, J., Pierre, A., Ghzili, H., Guérin, M., Elkahlon, A., Gimenez-Roqueplo, A-P, Bertherat, J., lefebvre, H., Plouin, P-F, Yon, L. and Anouar, A.: Caractérisation moléculaire d'une tumeur neuroendocrine : développement de nouveaux outils pour le diagnostic et le pronostic des phéochromocytomes. 2èmes Journées scientifiques du Cancéropôle Nord-Ouest, Le Touquet, 5-6 mai 2009.
88. Tsutsui, K., Matsunaga, M., Haraguchi, S., Koyama, T., Do-Rego, J.L. and Vaudry, H.: Identification of a novel bioactive amphibian neurosteroid, 7 α -hydroxypregnenolone, and its role in the regulation of the diurnal rhythms of locomotor activity in newts. 5th International Symposium on Amphibian and Reptilian Endocrinology and Neurobiology, Berlin, September 20-23, 2009, Abst. n° OP18.
89. Um, H.N., Tsunekawa, K., Hwang, J.I., Vaudry, H., Tsutsui, K. and Seong, J.Y. : Molecular evolution of multiple forms of kisspeptins and GPR54 receptors in vertebrates. 16th International Congress of Comparative Endocrinology, Hong Kong, June 22-26, 2009, Abst. n° P4.
90. Vaudry, D. : Caractérisation d'effets du PACAP in vivo et développement d'analogues à visée thérapeutique. Hôpital Saint Antoine, Paris, France, April 9, 2009
91. Vaudry, D., Bourgault, S., Dejda, A., Botia, B., Vaudry, H. and Fournier, A.: Development of PACAP analogs with improved metabolic stability 9ème Colloque de la Société des Neurosciences, Bordeaux, 26-29 mai 2009.
92. Vaudry, D., Bourgault, S., Dejda, A., Botia, B., Dejda, A., Basille, M., Jolivel, V., Bénard, M., Couvineau, A., Laburthe, M., Fournier, A. and Vaudry, H. : Characterization of the neurotrophic effects of PACAP and development of new analogs for therapeutic applications. 5th International Symposium on Peptide Receptors and Kinin 2009, Québec, Canada, June 26- 30, 2009, Abst. n° O41.
93. Vaudry, D., Bourgault, S., Dejda, A., Botia, B., Vaudry, H. and Fournier, A.: Development of PACAP analogs with improved metabolic stability for therapeutic applications. 36ème Colloque de la Société de Neuroendocrinologie Expérimentale, Nice, 15-18 septembre 2009, Abst. n° 49.
94. Vaudry, H.: Identification de nouveaux neuropeptides par une approche comparative. 2ème Colloque Annuel de l'IFR148 ScInBioS, Brest, 18 mai 2009.
95. Vaudry, H., Leprince, J., Tonon, M.C. and Conlon, J.M.: Of frogs and men: following Vittorio Erspamer's and Tindaro Renda's footsteps. XXXIIIrd Congress of the Italian Society of Histochemistry, Roma, Italy, June 8-10, 2009.
96. Vaudry, H., Do-Rego, J.C., Le Marec, O., Neveu, C., Lefranc, B., Matsuda, K., Tsutsui, K., Costentin, J. and Leprince, J.: Characterization of a novel neuropeptide from the frog brain that exerts an orexigenic action in mammals. 16th International Congress of Comparative Endocrinology, Hong Kong, June 22-26, 2009, Abst. n° S5-2.
97. Vaudry, H., Leprince, J., Le Marec, O., Neveu, C. and Conlon, J.M.: Comparative neuropeptidomics: the singular contribution of amphibians to the discovery of mammalian neuropeptides. 34th FEBS Congress, Prague, Czech Republic, July 4-9, 2009, Abst. n° IL2.2-2.

Conférences et séminaires

1. VAUDRY H.: « Stratégie d'identification d'un nouveau neuropeptide ». 25ème Congrès de la Société Française d'Endocrinologie, Lille, 1er-4 octobre 2008.
2. VAUDRY H. : « The discovery of novel bioactive peptides, lessons from animals for endocrinology ». 13th International Congress of Endocrinology, Rio de Janeiro, Brazil, November 8-12, 2008.
3. VAUDRY H.: « From frog to human: the singular contribution of amphibians to the discovery of mammalian neuropeptides ». 33rd Annual Meeting of the Japan Society of Comparative Endocrinology, Hiroshima, Japan, December 5-6, 2008.
4. VAUDRY D.: « Effets du PACAP sur la survie et la migration des cellules en grain du cervelet », UMR Inserm U842, Lyon, 12 janvier 2009.
5. VAUDRY D. : « Caractérisation d'effets du PACAP in vivo et développement d'analogues à visée thérapeutique. Hôpital Saint-Antoine, Paris, 9 avril 2009.
6. VAUDRY H.: « Identification de nouveaux neuropeptides par une approche comparative ». 2ème Colloque de l'IFR148 ScInBioS, Brest, 18 mai 2009.
7. VAUDRY H.: « Of Frogs and Men: Following Vittorio Erspamer's and Tindaro Renda's footsteps ». 33rd Congress of the Italian Society of Histochemistry, Roma, Italy, June 7-10, 2009.
8. VAUDRY H.: « Characterization of a novel orexigenic neuropeptide from the frog brain ». 16th International Congress of Comparative Endocrinology, Hong Kong, June 22-26, 2009.
9. VAUDRY D.: « Characterization of the neurotrophic effects of PACAP and development of new analogs for therapeutic applications ». 5th International Symposium on Peptide Receptors and Kinin 2009, Québec, Canada, June 26-30, 2009.
10. VAUDRY H.: « Comparative neuropeptidomics: the singular contribution of amphibians to the discovery of novel mammalian neuropeptides ». 34th FEBS Congress, Prague, Czech Republic, July 4-9, 2009.

Thèses

1. THOREL Nathalie : Rôle du complément dans la réaction inflammatoire gliale. Contribution à l'étude du CR2.CD21 et du GPR176. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neurosciences, 15 janvier 2009.
2. GUTIEREZ PASCUAL Ester : Mecanismos celulares y moleculare de acción del sistema kiss1/kiss1r. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neurosciences, 13 mars 2009.
3. JOLIVEL, Valérie: Contribution à l'étude des effets neuroprotecteurs du PACAP e caractérisation d'une sonde fluorescente pour mesurer l'activité caspase-3 in vivo après ischémie cérébrale. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neuroscience, 19 juin 2009.
4. CRUZ-GARCIA David : Identification and characterization of novel proteins involved in the regulated secretion of (neuro)endocrine cells. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neurosciences, 15 juillet 2009.
5. BOTIA Béatrice : Etude des mécanismes cellulaires et moléculaires impliqués dans les effets neuroprotecteurs du PACAP sur la mort neuronale induite par l'éthanol au cours du développement du cervelet de rat. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neurosciences, 7 septembre 2009.

Masters

1. MANECKA Destiny-Love : Implication du facteur de transcription nuclear factor of kappa light chain enhancer in b-cell dans la différenciation des cellules de pheochromocytome de rat.
2. MARDARGENT Aurélie : Caractérisation d'un nouveau neuropeptide de type IFamide chez les mammifères.
3. MOUEZA Nicolas : Etude de la région promotrice du gène de l'Ull dans les motoneurones sacrés.
4. NEVEU Cindy : Etude pharmacochimique du 26RFa.
5. TARDIVEL Nicolas : Régulation de la fonction corticotrope par l'urotensine II.

4. IRCOF (Institut de Recherche en Chimie Organique Fine de Rouen)

Localisation : Rouen

Site Web : <http://ircof.crihan.fr/>

Remarque : de nombreux chercheurs de l'IRCOF utilisent également les ressources de modélisation numérique. Les activités liées aux projets scientifiques 2004004, 2005002, 2005013 et 2008002 figurent en première partie de ce document.

5. IRCOF -UMR CNRS 6014 - ECOBS (Laboratoire de Chimie Organique et Biologie Structurale)

Localisation : Rouen

Source des informations : Isabelle Segalas-Milazzo

Site Web : <http://ircof.crihan.fr/ECOBS.htm>

Durant la période octobre 2008-novembre 2009, l'équipe RMN et Modélisation Moléculaire du Laboratoire de Chimie Organique et Biologie Structurale (LCOBS) de l'UMR CNRS 6014 comprenait 2 Professeurs, 3 Maîtres de Conférences, 4 Doctorants et 1 étudiant de Master Professionnel qui utilisent ou ont utilisé quotidiennement la Modélisation Moléculaire dans leurs activités de recherche. Celles-ci portent principalement sur l'étude structurale de molécules organiques et bio-organiques en solution et les logiciels mis à disposition par le CRIHAN sont utilisés pour les tâches suivantes:

le traitement et analyse de spectres RMN à l'aide du logiciel FELIX (Accelrys)

le calcul de structures sous contraintes RMN à l'aide du logiciel CNX (Accelrys)

l'analyse des structures obtenues à l'aide des logiciels CNX (Accelrys) et SYBYL (Tripos)

la représentation par les logiciels CERIOUS2 (Accelrys) et SYBYL (Tripos) des interactions RMN sur les modèles obtenus dans les études structurales en chimie organique

des calculs théoriques semi-empiriques à l'aide du logiciel Jaguar (Schrödinger) et représentation par le logiciel MOLDEN

Publications

1. Molecular and conformational determinants of pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide (PACAP) for activation of the PAC1 receptor.
S. BOURGAULT, D. VAUDRY, I. SEGALAS-MILAZZO, I. GUILHAUDIS, A. COUVINEAU, M. LABURTHER, H. VAUDRY & A. FOURNIER
J. Med. Chem. (2009) 52, 3308-3316
2. In vivo and in vitro structure-activity relationships and structural conformation of Kisspeptin-10-related peptides.
E. GUTIERREZ-PASCAL, J. LEPRINCE, A. J. FUENTES, I. SEGALAS-MILAZZO, R. PINEDA, J. ROA, M. DURAN-PRADO, L. GUILHAUDIS, E. DESPERROIS, A. LEBRETON, L. PINILLA, M. C. TONON, M. M. MALAGON, H. VAUDRY, M. TENA-SEMPERE & J. P. CASTANO
Mol. Pharmacol. (2009) 76, 58-67
3. Shuffling lithiated mixed aggregates: NMR and Car-Parrinello molecular dynamics reveal an unexpected associative pathway.
F. Paté, H. Gérard, H. Oulyadi, A. de la Lande, A. Harrison-Marchand, O. Parisel & J. Maddaluno
Chem. Commun. (Camb.) (2009) 3, 319-21
4. Enantioselective conjugate addition of a lithium ester enolate catalyzed by chiral lithium amides: a possible intermediate characterized.
B. Lecachey, N. Duguet, H. Oulyadi, C. Fressigne, A. Harrison-Marchand, Y. Yamamoto, K. Tomioka, J. Maddaluno
Org. Lett. (2009) 11, 1907-10.
5. Study of Interaction between Tiagabine HCl and 2-HP β CD: Investigation of Inclusion Process.
A. SUGHIR, M. SKIBA, P. LAMEIRAS, G. COADOU, M. LAHIANI-SKIBA & H. OULYADI
J. Incl. Phenom. & Macro. Chem. (2009) sous presse

Communications

1. Réactivité des amidures de lithium chiraux : interprétation mécanistique des inductions observées par RMN multinoyaux.
H. OULYADI
2ème Séminaire « UMR6014-JANSSEN/CILAG : Un Partenariat Durable » - Université de Rouen - IRCOF - 24 septembre 2009
2. Réactivité des amidures de lithium chiraux : interprétation mécanistique des inductions observées par RMN multinoyaux
H. OULYADI
Séminaire à l'Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay (ICMMO) - Université d'Orsay Paris XI - 17 novembre 2009

Affiches

1. Aza- β 3 pseudopeptidic analogs of 26RFa: functional and binding assays.
C. Neveu, O. Le Marec, O. Tasseau, B. Lefranc, J. Sopkova De Oliveira Santos, L. Guilhaudis, R. Bureau, I. Segalas-Milazzo, S. Rault, M. Baudy-Floc'h, H. Vaudry & J. Leprince
13th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience network (Caen, France, 30 octobre 2009).
2. Étude structurale de la boucle extra-cellulaire III du récepteur de l'Urotensine II humain (h-UT) par RMN et Modélisation Moléculaire.
J. Rey, L. Guilhaudis, G. Coadou, D. Chatenet, A. Fournier, I. Ségalas-Milazzo
15ème journée de l'IFRMP23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009
3. Molecular and conformational determinants of Pituitary Cyclase-Activating Polypeptide (PACAP) for activation of the PAC1 receptor.
S. BOURGAULT, D. VAUDRY, I. Ségalas-Milazzo, L. Guilhaudis, A. COUVINEAU, M. LABURTHER, H. VAUDRY & A. Fournier,
15ème journée de l'IFRMP23, Mont-Saint-Aignan, 5 juin 2009
4. Etude structurale comparée de la Kisspeptine-10 et d'analogues.
L. GUILHAUDIS, E. DESPERROIS, A. LEBRETON, J. LEPRINCE, E. GUTIERREZ-PASCAL, A. J. FUENTES, R. PINEDA, J. ROA, M. DURAN-PRADO, L. PINILLA, M. M. MALAGON, M. TENA-SEMPERE, J. P. CASTANO, M. C. TONON, H. VAUDRY & I. SEGALAS-MILAZZO
16ème Congrès du Groupe Français des Peptides et Protéines (Albé, France, 10-15 mai 2009).
5. Etude pharmacochimique du 26RFa: relations structure-activité d'une série d'aza- β 3-pseudopeptides.
C. Neveu, O. Le Marec, O. Tasseau, B. Lefranc, L. Guilhaudis, I. Ségalas-Milazzo, M. Tena-Sempere, M. C. Tonon, M. Baudy-Floc'h, H. Vaudry & J. Leprince.
16ème Congrès du Groupe Français des Peptides et Protéines (Albé, France, 10-15 mai 2009).
6. Etude de la relation structure-activité d'analogues μ -opioïdes de l'Endomorphine-2 et de la Morphiceptine par RMN, modélisation moléculaire et docking.
P. Lameiras, G. Coadou, J. Grosjean, L. Guilhaudis, I. Ségalas-Milazzo, J. C. Do Rego, J. Fichna, J. Costentin, A. Janecka & H. Oulyadi
16ème Congrès du Groupe Français des Peptides et Protéines (Albé, France, 10-15 mai 2009).
7. Etude de la relation structure-activité d'analogues μ -opioïdes de l'Endomorphine-2 et de la Morphiceptine par RMN, modélisation moléculaire et docking.
P. Lameiras, G. Coadou, J. Grosjean, J. C. Do Rego, J. Fichna, J. Costentin, A. Janecka & H. Oulyadi
XXIème Congrès du Groupe d'Etude Résonance Magnétique (Fréjus, France, 8-13 mars 2009).

Thèses

Au laboratoire :

1. Pedro LAMEIRAS (thèse soutenue le 05 décembre 2008)
«Etude des relations structure-activité de peptides μ -opioïdes endogènes (endomorphine-2, morphiceptine) et ses dérivés».
2. Julien REY (soutenance prévue en 2011)
«Caractérisation des interactions Urotensine-II (UII) / récepteur UT humain (hUT) par Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) et Modélisation Moléculaire».

En co-direction :

1. Abdussalam SUGHIR (thèse soutenue le 10 novembre 2009)
« Etude par RMN et modélisation moléculaire du complexe tiagabine/HP β -CD ». Collaboration avec le Laboratoire de galénique, Faculté de pharmacie de l'Université de Rouen.
2. Baptiste LECACHEY (soutenance le 14 décembre 2009)
« Etude structurale d'agrégats mixtes organolithiés par RMN multinoyaux ¹H/⁶Li/¹³C/¹⁵N. Application en additions nucléophiles énantiosélectives 1,2 ».
3. Gabriella BAROZZINI (soutenance prévue en 2010)
« Structural study of Lithium Phosphide by multinuclear {¹H,¹³C,¹¹B,³¹P} NMR study and Molecular Modeling ».

Master

1. Julien GROSJEAN (étudiant/apprenti en alternance sur 2 ans) en Master 2 Professionnel (septembre 2007 – août 2009)
« Conception et développement d'applications dédiées à la biologie structurale et à la chimie organique ».

Collaborations

Régionales:

1. Laboratoire de neuroendocrinologie cellulaire et moléculaire, INSERM U413, Rouen
2. Laboratoire de neuropsychopharmacologie expérimentale, UFR de médecine et pharmacie, Université de Rouen
3. Laboratoire de galénique, UFR de médecine et pharmacie, Université de Rouen
4. Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie (CERMN), UPRES EA 4258, Caen
5. Laboratoire de Chimie Moléculaire et Thio-organique (LCMT), UMR 6507 CNRS, Université de Caen

Nationales:

1. Laboratoire de Biologie Structurale et Radiobiologie (LBSR), IBITEC, CEA, Saclay
2. Laboratoire de Chimie Théorique (LCT), UMR 7616 CNRS, Université P. & M. Curie, Paris

Internationales:

1. Laboratoire d'Etudes Moléculaires et Pharmacologiques des Peptides, INRS – Institut Armand Frappier, Montréal (CANADA)
2. Laboratoire de chimie biomoléculaire, Université de médecine de Lodz (POLOGNE)
3. Département de Chimie Organique, Université de Florence (ITALIE)

Appréciation du service

Notre équipe apprécie grandement la mise à disposition par le CRIHAN de nombreux outils précieux pour l'analyse d'expériences RMN et la Modélisation Moléculaire. Elle a ainsi apprécié l'acquisition de nouveaux logiciels dédiés à l'étude d'interactions ligand/récepteur. Elle apprécie également la mise à disposition de ressources de technologie Web avancée, les ateliers de présentation avec les éditeurs de logiciels ainsi que l'aide à l'installation de logiciels particuliers utiles pour nos activités.

6. IRCOF UPRES EA 3233 - SMS (Sciences et Méthodes Séparatives)

Localisation : Rouen

Source des informations : Samuel Petit

Site Web : http://www.univ-rouen.fr/LSMS/0/fiche_SGR_structure/

Au sein de l'équipe 'Sciences et Méthodes Séparatives', l'Unité de Croissance Cristalline et de Modélisation Moléculaire (2 Professeurs, 2 Maîtres de Conférences, 2 Ingénieurs de Recherches et environ 12 doctorants) est spécialisée dans le développement de méthodes de cristallisation de composés organiques et

pharmaceutiques. Cette thématique relevant des matériaux moléculaires se décline selon plusieurs aspects complémentaires.

La compréhension des mécanismes de croissance cristalline en solution et le contrôle de la morphologie, c'est-à-dire la forme et l'aspect des particules macroscopiques.

La caractérisation des phases solides (cristallines ou amorphes) au moyen de méthodes physiques comme la diffraction X sur poudre, l'analyse thermique, la microscopie optique ou électronique, la granulométrie, etc.

La gestion du polymorphisme, correspondant à la possibilité d'obtenir plusieurs variétés cristallines distinctes pour une même entité chimique, conduisant à des propriétés physico-chimiques différentes, ainsi que la formation de solvates, composés définis dans lesquels des molécules de solvant co-cristallisent avec le soluté.

L'étude des transitions solide-solide pouvant survenir sous l'effet de conditions opératoires spécifiques, comme un chauffage ou un recuit, un séchage, un broyage, etc.

La mise au point de méthodes préparatives de résolution chirale, c'est-à-dire de séparation des deux énantiomères contenus dans un mélange racémique, et l'étude des phénomènes associés de stéréosélectivité et de discrimination chirale.

Pour la rationalisation de ces différents aspects, la préparation de monocristaux puis la détermination des structures cristallines par diffraction X constituent une méthode de choix dans la mesure où la connaissance de l'état d'organisation à l'échelle moléculaire permet de mieux appréhender les phénomènes et comportements observés à l'échelle macroscopique.

Dans le cadre des activités de recherche résumées ci-dessus, les outils de modélisation moléculaire sont utilisés de façon systématique dès lors qu'une ou plusieurs structures cristallines d'un composé organique ou pharmaceutique ont pu être déterminées expérimentalement.

Les logiciels Materials Studio (ex-Cerius2, Sté Accelrys) et Sybyl (Sté Tripos) nous permettent en effet :

- de vérifier la représentativité des monocristaux par simulation et comparaison des diagrammes de diffraction X sur poudre ;
- de décrire les édifices cristallins et de réaliser des supports visuels de grande qualité pour les articles scientifiques et les communications lors de congrès, colloques, conférences-invités, etc. ;
- d'analyser, dans le cas d'un polymorphisme ou de solvates, les interactions intermoléculaires fines dans les structures pour établir les fondements de la cohésion cristalline ;
- d'élaborer des hypothèses concernant les bases moléculaires de la discrimination chirale et de la stéréosélectivité à l'état cristallisé ;
- d'étudier les mécanismes de croissance cristalline par des approches quantitatives faisant appel à des calculs d'énergies de réseau ou d'interactions entre tranches cristallines.

En conséquence, les outils qui nous sont le plus utiles pour ces applications sont essentiellement des modules de Materials Studio relatifs à la cristallisation et à l'étude des structures. Pour l'avenir, un progrès important serait l'acquisition par le CRIHAN (par abonnement annuel) de la banque de données structurales CSD (Cambridge Structural Database), distribuée par le CCDC (Cambridge Crystallographic Data Center), et qui peut être interfacée avec Materials Studio.

Publications

1. Mechanism of hydration and dehydration of Ciclopirox ethanolamine (1:1)
L. Renou, S. Coste, Y. Cartigny, M.-N. Petit, C. Vincent, J.-M. Schneider, G. Coquerel
Cryst. Growth Des., 2009, 9, 3918-3927
2. Structural studies of several solvated potassium salts of tenatoprazole crystallizing as conglomerates
G. Tauvel, M. Sanselme, S. Coste-Leconte, S. Petit, G. Coquerel
J. Mol. Struct., 2009, 936, 60-66
3. Structural and physico-chemical characterization of a solid solution produced by antisolvent crystallization of a new phosphoantigen'
G. Descamps, Y. Cartigny, M. Sanselme, M.-N. Petit, S. Petit, E. Aubin, G. Coquerel
Cryst. Growth Des., 2009, 9, 3910-3917

4. Two concomitant polymorphs of 1,2-naphthoquinone-2-semicarbazone
V. Dureisseix, M. Sanselme, Y. Robin, G. Coquerel
Cryst. Growth Des., 2009, 9, 3438-3443
5. New and Expeditious Tandem Sequence Aza-Michael/Intramolecular Nucleophilic Substitution Route to Substituted γ -Lactams: Synthesis of the Tricyclic Core of (\pm)-Martinellines
S. Comesse, M. Sanselme, A. Daich
J. Org. Chem., 2008, 74(14) 5566
6. Preferential crystallization (AS3PC mode) of modafinic acid: an example of productivity enhancement by addition of a non-chiral base
N. Wermester, O. Lambert, G. Coquerel
CrystEngComm, 2008, 10, 724-733
7. "The nanoscale aspects of Chirality in Crystal Growth Structure and Heterogeneous Equilibria" (chapitre d'ouvrage, 36 pages)
G. Coquerel, D. B. Amabilino
in Chirality at the nanoscale, Ed. D.B. Amabilino, Ed. Wiley-VCH Verlag: Weinheim, 2009; pp. 305-341

Thèses

1. VINCENT Catherine (Janvier 2009)
Directeur G. Coquerel
Synthèse industrielle du Ciclopirox Olamine. Apport des connaissances des équilibres entre phases dans le développement industriel d'un principe actif
2. LINOL Julie (Novembre 2008)
Directeur G. Coquerel
Influence du broyage haute énergie sur quelques composés organiques. Sur l'existence d'un point critique dynamique

Communications

1. On possible relationships between $Z' > 1$ and polymorphism
J. Linol, G. Coquerel
BIWIC-16, Lappeenranta (Finland), Septembre 2009, ISBN 978-952-214-806-3, p.239-244
2. Preferential crystallization via a metastable conglomerate
G. Levillain, G. Coquerel
BIWIC 15, Magdeburg (D), Octobre 2008, Abstract book ISBN 978-3-8322-7505-1, p. 36-41
3. Impact of crystal size, structural purity and processes on the unicity of the desolvation mechanism
S. Petit, G. Coquerel
XXXVème JEEP, Annecy, Avril 2009, Abstract book, p.61
4. Simplification of the landscape under high energy milling of molecular solids exhibiting polymorphism
J. Linol, G. Coquerel
XXXVème JEEP, Annecy, Avril 2009, Abstract book, p.60
5. Influence of solid-vapour equilibria on the stability of organic solids
N. Couvrat, Y. Cartigny, G. Coquerel
XXXVème JEEP, Annecy, Avril 2009, Abstract book, p.22
6. Hydration and dehydration of the pure enantiomer and the racemic compound of Phencyphos
F. Querniard, M. Leeman, Y. Cartigny, R.M. Kellog, E. Vlieg, G. Coquerel
XXXVème JEEP, Annecy, Avril 2009, Abstract book, p.72

Collaborations

1. Pr. Géraldine Gouhier, équipe LFAOC, IRCOF, Université de Rouen, UMR 6014
2. Dr. Eric Aubin, Société Innate Pharma, Marseille

Appréciation du service

Cette année encore, les membres du CRIHAN ont fait le nécessaire lors de nos sollicitations pour résoudre nos difficultés ou assurer la maintenance de nos outils de modélisation moléculaire dans des délais très satisfaisants. L'efficacité de ce service, ainsi que la diffusion de l'information en provenance des fournisseurs de logiciels, est fortement appréciée par notre équipe de recherche.

Par ailleurs, nous maintenons notre demande, déjà formulée lors des réunions d'utilisateurs du RNMM (comité de pilotage), concernant l'accès à la base de données structurales CSD (Cambridge Structural Database) qui peut être interfacée avec les logiciels de modélisation fournis par Accelrys.

7. UPRES EA 4358 - Glyco-MEV (Laboratoire de Glycobiologie et Matrice Extracellulaire Végétale)

Localisation : Rouen

Source des informations : Laurence Menu-Bouaouiche

Site Web : <http://www.univ-rouen.fr/Glyco-MEV/index.html>

Publication

1. Dedeurwaerder S, Menu-Bouaouiche L, Mareck A, Lerouge P, Guerineau F. Activity of an atypical *Arabidopsis thaliana* pectin methylesterase. *Planta*. 2009. 229(2):311-21.