

Rapport d'activité 2010

Recueil des publications des laboratoires utilisateurs du Pôle de Modélisation Numérique en 2009-2010

Référence du document - - 2010 - Révision 01 - Date de création 02/05/2011

Validation , 03/05/2011

Résumé :

-
200 -2010.

Révisions :

- 01 : 02/05/2011 (JCC)

Accessibilité

CRIHAN : **OUI**
EXTÉRIEURS : **OUI**
RESTREINT : **NON**

CRIHAN

Technopôle du Madrillet 745, avenue de l'Université 76800 SAINT-ÉTIENNE DU ROUVRAY
Tél. : 02 32 91 42 91 - Fax : 02 32 91 42 92 - mailto:crihan-admin@crihan.fr - www.crihan.fr
SIRET N° 383 599 990 00025 - CODE APE 7219Z

Introduction	5
Projets scientifiques expertisés	5
UPRES EA4258, INC3M FR CNRS 3038 - CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie)	5
<i>Projet : 2005004</i>	
UMR 6614 - CORIA (COMplexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie)	8
<i>Projet : 1998022</i>	
<i>Projet : 2008013</i>	
<i>Projet : 2002003</i>	
<i>Projet : 2003008</i>	
<i>Projet : 2006003</i>	
<i>Projet : 2006011 et 2006010</i>	
<i>Projet : 2008018</i>	
<i>Projet : 2009003</i>	
UMR CNRS 5210 - CRC (Centre de Recherches de Climatologie)	10
<i>Projet : 2009002</i>	
UMR CNRS 6634 - GPM (Groupe de Physique des Matériaux)	11
<i>Projets 2005003, 2006007, 2006008, 2007003, 2008001, 2010006</i>	
<i>Projet : 2005003</i>	
<i>Projet : 2006007</i>	
<i>Projet : 2006008</i>	
<i>Projet : 2007003</i>	
<i>Projet : 2008001</i>	
<i>Projet : 2010006</i>	
<i>Projet : 2003014</i>	
UMR 6089 - GSMA (Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique)	15
<i>Projet : 2005009</i>	
<i>Projet : 2008006</i>	
UMR 8182 - ICMMO (Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay)	15
<i>Projet : 2006013</i>	
UMR CNRS 6229 - ICMR (Institut de Chimie Moléculaire de Reims)	16

<i>Projet : 2005010</i>	
IRCOF (Institut de Recherche en Chimie Organique Fine de Rouen)	17
<i>Projet : 2004004</i>	
<i>Projet : 2005013</i>	
<i>Projet : 2008002</i>	
EA3226 - LMI (Laboratoire de Mathématiques de l'INSA de Rouen)	18
<i>Projet : 1998007</i>	
EA3828 - LMR (Laboratoire de Mécanique de Rouen)	19
<i>Projet : 2003006</i>	
UMR CNRS 8522, FR CNRS 2416 - PC2A (Laboratoire de PhysicoChimie des Processus de Combustion et l'Atmosphère)	20
<i>Projet : 2007001</i>	
UMR 8601 CNRS UFR Biomédicale INSERM - PMC (Laboratoire de Chimie Pharmacologique et Toxicologique)	20
<i>Projet : 1998053</i>	
UMR CNRS 6011 (Laboratoire de synthèse organique)	21
<i>Projet : 2002005</i>	
<i>Projet : 2008007</i>	
UMR CNRS 6614 - CORIA	22
<i>Projet : 2009005</i>	
UMR CNRS 8516 (Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman)	22
<i>Projet : 2008005</i>	
GPM UMR 6634 CNRS (Groupe de Physique des Matériaux)	23
<i>Projet : 2005014</i>	
<i>Projet 2008014</i>	
CIMAP (Centre de Recherche sur les Ions, les Matériaux et la Photonique)	24
<i>Projet : 2007007</i>	
<i>Projet : 2003009</i>	
UMR CNRS 7616 - LCT (Laboratoire de Chimie Théorique)	24
<i>Projet : 2008011</i>	
FRE-CNRS 3102 - LOMC (Laboratoire Ondes et Milieux Complexes)	24
<i>Projet : 2003013</i>	
<i>Projet : 2006015</i>	

UMR 8576 CNRS (Laboratoire Glycobiologie Structurale et Fonctionnelle) 25

Projet : 2007010

CRISMAT (Laboratoire de Cristallographie et Sciences des Matériaux) 25

Projet : 2007013

ECN - Ecole centrale de Nantes 25

Projet : 2008008

Projet : 2008009

LRPMN (Laboratoire de Recherche sur les Propriétés des Matériaux Nouveaux) 25

Projet : 2009007

Projet : 2007005

UPR 3079 - CEMHTI (Conditions Extrêmes et Matériaux : Haute Température et Irradiation) 25

Projet : 2009008

URCOM EA 3221 - INC3M CNRS FR-3038 26

Projet : 2010004

INSA - Département Energétique et Propulsion 26

Projet : 2010009

Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire 27

UPRES EA 3233 - Equipe SMS (Sciences et Méthodes Séparatives),) 27

UMR CNRS 6014 - COBRA (Equipe Analyse et Modélisation) 30

UPRES EA4258, INC3M FR CNRS 3038 - CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie) 33

UMR 6507 CNRS - LCMT (Laboratoire de Chimie Moléculaire et Thio-organique) 33

LEMA (Laboratoire d'Ecotoxicologie - Milieux Aquatiques) 33

A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIHAN sur la période octobre-2009 - septembre 2010.

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.

B. Projets scientifiques expertisés

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 utilisés 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 : 2005004Responsable de projet : **Ronan Bureau**Titre : **Découverte de nouveaux leaders par des approches structurales liées aux techniques de screening virtuel.****Publications**

1. Prediction of acute toxicity in fish by using QSAR methods and chemical modes of action. S. Lozano, E. Lescot, M.-P. Halm, A. Lepailleur, R. Bureau, S. Rault. *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 2010, 25(2), 195-203.
2. Review of 5-HT₄r ligands. State of art and clinical applications. R. Bureau, M. Boulouard, F. Dauphin, F. Lezoualc'h, S. Rault. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 2010, 10(5), 527-53.
3. Virtual screening discovery of new acetylcholinesterase inhibitors issued from CERMN chemical library. J. Sopkova-de Oliveira Santos, A. Lesnard, J.-H. Agondanou, N. Dupont, A.-M. Godard, S. Stiebing, C. Rochais, F. Fabis, P. Dallemagne, R. Bureau, S. Rault. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2010, 50(3), 422-428
4. Receptor- and ligand-based study on novel 2,2'-bithienyl derivatives as non-peptidic AANAT inhibitors. A. Lepailleur, S. Lemaitre, F. Xiao, J. Sopkova-de Oliveira Santos, P. Delagrangé, J. Boutin, P. Renard, R. Bureau, S. Rault. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2010, 50(3), 446-460.
5. Phe369(7.38) at Human 5-HT₇ Receptors Confers Interspecies Selectivity to Antagonists and Partial Agonists. T. Varin, H. Gutiérrez-de-Terán, M. Castro, J. Brea, F. Fabis, F. Dauphin, J. Aqvist, A. Lepailleur, P. Perez, J. Burgueño, J. Vela, M. Loza, J. Rodrigo. *British Journal of Pharmacology*, 2010, 159, 1069-1081.
6. Introduction of jumping fragments in combination with QSARs for the assessment of classification in ecotoxicology. Lozano, S.; Poezevara, G.; Halm-Lemeille, M.-P.; Lescot-Fontaine, E.; Lepailleur, A.; Bissel-Siders, R.; Crémilleux, B.; Rault, S.; Cuissart, B.; Bureau, R. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2010, 50(8), 1330-1339.
7. Synthesis of 3-amino-thiochromanes from 4-benzyl 2-thiazolines, via an unprecedented intramolecular electrophilic aromatic substitution. Mercey G., Legay R., Lohier J.-F., Sopkova-de Oliveira Santos J., Levillain J., Gaumont A.-C. Gulea M. *Organic and Biomolecular Chemistry*, 2010, 8, 2520-2522.

Communications par affiches

1. Dulin, F.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Leprince, J.; Guilhaudis, L.; Segalas-Milazzo, I.; Vaudry, H.; Bureau, R.; Rault, S. Research of non-peptidic ligands of the GPR103 Receptor implicated in eating disorder 3èmes RCBS ; 10 décembre 2009, Rouen.
2. Neveu, C.; Le Marec, O.; Tasseau, O.; Lefranc, B.; Do Régo, J.-C.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Guilhaudis, L.; Bureau, R.; Segalas-Milazzo, I.; Costentin, J.; Rault, S.; Baudy-Floc'h, M.; Vaudry, H.; Leprince, J. Etudes in vitro et in vivo du [Cmpi21,aza-β3-Hht23] 26RFa(21-26), un analogue pseudopeptidique du 26RFa 3èmes RCBS ; 10 décembre 2009, Rouen.

3. Abbaszadeh fard, E.; Halm, M.-P.; Serpentine, A.; Lebel, J.M.; Bureau, R. "In silico" and "in vitro" eco-toxicity evaluation of Polychlorinated biphenyls (PCB) on exploited marine species 3èmes RCBS ; 10 décembre 2009, Rouen.
4. Lepailleur, A.; Lemaître, S.; Feng, X.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Caignard, D.-H.; Pfeiffer, B.; Delagrangé, P.; Boutin, J.; Renard, P.; Bureau, R.; Rault, S. Receptor- and ligand-based study focused on novel bithiophene derivatives as non-peptidic AANAT inhibitors 3èmes RCBS ; 10 décembre 2009, Rouen.
5. Perato, S.; Burzicki, G.; Voisin-Chiret, A.-S.; Sopková-de Oliveira Santos, J.; Rault, S. Synthesis of potential small-molecule inhibitors of Bcl-2 family proteins and BH3-domain interactions 3èmes RCBS ; 10 décembre 2009, Rouen.
6. Burzicki, G.; Perato, S.; Voisin-Chiret, A.-S.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Rault, S. Regioselective synthesis of oligopyridines as potential inhibitors of Bcl-2 family protein interactions 17èmes JJC-SCT ; 5 février 2010, Paris.
7. Lozano, S.; Halm, M.-P.; Lepailleur, A.; Bureau, R.; Rault, S. Consensus QSAR model: application to acute toxicity in fish 13èmes JEDN-BISE ; 11-12 mai 2010, Deauville.
8. Lepailleur, A.; Lemaître, S.; Feng, X.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Delagrangé, P.; Boutin, J.; Renard, P.; Bureau, R.; Rault, S. Design, synthesis, pharmacological evaluation and molecular modeling studies of novel 2,2'-bithienyl derivatives as non-peptidic AANAT inhibitors 24èmes JFB ; 20-21 mai 2010, Bruxelles (Belgique).

Conférences invités / communications orales

1. Lozano, S.; Lescot-Fontaine, E.; Halm, M.-P.; Lepailleur, A.; Bureau, R.; Rault, S. Classification des composés et prédiction de toxicité pour les organismes aquatiques 1ère JUFSP ; 5 novembre 2009, Caen.
2. Dulin, F.; Halm, M.-P., Lepailleur, A.; Bureau, R.; Rault, S. Développement d'une base de données et d'outils prédictifs pour l'évaluation de la toxicité des produits phytosanitaires vis-à-vis des abeilles 2èmes JSA ; 18 mars 2010, Nantes.

Thèses

1. 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 Emergence (Innotox2) : collaboration GREYC UMR 6072 et UMRM100 (UCBN).

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).

et greffage des nanotubes de carbone

2. 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 : **Ecoulements Turbulents Compressibles**

Projet : 2008013

Responsable de projet : **Yves d'Angelo**

Titre : **INTERMAC : simulation numérique directe de l'interaction flamme-paroi.**

Projet : 2002003

Responsable de projet : **Claude Rozé**

Source des informations : **Thierry Girasole**

Titre : **Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses.**

Projet : 2003008

Responsable de projet : **Alain Berlemont**

Titre : **Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray.**

Publications

1. J. Chesnel, J. Réveillon, T. Ménard, A. Berlemont and F.X. Demoulin Large Eddy Simulation of liquid atomization : From the resolved scales to subgrid spray ICMF 2010, Tampa, FL USA, May 30-June 4, 2010
2. G. Luret, T. Ménard, A. Berlemont, J. Réveillon and F.X. Demoulin A DNS study ranging from dense to dilute turbulent two-phase flows ICMF 2010, Tampa, FL USA, May 30-June 4, 2010
3. T. Ménard, S. Idlahcen, J.B. Blaisot, C. Rozé, A. Berlemont, T. Girasole, L. Méès Numerical simulation of optical diagnostics and comparisons to experiments* ICMF 2010, Tampa, FL USA, May 30-June 4, 2010
4. A. Berlemont, J. Cousin, S. Grout and T. Menard A numerical investigation of the coupling between primary breakup and internal flow: study of the behavior of a triple disk FEDSM2010-ICNMM2010 August 1-5, Montreal, Canada, 2010.

Projet : 2006003

Responsable de projet : **Pascale Domingo**

Titre : **Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.**

Publications

1. D. Veynante, G. Lodato, P. Domingo, L. Vervisch, E. R. Hawkes (2010) Estimation of three-dimensional flame surface densities from planar images in turbulent premixed combustion, Exp. in Fluids, 49:267-278.
2. L. Vervisch, P. Domingo, G. Lodato, D. Veynante (2010) Scalar energy fluctuations in Large-Eddy Simulation of turbulent flames: Statistical budgets and mesh quality criterion, Combust. Flame 157(4): 778-789.
3. V. Subramanian, P. Domingo, L. Vervisch (2010) Large-Eddy Simulation of forced ignition of an annular bluff-body burner, Combust. Flame 157(3): 579-601.

4. M. Belhi, P. Domingo, P. Vervisch (2010) Direct numerical simulation of the effect of an electric field on flame stability, *Combust. Flame* <http://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2010.07.007>

Communications

1. Merlin, C., P. Domingo, L. Vervisch, (2010) Immersed Boundaries in Large-Eddy Simulation of a transonic cavity flow, *Direct and Large-Eddy Simulation 8*, July 7-9, Eindhoven, The Netherlands.
2. Enjalbert N., P. Domingo, L. Vervisch, (2010) Flow-controlled detailed chemistry tabulation for Large-Eddy Simulation of non-premixed turbulent combustion, *ETMM8: 8th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements 9 - 11 June 2010*, Marseille, France.
3. Merlin, C., P. Domingo, L. Vervisch, (2010) Immerse boundaries in Large-Eddy Simulation of fully compressible flows: Application to transonic cavity flow in perspective of flame stabilization behind obstacles, *ETMM8: 8th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements 9 - 11 June 2010*, Marseille, France.
4. Enjalbert N., P. Domingo, L. Vervisch, (2010) A flow-controlled chemistry tabulation method for LES of turbulent combustion with detailed chemistry, *V European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2010 Lisbon*, Portugal, 14-17 June.
5. Merlin C., P. Domingo, L. Vervisch, (2010) An Immersed Boundary Method for Large-Eddy Simulation of fully compressible flows: Application to a transonic cavity flow, *V European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2010 Lisbon*, Portugal, 14-17 June.
6. Subramanian V., P. Domingo, L. Vervisch, (2010) Large-Eddy Simulation of forced ignition in highly strained bluff-body burner, *V European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2010 Lisbon*, Portugal, 14-17 June.

Collaborations

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

Thèses soutenues

1. Guillaume Godel
2. Subramanian Vallinayagam

Thèses en cours

1. Cindy Merlin,
2. Suresh Nambully,
3. Memdough Belhi,
4. Guillaume Lodier,
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. , Menard, T. , Berlemont, A. , Reveillon, J. , Demoulin, F. X. & Blokkeel, G., Modeling collision outcome in moderately dense sprays Atomisation and Spray Technology, Vol. 20(3), 251-268 (2010)

Article de congrès

1. Chesnel, J. , Réveillon, J. , Ménard, T. , Berlemont, A. & Demoulin, F. X., Large Eddy Simulation of liquid atomization : From the resolved scales to subgrid spray, in 7th International Conference on Multiphase Flow. 2010:Tampa, FL USA.
2. Chesnel, J. , Menard, T. , Reveillon, J. , Berlemont, A. & Demoulin, F. X., A LES SIMULATION OF ATOMISATION, in Proceedings of ASME 2010 3rd Joint US-European Fluids Engineering Summer Meeting - FEDSM2010-ICNMM2010. 2010: Montreal, CANADA.
3. Luret, G. , Menard, T. , Reveillon, J. , Berlemont, A. & Demoulin, F. X., DNS STUDY OF COLLISION AND COALESCENCE OVER A WIDE RANGE OF VOLUME FRACTION, in Proceedings of ASME 2010 3rd Joint US-European Fluids Engineering Summer Meeting - FEDSM2010-ICNMM2010. 2010: Montreal, CANADA.
4. Luret, G. , Ménard, T. , Berlemont, A. , Réveillon, J. & Demoulin, F. X., A DNS study ranging from dense to dilute turbulent two-phase flows, in 7th International Conference on Multiphase Flow. 2010:Tampa, FL USA.

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

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

3. 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. Castel T., Y. Xu, Y. Richard, B. Pohl, J. Cretat, D. Thevenin, C. Cuccia, B. Bois and P. Roucou, 2010, Regional climate dynamic downscaling over Centre-East of France using the ARW/ WRF model high spatial resolution, AIC proceeding, 107-112.
2. Cretat J., C. Macron, B. Pohl and Y. Richard, 2010, Reproductibilité des pluies et de la dynamique atmosphérique en Afrique Australe dans le modèle climatique régional : approche multiscalaire, AIC Proceeding, 137-142.
3. Cuccia C., Y. Richard, B. Bois, T. Castel and D. Thevenin, 2010, Climate change : impacts on pinot noir phenology in Burgundy, AIC proceeding, 143-148.
4. Xu Y., T. Castel and Y. Richard, 2010, Dynamic Downscaling of GCM ARPEGE Simulations by WRF Model: A Study of Burgundy Regional Climate in the Recent Past and Future, submitted to Climate Dynamics.

Communication

1. Xu Y., T. Castel, C. Cuccia and Y. Richard, 2010, Regional assessment of global climate change, Workshop on : " Climate change impacts on agrosystems ", Dijon 24 February.

Collaborations

1. CNRS/Univ. Bourgogne : UMR 5561 Biogeosciences,
2. INRA Dijon : UMRs 102 LEG & 1210 BGA,
3. INRA Nancy : UMR 1092 LERFOB,
4. Alterre Bourgogne : Agence pour l'Environnement et le développement soutenable,
5. Centre Départemental Météo-France,
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.
2. Thèse de Julien Cretat sur «Agrégation et désagrégation des précipitations en Afrique du sud ». Université de Bourgogne, Ecole Doctorale E2S

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

Localisation : Rouen

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

Projets 2005003, 2006007, 2006008, 2007003, 2008001, 2010006

Responsables des projets :

2005003 : **Denis Ledue**
2006007 : **Nicolas Lecoq**
2006008 : **Denis Ledue**
2007003 : **Nicolas Lecoq**
2008001 : **Pierre-Emmanuel Berche**
2010006 : **Pierre-Emmanuel Berche**
2003014 : **Mickael Arnoult**

Titres :

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.**
2008001 : **Etude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe₂/YFe₂.**
2010006 : **Couplage d'échange dans les multicouches [Pt/Co]_n-IrMn.**
2003014 : **Simulation de la relavation des polymères.**

Source des informations : **Renaud Patte**

Projet : 2005003

Responsable de projet : **Denis Ledue**Titre : **Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins".****Affiches**

1. D. Ledue, H. Kachkachi, R. Patte, "Effet des interactions dipolaires sur la susceptibilité alternative d'assemblées d'agrégats ferromagnétiques", 13ème Colloque Louis Néel, 31 Mars - 2 Avril 2010, Albé, France.

Communications

1. D. Ledue, L. Lenoble, R. Patte, H. Kachkachi, "Susceptibilité alternative d'assemblées d'agrégats ferromagnétiques : Effets des interactions dipolaires", Réunion plénière, GDR Or-Nano, Dijon (3-5/11/2009)
2. D. Ledue, H. Kachkachi, R. Patte, "Dynamic susceptibility of ordered-systems of ferromagnetic nanoclusters : Effect of dipolar interactions", 5th International Conference on Surfaces, Coatings and Nanostructured Materials (NANOSMAT-5), Reims, France (18-21/10/2010)

Collaborations

1. Université de Boumerdes (Algérie), Université de Perpignan

Thèses

1. Drifa Brinis ("Dynamique d'aimantation dans les assemblées d'agrégats ferromagnétiques : Effets des interactions", septembre 2010-)

Projet : 2006007Responsable de projet : **Nicolas Lecoq****Publication**

1. Zapolsky, H., Boisse, J., Patte, R., Lecoq, N. Phase Field Simulation of Coarsening Kinetics in Al-Sc and Al-Sc-Zr Alloys. « Symposium on Advanced Intermetallic-Based Alloys for Extreme Environment and Energy Applications held at the 2008 MRS Fall Meeting » Boston (2009). Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol 1128, (2009) PP 549-554.

Affiches

1. N. Masquelier, S.G Fries, H. Zapolsky, W.Lefebvre, R.Patte, P.Pareige, "Al-Alloys development assisted by thermodynamics kinetics, phase field simulations and experiments", PTM 2010 (june 2010), Avignon
2. N. Masquelier, S.G Fries, H. Zapolsky, W.Lefebvre, R.Patte, P.Pareige, "Al-Alloys development assisted by thermodynamics kinetics, phase field simulations and experiments", ICAA 12 (sept. 2010), Yokohama

Communications

1. M. Certain, H. Zapolsky, "Phase field crystal modelling of fcc and bcc structures using scattering data" Workshop « Density function theory: from solid to biological applications », Lausanne, 21-23 octobre 2009
2. H. Zapolsky, N. Lecoq, R.Patte, M. Certain, J. Boisse, "Modélisation de la cinétique de précipitation à partir des équations microscopiques et mésoscopiques de diffusion", Séminaire au Laboratoire de Mathématiques et Applications (UMR CNRS 6086, Poitiers), 21 janvier 2010

Collaborations

1. Université de Linköping (Suède),
2. Nexans,
3. Laboratoire de Mathématiques et Applications (Université de Poitiers)

Thèses

1. Marilyn Certain ("Champ de phase et champ de phase cristallin pour l'étude de la croissance et coalescence de précipités Al-Zr-Sc", octobre 2008-), Nicolas Masquelier ("Caractérisation et modélisation de transformations microstructurales pour la mise au

point d'une nouvelle génération d'alliages d'aluminium pour conducteurs électriques", septembre 2009-)

Projet : 2006008

Responsable de projet : **Denis Ledue**

Titre : **Cinétique de transformation de phase et propriétés magnétiques dans les alliages binaires Ni_{3+x} Fe_{1-x}.**

Publications

1. I.V. Vernyhora, D. Ledue, R. Patte, H. Zapolsky, "Monte Carlo investigation of the correlation between magnetic and chemical ordering in NiFe alloys", Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Volume 322, Issue 17, September 2010, Pages 2465-2470
2. M. Ekholm¹, H. Zapolsky, A. V. Ruban, I. Vernyhora, D. Ledue, and I. A. Abrikosov, "Influence of the Magnetic State on the Chemical Order-Disorder Transition Temperature in Fe-Ni Permalloy", Physical Review Letters, Volume 105, Issue 16

Communications

1. Université de Stockholm (Suède),
2. Université de Linköping (Suède)

Thèses

1. Iryna Vernyhora ("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)

Projet : 2007003

Responsable de projet : **Nicolas Lecoq**

Titre : **Modélisation de l'évolution de la microstructure dans un acier modèle au cours de traitements thermiques.**

Publications

1. Grasselli, M., Lecoq, N. and Pierre, M. "A long-time stable fully discrete approximation of the Cahn-Hilliard equation with inertial term", AIMS' Journals, Proceedings to the 8th AIMS International Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications. May 25 – 28, 2010, Dresden (2010).
2. Hery, E., Andrieu, E., Lacaze, J., Danoix, F., and Lecoq N., "Study by differential thermal analysis of reverse spinodal transformation in 15-5 PH alloy", accepted in special issue of Solid State Phenomena, 2011.

Affiche

1. Lecoq, N., Zapolsky, H., Galenko, Peter K., "Modelling of memory effects in spinodal decomposition", MRS Fall Meeting , 2007-11-26 - 2007-11-29 , Boston, USA. (2009).

Collaboration

1. CIRIMAT (Toulouse)

Communications

1. Lecoq, N., Zapolsky, H., Galenko, P. "Fast Spinodal decomposition in a binary system: analysis of the time-evolution of the structure factor", In 8th AIMS International Conference on Dynamical Systems, Differential Equations and Applications. May 25 – 28, 2010, Dresden (2010).

2. Lecoq, N., Lacaze, J., Danoix, F., Zapolsky, H. "Phase-field modelling of spinodal decomposition during aging and heating", PTM2010, Solid-Solid Phase Transformation in Inorganic Materials, June 6-11, Avignon (2010).
3. Akre, J., Lecoq, N., Leitner, H., Patte, R., Danoix, F. "Evolution of nanometric B2-NiAl precipitates in a martensitic steel during non isothermal ageing", PTM2010, Solid-Solid Phase Transformation in Inorganic Materials, June 6-11, Avignon (2010).

Post Doctorat

1. Léonard Jeloica

Projet : 2008001Responsable de projet : **Pierre-Emmanuel Berche**Titre : **Etude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe₂/YFe₂.****Communications**

1. P.E. Berche, "Etude par simulation Monte-Carlo des transitions de phase et des matériaux magnétiques", Journées d'étude du Laboratoire de Physique Théorique et Appliquée, Tébessa (Algérie), 7 juin 2010
2. S. Djedai, "Etude des effets de compétition énergétique sur les propriétés magnétiques des super-réseaux DYFe₂/YFe₂ par simulation Monte-Carlo", Journées des doctorants du Groupe de Physique des Matériaux, St Etienne du Rouvray, 7 juillet 2010

Affiche

1. S. Djedai, P.E. Berche, K. Dumesnil, C. Dufour, "Etude des propriétés magnétiques des super-réseaux DYFe₂/YFe₂ par simulation Monte-Carlo", XIIIème Colloque Louis Néel, Albé, 31 mars/2 avril 2010

Collaboration

1. Université de Tébessa

Thèses

1. S. Djedai ("Modélisation et simulations numériques de multicouches magnétiques", programme de collaboration franco-algérien PROFAS)

Enseignement

1. P.E. Berche, Cours de physique du solide pour les étudiants de master et de magistère de l'Université de Tébessa, Tébessa (Algérie), 6 juin 2010

Projet : 2010006Responsable de projet : **Pierre-Emmanuel Berche**Titre : **Couplage d'échange dans les multicouches [Pt/Co]_n-IrMn.****Articles**

1. A. Maitre, L. Lechevallier, R. Patte, P.E. Berche, D. Ledue, "Modélisation de bicouche Co/IrMn: Cycles d'hystérésis et transition de phase", XIIIème Colloque Louis Néel, Albé, 31 mars/2 avril 2010
2. A. Maitre, A. Ruban, R. Patte, D. Ledue, "Monte Carlo simulation of hysteresis loops in Co/IrMn bilayer", Summer School of Computational Materials Science, San Sebastian, July 2010

Communication

1. A. Maitre, "Etude par simulation numérique du retournement d'aimantation dans des bicouches Co/IrMn à anisotropie d'échange", Journée des Doctorants GPM, Rouen, 7 juillet 2010

Collaborations

1. Université de Stockholm (Suède),
2. Spintec (Grenoble)

Thèse

1. Adeline Maitre ("Etude par simulations numériques du renversement d'aimantation dans les multicouches IrMn/Co/Pt à anisotropie d'échange", octobre 2009-)

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

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

Localisation : Reims

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

Projet : 2005009Responsable 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. Delcroix P., Canneaux S., Louis F., Cours T., Cardini G., Hanoune B., Etude théorique de l'équilibre du formaldéhyde entre la phase gazeuse et la phase liquide aqueuse, Journées Interdisciplinaires Qualité Air, Villeneuve d'Ascq, 4-5 février, (2010)

Collaboration

1. Laboratoire PC2A UMR CNRS 8522 et Laboratoire C3R (CNRS/IRSN/Lille1) - Université de Lille 1 - France

Thèse

1. Pauline Delcroix, Etude théorique de l'équilibre du formaldéhyde entre la phase gazeuse et la phase liquide

Projet : 2008006Responsable 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.**

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

Localisation : Paris

Site Web : <http://www.icmo.u-psud.fr/>

Projet : 2006013Responsable 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. New Elements in the Gold(I)-Catalyzed Cycloisomerization of Enynol Ester Derivatives Embedding a Cyclohexane Template. Harrak, Y.; Makhlouf, M.; Azzaro, S.; Mainetti, E.; Lopez Romero, J. M.; Cariou, K.; Gandon, V.; Goddard, J.-P.; Malacria, M.; Fensterbank, L. J. Organomet. Chem. 2010, accepté.
2. Cobalt-Mediated Linear 2:1 Cooligomerization of Alkynes with Enol Ethers to Give 1-Alkoxy-1,3,5-Trienes: A Missing Mode of Reactivity. Lebœuf, D.; Iannazzo, L.; Geny, A.; Malacria, M.; Vollhardt, K. P. C.; Aubert, C.; Gandon, V. Chem. Eur. J. 2010, 16, 8904-8913
3. Cyclopentadienyl Ligands as Perfect Anion Receptors: Teamwork between pi-Anion Interaction and C-H-Anion Hydrogen Bonds. Amouri, H.; Moussa, J.; Malacria, M.; Gandon, V. Cryst. Growth & Design, 2009, 9, 5304-5310.
4. Silver- and Brønsted Acid-Catalyzed Nazarov-Type Cyclizations to Benzofulvenes. Cordier, P.; Aubert, C.; Malacria, M.; Lacôte, E.; Gandon, V. Angew. Chem. Int. Ed. 2009, 48, 8757-8760.
5. Generation and Trapping of Cyclopentenylidene Gold Species: Four Pathways to Polycyclic Compounds. Lemière, G.; Gandon, V.; Cariou, K.; Hours, A.; Fukuyama, T.; Dhimane, A.-L.; Fensterbank, L.; Malacria, M. J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 2996-3006.

7. 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. Agathe Martinez, Eric Hénon, Claire Coiffier, Aline Banchet, Dominique Harakat, Jean-Marc Nuzillard, Arnaud Haudrechy, An unexpected rearrangement giving a new thiosubstituted carbohydrate, Carbohydrate Research 345 (2010) 1088-1093
2. Marie Laronze-Cochard, Fabien Cochard, Etienne Daras, Amélie Lansiaux, Bertrand Brassart, Enguerran Vanquelef, Elise Prost, Jean-Marc Nuzillard, Brigitte Baldeyrou, Jean-François Goosens, Olivier Lozach, Laurent Meijer, Jean-François Riou, Eric Henon and Janos Sapi, Synthesis and biological valuation of new penta- and heptacyclic indolo- and quinolinocarbazole ring systems obtained via Pd0 catalysed reductive N-heteroannulation, Org. Biomol. Chem., 8 (2010) 4625-4636
3. Fabien Accadbled, Bernard Tinant, Eric Hénon, Danièle Carrez, Alain Croisy and Sandrine Bouquillon, Synthesis of chiral β -aminoalcohol palladium complexes exhibiting cytotoxic properties, Dalton Trans., 39 (2010) 8982-8993

Communication

1. 7ème Rencontre des Chimistes Théoriciens du Grand-Est, Allain (4-5 juin 2010) ET Chemoinformatics School, Obernai, (20-24 Juin 2010), C. Coiffier, M. Dauchez, P. Goekjian, A. Haudrechy, E. Hénon, "Approche top-down pour la recherche de substrats biologiquement actifs : Analyse des conformations préférentielles de C-furanosides"

Thèses co-encadrées

1. Claire Coiffier 2009-... "Approche top-down pour la recherche de substrats biologiquement actifs : Analyse des conformations préférentielles de C-furanosides"
2. Chantal Barberot 2010-... "Conception orientée par modélisation moléculaire de molécules d'intérêt thérapeutique : exploitation du pharmacophore pyridazinone pour le traitement potentiel des maladies bronchopulmonaires"

3. Fabien Accadbled – 2008-2010 «Synthèse de complexes de Palladium »

Master

1. Chantal Barberot – Master 2 BCS/CSNM - URCA - Modélisation moléculaire de pyridazinones fonctionnalisées et de leur interaction avec la phosphodiesterase de type 4 (PDE4)

8. 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)

Projet : 2004004

Responsable du projet : **Jacques Maddaluno**

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

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

Publications

1. Are sp lithiated carbons more nucleophilic than sp² or sp³ ones? A comparative DFT theoretical study on the condensation of propynyllithium and its aggregates on formaldehyde" Fressigné, C. ; Maddaluno, J. J. Org. Chem. 2010, 75, 1427–1436.

Communications

1. Tout ce que vous avez toujours voulu savoir sur les organolithiens (sans jamais oser le demander)", séminaire à l'Université de Rennes 1 (5 novembre 2009) et à l'Université de Montpellier 2 (26 novembre 2009)

Collaboration

1. Dr Baptiste Lecachey et Pr Hassan Oulyadi (COBRA)

Thèse en cours

1. M. Julien Marchois, "Deprotonation vs. condensation: a DFT theoretical study of the interaction between an enolisable carbonyl compound and lithiated bases/nucleophiles. Doctorat en cours depuis le 01/10/10 dans le cadre Interreg IS:CE Chem.

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 désaromatisation 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.

Publications

1. Dentel, H.; Chataigner, I.; Le Cavalier, F.; Gulea, M. Tetrahedron Lett. 2010, in press (DOI: 10.1016/j.tetlet.2010.09.055)
2. " First catalytic enantioselective version of a thia hetero-Diels–Alder reaction with dithioesters."

Conférences - Séminaires

1. 05/03/10: Université de Caen, Basse-Normandie, LCMT (Caen), Conférence "Réactions de cycloadditions désaromatisantes "
2. 04/10 : ANORCQ X, Southampton (UK), 2 Posters " Dearomatizing Tandem cascade [4+2]/[3+2] Cycloadditions on nitroarenes."
"Dearomatisation of Nitroarenes via [3+2] Cycloadditions."
3. 07/10 : ISCC-9, Florence (Italie), 1 Poster " Dearomatizing Tandem cascade [4+2]/[3+2] Cycloadditions on nitroarenes."

Collaborations

1. Dr. Hélène Gérard, Laboratoire de chimie théorique, UPMC, Paris VI.
2. Dr. Mihaela Gulea, LCMT de Caen

Projet : 2008002

Responsable des projets : **Georges Dupas**

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

Laboratoire : **IRCOF**

9. 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. [[cl10]] "High frequency polarization switching of a thin ferroelectric film", J.-G.~Caputo, A.I.~Maimistov, E.D. Mishina, E.V. Kazantseva, V.M.~Mukhortov, Phys. Rev. B 82, 094113, (2010).
2. [[cl10]] "Dynamics of point Josephson junctions in a microstrip line", J.-G.~Caputo et L. Loukitch
3. Submitted to SIAM J. of Appl. Math., (March 2010), <http://arxiv.org/abs/1004.0409>
4. [[sc10]] "High-order harmonic generation by double-photoionization accounting for the correlation between continuum electrons", E. Simo, J.-G. Caputo, Optik - Int. J. Light Electron Opt. (2010).

5. [[ckm09]] "Fast electromagnetic response of a thin film of resonant atoms with permanent dipole"
6. J.-G.~Caputo, E. V.~Kazantseva and A.I.~Maimistov J. Phys. A: Math. Theor. 43 (2010) 015206.
<http://arxiv.org/abs/0906.3473>
7. [[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.

Conférences

1. Présentation à la conférence "Nonlinear waves theory and applications" 26-29 Juin 2010, Beijing .
2. Présentation à la conférence "SIAM conference on nonlinear waves and coherent structures", 16-19 Aout 2010, Philadelphie.

Mémoires de Master

1. Maxime Vallée "Modélisation du comportement d'un cristal antiferromagnétique". Travail en collaboration avec Joseph Scola, Université de Versailles-Saint Quentin. Un article est en cours de rédaction.
2. Andre Suess (stagiaire venant de l'Université de Dresde) "Modélisation d'un matériau ferroélectrique"

Principales collaborations internationales

1. A. Maimistov, Engineering Physics Moscow, 4 fois professeur invité à l'INSA de Rouen
2. E. Simo, Professeur au département de Physique, Université de Yaounde, Cameroun.
3. V. Konotop, Professeur, Département de Physique, Université de Lisbonne. (contrat bilatéral Pessoa 2009-2010)
4. Y. Gaididei, Inst. Bogoliubov de Physique théorique, Kiev, Ukraine. Contrat demandé.
5. M. P. Soerensen, Département de Mathématiques, Université Technique du Danemark. Bourse de l'ambassade de France en 2002 et 2003.

10. 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 : **Modélisation Numérique de élastoplasticité de milieux solides hétérogènes.**

Présentation orale en conférences internationales avec comité de lecture :

1. A. Tahimi, F. Barbe, L. Taleb, R. Quey, A. Guillet, "Microstructure-based FE modelling of the plasticity of crystalline materials subjected to diffusive transformation. Evaluation for a 100C6 steel". 20th Int Workshop Computational Mechanics of Materials, Loughborough (UK), 6-12 sept. 2010.
2. A. Tahimi, F. Barbe, R. Quey, L. Taleb, "Plasticity induced by diffusive phase transformation: polycrystal FE modelling and experimental analysis". IV European Conference on Computational Mechanics, Paris, France, 16-21 mai 2010.

Thèse en cours (soutenance prévue début 2011) :

1. A. Tahimi, "Conséquences mécaniques des transformations de phase dans les aciers. Modélisations et expériences". Thèse de l'INSA Rouen.

11. 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 : 2007001Responsable 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.**

Le projet est resté centré sur la thématique polluants automobiles mais s'est élargi à d'autres aspects environnementaux de la réactivité en phase gazeuse de composés halogénés. Le titre du projet ne reflétant plus tous les aspects traités devra être changé.

Publications

1. A Theoretical Study of the Gas-Phase Reactions of Iodine Atoms (2P_{3/2}) with H₂, H₂O, HI, and OH Journal of Physical Chemistry A, 114, 9270-9288, 2010 CANNEAUX S., XERRI B., LOUIS F., CANTREL L.
2. Atmospheric Reactivity of CH₃I and CH₂I₂ with OH Radicals: A Comparative Study of the H- versus I-abstraction. Journal of Molecular Structure (THEOCHEM), special issue "Theoretical chemistry of atmospheric processes", in press, 2010 LOUIS F., CERNUSAK I., CANNEAUX S., MECIAROVA K.

Affiches dans des colloques et congrès avec actes

1. A Theoretical Study of the H-abstraction Reactions of H₂, H₂O, HI, and OH by the IO (2P_{3/2}) Radicals. 9th Central European Symposium on Theoretical Chemistry, Novy Smokovec (Slovaquie), 12-15 Septembre 2010. CANNEAUX S., HAMMAECHER C., LOUIS F., CANTREL L.

Communications orales dans des colloques et congrès avec actes

1. Conférence invitée Thermochemical data calculation by quantum chemistry methods: application to ten species involved in low-temperature oxidation mechanism of o-xylene. 9th Central European Symposium on Theoretical Chemistry, Novy Smokovec (Slovaquie), 12-15 Septembre 2010. LOUIS F., VANDEPUTTE R., CANNEAUX S., RIBAUCOUR M.

Masters

1. Estimation de paramètres thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique : Application à des réactions d'intérêt combustionnel. Juin 2010. VANDEPUTTE R.

12. UMR 8601 CNRS UFR Biomédicale INSERM - PMC (Laboratoire de Chimie Pharmacologique et Toxicologique)

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 : 1998053Responsable de projet : **Nohad Gresh**

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

Conférences invitées

1. Polarizable water molecules in ligand-metalloprotein recognition
 - Telluride workshop on many-body interactions, Telluride (CO), Etats-Unis, Juin 2010
 - CHITEL (Conférences des chimistes théoriciens d'expression latine), Anglet, France, Septembre 2010.

Publications portant sur la méthode SIBFA, 2009-2010

1. 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.
2. An Electron Localization Function analysis of the binding site of alcoholdehydrogenase 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).
3. 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

Projet : 2002005Responsable de projet : **Pascal Gosselin**Titre : **Modélisation des états de transition de réactions de diels-alder asymétriques****Publication**

1. Pascual, S, Blin, T, Saikia, PJ, Thomas, M, Gosselin, P, Fontaine, L. Block copolymers based on 2-vinyl-4,4-dimethyl-5-oxazolone by RAFT polymerization: Experimental and computational studies. J. Polym. Sci. A Polym. Chem. 2010 48:5053–5062

Collaborations

1. Université du Maine : Prof. Laurent Fontaine, Dr Gilles Dujardin (DR CNRS), Dr Sagrario Pascual (MCF), Dr Stéphanie Legoupy (CR CNRS)
2. Université de Nantes : Prof. Jacques Lebreton

Master 2 Chimie

1. M. Julien Rémond

Projet : 2008007Responsable de projet : **Arnaud Martel**Titre : **Etude de la catalyse de réactions de Diels-Alder par les sels d'étain (IV).**

14. UMR CNRS 6614 - CORIA

Localisation : Saint Etienne du Rouvray

Site Web : <http://coria.fr/>

Projet : 2009005Responsable de projet : **Pr Kuan Fang REN**Titre : **Modélisation des propriétés optiques des objets complexes.****Communication**

1. Y.J. Yuan, K. F. Ren, C. Rozé and T. Girasole, "Extended geometrical optics approximation and Monte Carlo ray tracing for light scattering by an irregular object", 15th Int. Symp on Appl. Laser Techniques to Fluid Mechanics, Lisbon, Portugal, July 5-8, 2010

Thèses

Yijia Yuan. «Diffusion de la lumière par un objet irrégulier, imagerie pour les sprays».

Directeur de thèse: K. F. Ren et C. Rozé

Chloé Caumont. «Analyse du spectre d'extinction des particules submicroniques et application à leur mesure granulométrique». Directeur de thèse: K. F. Ren et J. Yon

Masters :

Stage: M2 DIODE: Lyes Ifrek «Etude des propriétés optiques des agrégats et des poussières dans le tokamak ITER avec la T-Matrice»

15. UMR CNRS 8516 (Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman)

Localisation : Lille

Projet : 2008005Responsable de projet : **Abdenacer Idrissi**

Titre : Etude par la méthode de simulation de dynamique moléculaire de la structure et des propriétés dynamiques dans les solutions aqueuses et fluides supercritiques.

Communication

1. Local structure in sub- and supercritical CO₂: a Voronoi polyhedra analysis study.
A. Idrissi, I. Vyalov, P. Damay, M. Kiselev, Y.P. Puhovski, P. Jedlovsky. J. Mol. Liq., Année: 2010, Volume: 153, Pages: 20 - 24
2. The effect of urea on the structure of water: a molecular dynamics simulation.
A. Idrissi, M. Gerard, P. Damay, M. Kiselev, Y.P. Puhovski, E. Cinar, P. Lagant, G. Vergoten J. Phys. Chem. B, Année: 2010, Volume: 114, Pages: 4731 - 4738
3. Assessment of the spatial distribution in sub- and supercritical CO₂ using the nearest neighbor approach: a molecular dynamics analysis.
A. Idrissi, I. Vyalov, P. Damay, A. Frolov, R. Oparin, M. Kiselev. J. Phys. Chem. B, Année: 2009, Volume: 113, Pages: 15820 - 15830
4. Investigation of the Local Structure in sub and supercritical Ammonia Using the Nearest neighbor Approach : A Molecular Dynamics Analysis.
I. Vyalov, M. Kiselev, T. Tassaing, J. C. Soetens, and A. Idrissi (accepté 2010)

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

Localisation : Université de Rouen

Projet : 2005014

Responsable de projet : **Christelle Pareige**

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

Publications

1. C. Pareige, C. Domain, P. Olsson "Short and long range order in Fe-Cr: a Monte Carlo study" J. Appl. Phys. 106 (2009) 104906
2. C. Pareige, M. Roussel, S. Novy, P. Olsson, C. Domain, P. Pareige "Kinetic study of phase transformation in a highly concentrated Fe-Cr alloy: Monte Carlo simulation versus experiments" Soumise à Acta mater.

Communications

1. 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" 15th Workshop on Multiscale Modelling of FeCr Alloys, Madrid, 2-3 novembre 2009
2. C. Pareige, M. Roussel, S. Novy, P. Olsson, C. Domain, P. Pareige "Kinetic Monte Carlo simulation of spinodal decomposition in an Fe-25at.%Cr – comparison with experiment at the atomic scale" Phase Transformation in inorganic Materials (PTM) 2010, Avignon, France, juin 2010

Collaborations

1. EDF – R&D MMC

Thèses

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

Projet 2008014Responsable de projet : **Christelle Pareige**Titre : **Modélisation des premiers stades de précipitation dans des alliages de magnésium modèles.****Communication par voie d'affiche**

1. Viktor S. Kopp, Cristelle Pareige, Williams Lefebvre "Precipitation Kinetics in a Mg-0.51 (at %)Nd and a Model WE43 Type Alloy as Investigated by Atom Probe Tomography" DGM Magnesium (8th International conference on Magnesium Alloys) – Weimar – 26 – 29 octobre 2009

Thèses

1. "Analyse et modélisation de transformations de phase par précipitation dans des alliages de magnésium modèles" Viktor Kopp, soutenance prévue en décembre 2010

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

Localisation : Caen

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

Projet : 2007007Responsable de projet : **Christian Dufour**

Source des informations :

Titre : **Calculs des structures atomiques et électroniques de matériaux fonctionnels nanostructurés pour la micro et l'opto électronique**

Projet : 2003009Responsable de projet : **Pierre Ruterana**Titre : **Energie et structure électronique des défauts tendus dans les semi-conducteurs nitrures.**

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

Localisation : Paris

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

Projet : 2008011Responsable de projet : **Jean-Philip Piquemal**Titre : **Modélisation multiéchelle pour la chimie bioinorganique.**

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

Localisation : Le Havre

Site Web : <http://www.univ-lehavre.fr/recherche/lomc/index.php>

Projet : 2003013Responsable de projet : **Grégory Pinon**Titre : **Développements et applications des méthodes particulières**

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

20. UMR 8576 CNRS (Laboratoire Glycobiologie Structurale et Fonctionnelle)

Localisation : Lille, USTL Villeneuve d'Ascq

Projet : 2007010

Responsable de projet : Philippe Lagant

Titre : Etudes structurales de Polysaccharides anioniques formant des hydrogels : chondroïtine-sulfate

21. CRISMAT (Laboratoire de Cristallographie et Sciences des Matériaux)

Localisation : Caen - ENSICAEN

Projet : 2007013

Responsable de projet : Marie-Bernadette Lepetit

Titre : Etudes ab-initio de systèmes fortement corrélés

22. ECN - Ecole centrale de Nantes

Localisation : Nantes

Projet : 2008008

Responsable de projet : David Letouzé

Titre : Simulation en hydrodynamique avec une méthode SPH.

Projet : 2008009

Responsable de projet : David Letouzé

Titre : Simulation en hydrodynamique avec une méthode navier-stokes surface libre : tenue à la mer et manoeuvrabilité.

23. LRPMN (Laboratoire de Recherche sur les Propriétés des Matériaux Nouveaux)

Localisation : Alençon- Damigny

Projet : 2009007

Responsable de projet : Jun Chen

Titre : Propriétés structurales et électroniques des Interfaces AlN/GaN

Projet : 2007005

Responsable de projet : Bessem Ben Doudou

Source des informations : Jun Chen

Titre : Fonctionnalisation et greffage des nanotubes de carbone

24. UPR 3079 - CEMHTI (Conditions Extrêmes et Matériaux : Haute Température et Irradiation)

UPR3079 CNRS

Localisation : Orléans

Projet : 2009008

Responsable de projet : Sylvain Cadars

Titre : Etudes Combinées par Calculs Premiers Principes et Résonance Magnétique Nucléaire pour la Résolution du Désordre Structural Local dans les Matériaux Inorganiques et Hybrides Organiques-Inorganiques.

25. URCOM EA 3221 - INC3M CNRS FR-3038

Localisation : Le Havre

Projet : 2010004

Responsable de projet : Adam Daïch

Titre : Etude de réactions domino d'accès à des gamma-lactames bicycliques d'intérêt biologique.

26. INSA - Département Energétique et Propulsion

Localisation : Rouen - Saint Etienne du Rouvray

Projet : 2010009

Responsable de projet : François Pelou

Titre : Etude de l'écoulement à travers les plaques entretoises des générateurs de vapeur équipant les centrales nucléaires d'EDF

C. Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire

Cette section concerne les laboratoires membres du Réseau Normand en Modélisation Moléculaire. En plus des moyens logiciels qui sont mutualisés pour ce réseau d'utilisateurs, certains laboratoires ont parfois également besoins d'importantes ressources en calcul. Dans ce cas, les projets suivent la procédure d'expertise de dossiers scientifiques : c'est pourquoi on retrouvera la liste de leurs publications dans la section précédente.

1. UPRES EA 3233 - Equipe SMS (Sciences et Méthodes Séparatives),)

Localisation : IRCOF Rouen
Source des informations : Samuel PETIT
Directeur : Professeur Gérard COQUEREL

Les logiciels Cerius² et Materials Studio (Accelrys), et SYBYL (Tripos) sont utilisés pour :

- La description et l'analyse des structures cristallines
- Les études de croissance cristalline et de prédiction de morphologie
- L'analyse et la prédiction du polymorphisme
- L'étude des mécanismes de désolvatation de cristaux organiques
- L'analyse de la reconnaissance supramoléculaire et chirale.

Publications

1. Incidence des facteurs structuraux et macrocristallins sur la désolvatation de cristaux pharmaceutiques
S. Petit, G. Coquerel.
Récents Progrès en Génie des Procédés, 2010, 99, 214-221
2. Etude des mécanismes de formation d'inclusions liquides à l'intérieur de monocristaux de ciclopirox
A. Waldschmidt, N. Couvrat, B. Berton, V. Dupray, H. Atmani, S. Petit, G. Coquerel.
Récents Progrès en Génie des Procédés, 2010, 99, 45-51
3. Cristallisation et analyse structurale de composés supramoléculaires
Y. Amharar, A. Grandeury, M. Sanselme, S. Petit, G. Coquerel
Ann. Pharm. Franç., 2010, 68, 212-217
4. Preparative resolution of (\pm)-trans-1,2-diaminocyclohexane by means of preferential crystallization of its citrate monohydrate
A. Galland, V. Dupray, A. Lafontaine, B. Berton, M. Sanselme, H. Atmani, G. Coquerel
Tetrahedron: Asymmetry, 2010, 21, 2212-2217
5. Fascinating control of crystalline microstructures
S.S. Dette, T. Stelzer, M.J. Jones, G. Coquerel, J. Ulrich
Chem. Eng. Res. Des., 2010, 88, 1158-1162
6. The first use of supramolecular recognition to extract and stabilize an enzymatic inhibitor of a coagulation process
A. Grandeury, C. Martin, S. Petit, C. T. Craescu, G. Gouhier
New J. Chem., 2010, 34, 1089-1093
7. Concomitant Dehydration Mechanisms in Single Crystals of Trehalose
V. Dupray, B. Berton, S. Ossart, H. Atmani, M.-N. Petit, G. Coquerel
Carbohydrate Research, 2009, 344, 2539-2546
8. The resolution of 2-hydroxy-5,5-dimethyl-4-phenyl-1,3,2-dioxaphosphorinan 2-oxide (Phencyphos) by preferential crystallization
M. Leeman, F. Querniard, T. R. Vries, B. Kaptein, R. M. Kellogg
Org. Proc. Res. Dev., 2009, 13, 1379-1381
9. Characterization of defects inside single crystals of Ciclopirox
N. Couvrat, A.S. Blier, B. Berton, Y. Cartigny, V. Dupray, G. Coquerel
Cryst. Growth Des., 2009, 9, 2719-2724

A rapid and efficient synthesis of a new pyrrolobenzodiazocines via an intramolecular Friedel-Crafts reaction

S. Bouzbouz, M. Sanselme

Tetrahedron Letters, 2009, 50(43), 5884-5887

Thèses

1. DESCAMPS Guillaume (Décembre 2009). Directeur G. Coquerel. «Purification par voie de cristallisation d'un nouveau principe actif organo-phosphoré modulateur de l'activité des lymphocytes $T\gamma9\delta2$ ».
2. FOURS Baptiste (Décembre 2009). Directeur G. Coquerel. Contribution à l'étude des phases solides du Rimonabant –SR141716
3. DUREISSEIX Valérie (Avril 2010). Directeur G. Coquerel. Contribution à l'étude de la cristallisation de composés moléculaires en solution. Impact sur la sélectivité structurale et chimique
4. LEVILAIN Guillaume (Juin 2010). Directeur G. Coquerel. Development and improvement of resolution methods by direct crystallization (thèse Européenne)

Communications orales

1. Mechanism of Polymorphic and Order-Disorder Transitions in Molecular Crystals: a Controversial Debate
S. Petit, Y. Cartigny, M. Sanselme, M.-N. Petit, G. Coquerel
PhandTA 11, Innsbruck (Autriche), Février 2010 (abst. Book p. 39)
2. Is spray drying a suitable technique for the control of polymorphism?
D. Martins, G. Coquerel
PhandTA 11, Innsbruck (Autriche), Février 2010 (abst. Book p. 44)
3. Crystal Structure and Dehydration Mechanism of the Racemic Hydrate of 5-Methyl-5-(4-Ethylphenyl) Hydantoin
Y. Amharar, Y. Cartigny, M. Sanselme, S. Petit, G. Coquerel
XXXVI ème JEEP, Montpellier, Mars 2010, Abstract book, p. 85-86
4. Etude des mécanismes de formation d'inclusions liquides à l'intérieur de monocristaux de ciclopirox
A. Waldschmidt, N. Couvrat, B. Berton, V. Dupray, H. Atmani, S. Petit, G. Coquerel
Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielle (CRISTAL-6), Marseille, Mai 2010, Abstract book, p. 45
5. Liquid inclusions in organic crystals: Comparison between adipic acid and ciclopirox
A. Waldschmidt, N. Couvrat, B. Berton, V. Dupray, S. Petit, G. Coquerel
CGOM-10, Singapour, Août 2010, Abstract book
6. On the formation of liquid inclusions in single crystals of benzoyllusitanicol
N. Couvrat, V. Dupray, B. Berton, A. Waldschmidt, S. Petit, R. Céolin, G. Coquerel
CGOM-10, Singapour, Août 2010, Abstract book
7. Enhancing performances of preferential crystallization – A case study with 1,2-diamonium-cyclohexane citrate monohydrate
A. Lafontaine, A. Galland, V. Dupray, P. Cardinael, G. Coquerel
BIWIC-17, Halle, September 2010, Abstract book pp.49-55

Affiches

1. Characterization and preparative resolution of crystalline, but efflorescent, solvated forms of a chiral pharmaceutical salt
G. Tauvel, M. Sanselme, S. Coste-Leconte, S. Petit and G. Coquerel
PhandTA 11, Innsbruck (Autriche), Février 2010 (abst. Book p. 74)

2. Physical and Structural Characterization of a Solid Solution
G. Descamps, Y. Cartigny, M. Sanselme, M-N. Petit, S. Petit, E. Aubin, G. Coquerel
PhandTA 11, Innsbruck (Autriche), Février 2010 (abst. Book p. 75)
3. Crystal growth of a chiral hydantoin: Role of solvent and counter enantiomer in the formation of hollow particles
Y. Ahmarar, M. Sanselme, S. Petit, G. Coquerel
PhandTA 11, Innsbruck (Autriche), Février 2010 (abst. Book p. 76)
4. Racemizable systems crystallizing as conglomerate and spontaneous symmetry breaking
S. Gonella, G. Levilain, G. Coquerel
XXXVI ème JEEP, Montpellier, 2010, Abstract book, p.37
5. Characterization of water-solid state interactions of an active pharmaceutical ingredient
R. Rotival, Y. Cartigny, G. Coquerel, P. Négrier, Y. Corvis, P. Espeau
XXXVI ème JEEP, Montpellier, 2010, Abstract book, p. 67-68
6. Structure cristalline et caractérisation d'un nouveau liquide ionique
C. Barbot, M. Pépin, S. Rabeau, M. Sanselme, C. Martin, S. Petit, G. Gouhier
XVII èmes Journées de l'AECCPCM, Univ. Bordeaux, Avril 2010
7. Incidence des facteurs structuraux et macrocristallins sur la désolvatation de cristaux pharmaceutiques
S. Petit, G. Coquerel
Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielle (CRISTAL-6), Marseille, Mai 2010, Abstract book, p. 214
8. Importance des équilibres solide/vapeur dans la caractérisation d'un composé pharmaceutique
Y. Cartigny, G. Coquerel
Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielle (CRISTAL-6), Marseille, Mai 2010, Abstract book, p. 144
9. Polymorphisme cristallin d'un principe actif pharmaceutique : cristallisation, caractérisation et stabilité thermodynamique relative de ses polymorphes
B. Robert, M.A. Perrin, R. Ceolin, G. Coquerel, J.L. Tamarit
Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielle (CRISTAL-6), Marseille, Mai 2010, Abstract book, p. 223
10. Crystal structure and dehydration mechanism of a racemic hydrate of 5-methyl-5-(4'ethylphenyl) hydantoin
Y. Amharar, S. Petit, M. Sanselme, Y. Cartigny, G. Coquerel
CGOM-10, Singapour, Août 2010, Abstract book XXX
11. Crystal growth of a chiral hydantoin: role of solvent and counter enantiomer in the formation of hollow particles
Y. Amharar, S. Petit, M. Sanselme, G. Coquerel
CGOM-10, Singapour, Août 2010, Abstract book XXX
12. Dilemma on the centro or non-centro symmetry of 3-5dinitrobenzoic acid
N. Couvrat, V. Duresseix, A. Galland, B. Berton, V. Dupray, H. Atmani, G. Coquerel
CGOM-10, Singapour, Août 2010, Abstract book XXX
13. Mechano-synthesis of co-crystals: influence of the solvent on the formation kinetics and the crystallinity
J. Linol, G. Coquerel
BIWIC-17, Halle (D), September 2010, ISBN 978-3-86955-428-0, pp.352-357
14. Chiral discrimination in the solid state and its relationship with the performances of preferential crystallization
S. Gonella, V. Duresseix, J. Mahieux, A. Galland, V. Dupray, G. Coquerel
BIWIC-17, Halle (D), September 2010, ISBN 978-3-86955-428-0, pp.265-272

15. Mixed crystals in chiral organic systems: phase diagram and crystal structure features of an ethanolamine salt of 3-chloromandelic acid
N. Taratin, H. Lorenz, E. Kotelnikova, A. Glikin, L. Yu. Kryuchkova, A. Galland, V. Dupray, G. Coquerel, A. Seidel-Morgenstern
BIWIC-17, Halle (D), September 2010, ISBN 978-3-86955-428-0, pp.476-482

Collaboration

1. Pr. Géraldine Gouhier, équipe LFAOC, IRCOF, Université de Rouen, UMR 6014

2. UMR CNRS 6014 - COBRA (Equipe Analyse et Modélisation)

Localisation : IRCOF ROUEN

Source des informations : Pr. Isabelle Segalas-Milazzo

Depuis octobre 2009, l'équipe « Analyse et Modélisation » de l'UMR 6014 est constituée de trois groupes. Deux d'entre eux utilisent les ressources du CRIHAN, à savoir le groupe de « RMN et Modélisation Moléculaire » dirigé par le Pr. Oulyadi et le nouveau groupe de « Chimie Théorique » dirigé par le Pr. Joubert.

Durant la période octobre 2009-novembre 2010, le groupe RMN et Modélisation Moléculaire comprenait 2 Professeurs, 3 Maîtres de Conférences et 4 Doctorants 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 (Felix NMR)
- 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

Durant la même période, le groupe de Chimie Théorique était constituée d'1 Professeur et d'1 doctorant. Un stagiaire CNRS a rejoint le groupe pour un stage de 3 mois en juillet 2010 et un Maître de Conférences (chaire d'excellence Université/CNRS) a complété l'équipe en septembre 2010. L'utilisation des ressources du CRIHAN n'a débuté qu'en septembre 2010, le reste des travaux étant effectué sur deux stations de travail indépendantes et locales. Ces ressources sont utilisées dans le cadre suivant :

Optimisation et parallélisation massive de codes de calcul topologique (MPI et OpenMP) pour la suite de logiciels locaux AIMGRID. Collaboration étroite avec le CRIHAN, notamment avec M. Bousquet-Melou.

: optimisation et parallélisation de codes de calcul topologique pour des parallélisation n

Etudes plus appliquées de réactivité chimique (chimie organique) à l'aide du logiciel de chimie quantique Gaussian 03/09 (collaborations internes à l'IRCOF).

Publications (en RMN et Modélisation moléculaire)

1. Study of Interaction between Tiagabine HCl and 2-HP β CD: Investigation of Inclusion Procesen.
A. SUGHIR, M. SKIBA, P. LAMEIRAS, G. COADOU, M. LAHIANI-SKIBA & H. OULYADI
J. Incl. Phenom. & Macro. Chem. (20n10) 68, 55-63
2. 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 .

E. Condamine, K. Courchay, J.-C. Do Rego, J. Leprince, C. Mayer, D. Davoust, J. Costentin & H. Vaudry

Peptides (2010) 31, 962-972

3. Synthesis of Difluorinated Carbocyclic Analogues of 5-Deoxypentofuranoses and 1-Amino-5-deoxypentofuranoses : en route to Fluorinated Carbanucleosides.
G. Fourrière, G., N. Van Hijfte, G. Dutech, B. Fragnet, G. Coadou, J. Lalot, J.-C. Quirion & E. Leclerc
Tetrahedron (2010) 66, 3963-3972

Communication

1. Design and functional evaluation of pseudopeptidic analogs of 26RFa.
C. Neveu, B. Lefranc, O. Tasseau, L. Guilhaudis, J. C. Do Rego, O. Le Marec, J. Chuquet, J. Sopkova de Oliveira Santos, R. Bureau, I. Ségalas-Milazzo, J. Costentin, S. Rault, J. A. Boutin, D. Vaudry, M. Baudy-Floc'h, H. Vaudry & J. Leprince.
14th Annual Meeting of the LARC-Neuroscience network (Lille, France, 29 octobre 2010).

Affiches

1. Structure-activity evaluation of kisspeptin-10-related peptides.
L. Guilhaudis, E. Desperrois, A. Lebreton, J. Leprince, E. Gutiérrez-Pascual, A.J. Martínez-Fuentes, R. Pineda, J. Roa, M. Duran-Prado, L. Pinilla, M.M. Malagón, M. Tena-Sempere, J.P. Castaño, M.C. Tonon, H. Vaudry & I. Ségalas-Milazzo.
18th Regulatory Peptide Symposium (Belfast, Irlande, 5 - 8 septembre 2010).
2. Design and functional evaluation of [Cmpⁱ]21,aza-β3-Hht23]26RFa(21-26), a pseudopeptidic analog of 26RFa.
C. Neveu, B. Lefranc, O. Tasseau, O. Le Marec, J. C. Do Rego, J. Sopkova de Oliveira Santos, L. Guilhaudis, R. Bureau, I. Ségalas-Milazzo, J. Costentin, S. Rault, J. A. Boutin, M. Baudy-Floc'h, H. Vaudry & J. Leprince.
31th European Peptide Symposium (Copenhague, Danemark, 5 - 9 septembre 2010).
3. In vitro and in vivo activities of [Cmpⁱ]21,aza-β3-Hht23]26RFa(21-26), a pseudopeptide analog of the orexigenic neuropeptide 26RFa.
C. Neveu, O. Le Marec, O. Tasseau, B. Lefranc, J. C. Do Rego, J. Sopkova de Oliveira Santos, L. Guilhaudis, R. Bureau, I. Ségalas-Milazzo, J. Costentin, S. Rault, J. A. Boutin, M. Baudy-Floc'h, H. Vaudry & J. Leprince.
International Congress of Neuroendocrinology (Rouen, France, 11 - 15 juillet 2010).

Thèses en RMN et Modélisation Moléculaire

En co-direction :

1. Baptiste LECACHEY (thèse soutenue le 14 décembre 2009)
«Etude structurale d'agrégats mixtes organolithiés par RMN multinoyaux 1H/6Li/13C/15N. Application en additions nucléophiles énantiosélectives 1,2».
2. Gabriella BAROZZINI (thèse soutenue le 11 juin 2010)
«Organometallics in regio- and enantio-Selective Synthesis: Structures and Reactivity ».

Thèses en cours,

- en RMN et Modélisation Moléculaire

1. Julien REY (soutenance prévue en 2011)
«Caractérisation des interactions Urotensine-II (UII) / récepteur UT humain (hUT) par Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) et Modélisation Moléculaire».

2. Amélie MAROTTE (soutenance prévue en 2013)
«Conception rationnelle de nouveaux ligands du GPR103, récepteur couplé à une protéine G et cible du 26RFa».

- en Chimie Théorique

1. François Zielinski (soutenance prévue en 2012)
«Mise au point de nouveaux descripteurs de réactivité par le biais de l'analyse topologique de la densité électronique».

Collaborations en RMN et modélisation moléculaire**- 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)
4. School of Chemistry, University of Southampton (ROYAUME-UNI)

Collaborations en Chimie Théorique**- locale**

1. Equipe IRCOF « Analyse et Modélisation » : Pr. Isabelle Milazzo et Dr. Laure Guilhaudis
2. Equipe IRCOF « Chimie Bio-Organique », Dr. Xavier Franck

- nationales

1. Laboratoire d'Electrochimie, Chimie aux Interfaces et Modélisation pour l'Energie (LECIME), UMR 7575, Chimie ParisTech : Pr. Carlo Adamo
2. Laboratoire de Sciences Analytiques, UMR 5180, Université Lyon I : Pr. Henry Chermette
3. Service de Chimie Inorganique et Biologique, CEA-Grenoble : Dr. Christophe Morell

- internationales

1. Manchester Interdisciplinay Biocentre, School of Chemistry, University of Manchester Manchester (UK): Pr. Paul Popelier
2. Laboratoire de Chimie Quantique, Pontificia Universidad Catolica de Chile, Santiago (Chili): Pr. Alejandro Toro-Labbé

