



Rapport d'activité 2011 - Recueil des publications des laboratoires utilisateurs du pôle de modélisation numérique en 2011

Référence du document : ACC-AB-v1 - Révision 01 - Date de création : 29/01/2013

Validation : HP le 19/03/2013

Documents référencés : aucun

Résumé : Rapport d'Activité 2011 - Volet technique / Pôle Régional de Modélisation Numérique - Recueil des publications des laboratoires utilisateurs

Révisions :

- 01 : 29/01/2013 BC/MS
- 02 : 11/03/2013 MSC

Accessibilité

CRIHAN : **OUI**

EXTÉRIEURS : **OUI**

RESTREINT : **NON**

Table des matières

Introduction	5
Projets scientifiques et pertinents	6
Projet : 1998007	6
Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en spectroscopie et optique	
Projet : 1998022	6
Intitulé : Éléments tribolents compressibles	
Projet : 1998053	8
Intitulé : Étude de réactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	
Projet : 2002003	9
Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux hétérogènes denses	
Projet : 2003008	10
Intitulé : Simulation d'interfaces pour la méthode Level Set : application à l'atomisation de sprays	
Projet : 2003013	10
Intitulé : Développement et applications des méthodes particulières	
Projet : 2004004	12
Intitulé : Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidres de lithium de 3-aminopyrrolidines chirales.	
Projet : 2005003	12
Intitulé : Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins".	
Projet : 2005004	13
Intitulé : Modélisation moléculaire à serice de la dynamique de noyaux ligands	
Projet : 2005010	14
Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques interénantiomériques dans la synthèse de composés organofluorés et organosulfurés.	
Projet : 2005013	14
Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hydrocarbures aromatiques en cycloaddition.	
Projet : 2005014	15
Intitulé : Étude cinétique des transformations de phases dans des alliages modèles des aciers.	
Projet : 2006003	16
Intitulé : Simulation à grandes échelles de la combustion tribolente.	
Projet : 2006007	17
Intitulé : Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc	
Projet : 2006011	18
Intitulé : Simulation de collisions liquide-gaz : DNS et LES	
Projet : 2006013	18
Intitulé : Étude par DFT du mécanisme de la cooligomérisation 2:1 d'Alcynes et d'alcynes catalysés par les complexes de cobalt	
Projet : 2007001	19

Intit I : D termination de donn es thermocin tiq es par des m thodes de chimie q antiq e po r des esp ces et des r actions cl s impliq es dans l'en ironnement	
Projet : 2007003	20
Intit I : Mod lisation de l' ol tion de la microstr ct re dans n acier mod le a co rs de traitements thermiq es	
Projet : 2007013	21
Intit I : Et de ab-initio de s st mes fortement correl s	
Projet : 2008001	21
Intit I : t de des propri t s magn tiq es des s per-r sea interm talliq es D Fe2/YFe2.	
Projet : 2008002	22
Intit I : t de des str ct res et des m canismes de formation d ar l magn siates.	
Projet : 2008003	22
Intit I : M canisme de copol m risation de c t nes dis bstit s a ec des c tones.	
Projet : 2008005	22
Intit I : Et de d process s d'agr gation dans les sol tions aq e ses : Anal se par sim lation de d namiq e mol c laire classiq e et q antiq e	
Projet : 2008007	23
Intit I : t de de la catal se de r actions de Diels-Alder par les sels d tain (IV).	
Projet : 2008006	24
Intit I : t de de l'impact de la con ection profonde tropicale s r la composition chimiq e de la ha te troposph re et de la basse stratosph re.	
Projet : 2008008	24
Intit I : Sim lation en h drod namiq e a ec ne m thode SPH.	
Projets : 2008012 (comptabilis 2003006)	24
Intit I : Mod lisation N m riq e de l lastoplasticit de milie solides h t rog nes.	
Projet : 2008013	24
Intit I : Sim lations d co lements fl ides r actifs - Interactions flamme/paroi, comb stion petite chelle, comb stion stratifi e	
Projet : 2009002	25
Intit I : R gionalisation des changements climatiq es	
Projet : 2009005	26
Intit I : Mod lisation des propri t s optiq es des objets comple es	
Projet : 2009006	27
Intit I : K-Epsilon - Projet acad miq e	
Projet : 2009007	27
Intit I : Propri t s str ct rales et lectroniq es des Interfaces AlN/GaN	
Projet : 2009008	28
Intit I : Et des Combin es par Calc ls Premiers Principes et R sonance Magn tiq e N cl aire po r la R sol tion d D sordre Str ct ral Local dans les Mat ria Inorganiq es et H brides Organiq es-Inorganiq es.	
Projet : 2010006	28
Intit I : Co plage d change dans les bico ches ferromagn tiq e/antiferromagn tiq e	
Projet : 2010010	29

Intit I : Topologie q antiq e	
Projet : 2010012	29
Intit I : Et des th oriq es de process s atsmosph riq es en milie m ltiphasiq e	
Projet : 2011001	30
Intit I : Et de th oriq e d m canisme d' ne r action de carbom tallation intramol c laire	
Projet : 2011002	30
Intit I : Sim lation n m riq e en h dnod namiq e na ale par m thode SPH	
Projet : 2011005	31
Intit I : Et de s r mod les chimiq es de r actions de Friedel-Crafts appliq e la s nth se de pol ar l therc tones	
Projet : 2011007	31
Intit I : Mod lisation de s st mes nanostr ct r s : nanopartic les magn tiq es, cond cte rs ioniq es	
Projet : 2011008	32
Intit I : Et de ab-initio d process s de bio-min ralisation d carbonate de calci m	
Projet : 2011009	32
Intit I : Str ct res de basse nergie d'ions mol c laires d'int r t biologi q e isol s	
Projet : 2011010	32
Intit I : Calc l des propri t s m caniq es par homog n isation stochastiq e des matrices renforç es par des NTC (Nano T be de Carbone) dans le cadre de l' lasticit tridimensionnelle dans le cadre d' ne approche par d composition de domaine	
Projet : 2011011	33
Intit I : Mod lisation Mol c laire de Pol amides Bioso rc s	
Projet : 2011012	33
Intit I : Interaction Onde Mati re dans des nanostr ct res composites de t pe isolant/ semicond cte r/terre rare o isolant/m tal. Applications a g ides d'ondes amplificat e rs et a domaine de la plasmoniq e.	
Projet : 2011101	33
Intit I : E ploration de l'espace conformationnel des interfaces prot ines-prot ines	
Projet : 2011102	34
Intit I : Tests de performance d' n code CPU-GPU	
Contrib tions des str ct res d R sea Normand po r la Mod lisation Mol c laire	35
RNMM : SMS EA 3233	35
Intit I : Sciences et M thodes S parati es	
RNMM : CERMN	37
Intit I : Centre d'Et des et de Recherche s r le M dicament de Normandie	
RNMM : Plateforme PISSARO	39
Intit I : Plateforme Instr mentale en Sciences S parati es et Anal tiq es de Ro en	

A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe de l'annuaire technique de rapport d'activités de CRIHAN sur la période octobre 2010 - septembre 2011.

Il regroupe les travaux effectués par les laboratoires utilisateurs des ressources mises à disposition par le CRIHAN dans le cadre du Plan Régional de Modernisation Normande.

Les activités sont présentées par projet scientifique afin de leur donner une identification dans la base de données de CRIHAN.

Un projet scientifique est un programme annuel de répartition 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 à CRIHAN a préalablement fait l'objet d'une validation scientifique par des experts reconnus dans le domaine concerné : ceci évalue la pertinence du rapport entre le volume de ressources demandées (en nombre d'heures de calcul essentiellement) et le thème scientifique traité.

Un deuxième volet d'activités concerne l'utilisation des ressources logicielles et matérielles acquises dans le cadre du Réseau Normand pour la Modernisation Moléculaire par les structures de recherche membres du projet.

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

B. Projets scientifiques expertisés

1. Projet : 1998007

Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique

Famille Th matiq e : 5. Ph siq e th oriq e et ph siq e des plasmas

Porte r : Jean-G CAPUTO

Laboratoire : LMI (Mont Saint Aignan)

He res.CPU prod ites en 2011 : 52

Publications

1. J.-G. Caputo, A. Knippel and E. Simo, "Oscillations of simple networks", submitted to J. Ph. s. A, <http://arxiv.org/abs/1109.3071>
2. J. Scola, Y. D. mont, N. Keller, M. Vallée, J.-G. Caputo, I. Sheikin, P. Leja, A. Pa. trat, "Incomplete spin-reorientation in Yttrium orthoferrite", Ph. s. Re. B, (2011 In press)
3. J.-G. Caputo and B. Sarels, "Reaction-diffusion front crossing a local defect", Ph. s. Re. E, (2011 In press)
4. J. G. Caputo, N. K. Efremidis and Chao Hang, "Fourier mode dynamics for the nonlinear Schrodinger equation in one-dimensional bounded domains", Ph. s. Re. E (2011 In press)
5. J.-G. Caputo et L. Lo. kitch, "Dynamics of point Josephson junctions in a microstrip line", Ph. sica C 471, 344-356, (2011), <http://arxiv.org/abs/1004.0409>

Conférences

1. "Reaction-diffusion fronts crossing localized defects", presentation par B. Sarels à la Conférence "Nonlinear evolution equations and related phenomena: computation and theory", Université of Georgia, 4-7 A. ril 2011.
2. S. minaire par J.G. Caputo, Université Techniq. e d. Danemark, Ao. t 2011.

Principales collaborations internationales

1. A. Maimisto, Engineering Ph. sics Mosco, 4 fois professe. r in it. l'INSA de Ro. en
2. E. Simo, Professe. r d. partement de Ph. siq. e, Université de Yao. nde, Camero. n.
3. V. Konotop, Professe. r, D. partement de Ph. siq. e, Université de Lisbonne. (contrat bilat. ral Pessoa 2009-2010)
4. Y. Gaididei, Inst. Bogoli. bo. de Ph. siq. e th. oriq. e, Kie, Ukraine, Contrat demand.
5. M. P. Soerensen, Dept de Math. matiq. es, Université Techniq. e d. Danemark, Bo. rse de l'ambassade de France en 2002 et 2003

2. Projet : 1998022

Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles

Famille Th matiq e : 2a. Eco. lements non r. actifs

Porte r : Abdellah HADJADJ

Laboratoire : LMFN - CORIA (Saint Etienne d. Ro. ra)

He res.CPU prod ites en 2011 : 1 300 225

Publication dans des Revues Internationales

1. Cha. dh. ri, A., Hadjadj, A., Sadot, O., Gla. er, E. Comp. tational st. d. of shock- a. e interaction ith m. ltiple obstacles. sing immersed bo. ndar. methods. International Jo. rnal for N. merical Methods in Engineering. DOI: 10.1002/nme.3271 (2011).

- Gla er, E., Sadot, O., Hadjadj, A., Cha dh ri, A. Velocity scaling of a reflected shock wave off a circular cylinder. *Physical Review E*, 83 066317 (2011).
- Cha dh ri, A., Hadjadj, A., Chinna a, A. On the use of immersed boundary methods for shock/obstacle interactions. *Journal of Computational Physics*, 230(5): 1731-1748, (2011).
- Cha dh ri, A., Hadjadj, A., Chinna a, A., Palerm, S. Numerical Study of Compressible Mixing Layers using High-Order WENO Schemes. *Journal of Scientific Computing*, 47(2): 170-197, (2011).
- Ngomo, D., Cha dh ri, A. Chinna a, A., Hadjadj, A. Numerical study of shock propagation and attenuation in narrow tubes including friction and heat losses. *Computer and Fluids*, 39(9): 1711-1721 (2010).
- Taieb, D., Ribert, G., Hadjadj, A. Numerical simulations of shock focusing over concave surfaces. *AIAA Journal*, 48(1): 1739-1747 (2010).
- Hadjadj, A., Ben-Dor, G. Underexpanded and overexpanded supersonic jets. *International Journal of Aerospace Innovations* 2(4): 1-3 (2010).
- Perrot, Y., Hadjadj, A. Numerical simulation of overexpanded jets in internal and external flows. *International Journal of Aerospace Innovations*, 2(4): 251-256 (2010).

Conférences Internationales

- A. Chinna a, A. Hadjadj. Computational study of detonation-wave propagation in narrow channels. 22th International Colloquium on Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), University of California, Irvine, 24-29 July, 2011.
- A. Chinna a, A. Hadjadj, E. Del Prete, L. Domergé, J-F. Haas. Numerical simulation and experimental investigation of blast-wave mitigation in drag-reducing foams. 22th International Colloquium on Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), University of California, Irvine, 24-29 July, 2011.
- Y. Kitahara, J. Falcoit, A. Hadjadj, A. Cha dh ri, O. Sadot, E. Gla er, A. Britan, G. Ben-Dor. Computational study of the interaction of a planar shock wave with a cylinder/sphere: the reflected wave velocity. 28th International Symposium on Shock Waves (ISSW28), Manchester, UK, 17-22 July, 2011.
- E. Del Prete, L. Domergé, J-F. Haas, A. Chinna a, A. Hadjadj. Blast-wave attenuation by drag-reducing foams. 28th International Symposium on Shock Waves (ISSW28), Manchester, UK, 17-22 July, 2011.
- A. Chinna a, A. Hadjadj. Numerical study of detonation-wave propagation in narrow channels. 28th International Symposium on Shock Waves (ISSW28), Manchester, UK, 17-22 July, 2011.
- E. Del Prete, J.F. Haas, A. Cha dh ri, G. Jordan, L. Ho as, A. Chinna a, A. Hadjadj. Secondary atomization on two-phase shock-wave structure. 28th International Symposium on Shock Waves (ISSW28), Manchester, UK, 17-22 July, 2011.
- A. Cha dh ri, A. Hadjadj, O. Sadot, G. Ben-Dor. Study of shock-wave mitigation through solid obstacles. 28th International Symposium on Shock Waves (ISSW28), Manchester, UK, 17-22 July, 2011.
- Cha dh ri, A., Hadjadj, A., Sadot, O., Ben-Dor, G. (2010) Study of shock-wave interaction with arrays of cylinders. 21st International Symposium on Military Aspects of Blast and Shock (MABS21), Jerusalem, Israel, October 3-8, 2010.
- Del Prete, E., Chinna a, A., Hadjadj, A., Domergé, L., Haas, J.F. (2010) Numerical modeling of shock-wave attenuation by drag-reducing foams. 19th International Shock Interaction Symposium (ISIS19), Moscow, Russia, August 31 - Sept. 3, 2010.
- Cha dh ri, A., Hadjadj, A., Sadot, O., Ben-Dor, G. (2010) Study of shock-wave interaction with arrays of cylinders. 19th International Shock Interaction Symposium (ISIS19), Moscow, Russia, August 31 - Sept. 3, 2010.
- Glaser, Y., Sadot, O., Hadjadj, A., Ben-Dor, G. (2010) Experimental and numerical study of shock-wave interaction with solid obstacles. 14th International Symposium on Flow Visualization (ISFV14), Eco, Diego, Korea, June 21-24, 2010.

12. Ngomo, D., Chinna, A., Hadjadj, A. (2010) Numerical simulation of the influence of dissipative effects on the propagation of detonation waves in narrow shock tubes. V European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECOMAS CFD 2010), Lisbon, Portugal, June 14-17, 2010.
13. Taieb, D., Ribert, G., Hadjadj, A. (2010) DNS and LES of wall-bounded compressible turbulence in narrow cooling channels. 48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Orlando, Florida, Jan. 4-7, 2010.

Rapport Annuel – Centre de Recherche CTR Université de Stanford & NASA-Ames

1. Hadjadj, A., Yee, H., Sjogreen, B. (2010), LES of temporally evolving mixing layers by high-order filter schemes. Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research, Stanford University.
2. Hadjadj, A., Larsson, J., Morgan, B.E., Nichols, J.W., Lele, S.K. (2010), Large-eddy simulation of shock/boundary-layer interaction. Proceedings of the Summer Program, Center for Turbulence Research, Stanford University.

Thèses achevées

1. D. Ngomo (2010). Thèse de doctorat, INSA de Rouen.
2. D. Taieb (2010). Thèse de doctorat, INSA de Rouen.

Thèses et post-doc (en cours)

1. O. Ben-Nasr (2008-2012). Thèse de doctorat, INSA de Rouen.
2. A. Chadri (2009-2011). Post-doc, INSA de Rouen.

Stages Master

1. A. Leillain (2011). Stage Master - CORIA, INSA de Rouen.
2. A. So (2011). Stage Master - CORIA, INSA de Rouen.

3. Projet : 1998053

Intitulé : Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Nohad GRESH

Laboratoire : LPMS / FRE 2463 CNRS (PARIS)

Heures CPU produites en 2011 : 54 566

Publications portant sur la méthode SIBFA

1. The reaction mechanism of type I phosphomannose isomerases: new information from inhibition and polarizable molecular mechanics studies. C. Roze, F. Bhatt, J. Foret, B. de Coercq, N. Gresh, J.-P. Piqemal, C. J. Jefferies, and L. Salmon. *Proteins* 79, 203-220 (2011).
2. The role of cation polarization in holo- and hemi-directed $[Pb(H_2O)_n]^{2+}$ complexes and development of a Pb^{2+} polarizable force field. M. Deere, M.-C. San-Severin, O. Parisel, J.-P. Piqemal, and N. Gresh. *J. Chem. Theor. Comput.* 7, 138-147 (2011)
3. Polarizable water networks in ligand-metalloprotein recognition. Impact on the relative complexation energies of Zn-dependent phosphomannose isomerase with D-mannose 6-phosphate substrates. N. Gresh, B. de Coercq, J.-P. Piqemal, J. Foret, S. Cortioli-Legorand, and L. Salmon, *J. Phys. Chem. B*, 115, 8604-8616 (2011)
4. Interactions within the alcohol dehydrogenase Zn(II)-metalloenzyme active site: interplay between steric balance, electron correlation/dispersion, and charge transfer/ionization effects. B. de Coercq, J.-P. Dognon, C. Clagueira, N. Gresh, and J.-P. Piqemal. *Int. J. Quantum Chem.* 111, 1213-1221 (2011)

5. Man -bod E change-Rep lision in Polari able Molec lar Mechanics. I. Orbital based appro imations and applications to h drated metal cation comple es. R. Cha dret, N. Gresh, O. Parisel, and J-P. Piq emal J. Comp t. Chem. 31, 2949-2957 (2011).

Articles soumis

1. Towards Impro ed Treatment of Metal Cations in Polari able Molec lar Mechanics sing the H brid Gaussian Electrostatics / Distrib ted M ltipoles GEM/SIBFA approach. R. Cha dret, N. Gresh, O. Parisel, T. A. Darden, G. Andres Cisneros, and J-P. Piq emal. J. Chem. Ph s., so mis.
2. Towards acc rate sol ation d namics of lanthanides and actinides in ater sing polari able force fields: from gas phase energetics to h dration free energies. A. Marjolin, C. Go rlaon, C. Cla ag ra, P. Ren, J. W , N. Gresh, J-P. Dognon, J-P. Piq emal. Theoret. Chem. Acc., so mis

Conférences invitées

1. Titre: Polari able ater molec les and ligand-protein recognition.
 - a. Congr s international en R p blich e Tch q e. Intit l d Congr s: Modelling interactions in Biomolec les, Hr ba Skala, 4-9 Septembre 2011. Organisateur: Dr. Jarosla B rda, Charles Uni ersit , Prag e.
 - b) Atelier international CECAM, Laboratoire de Chimie Th ori q e (LCT), UPMC, Paris. 12-15 Septembre. Organisateur: Kenneth J. Jordan, Uni ersite de Pittsb rgh, USA, et Jean-Philip Piq emal, LCT, Paris.

Thèse encadrée

1. Mlle. Elodie Gold aser, Th se CIFRE dep is No embre 2010. Mod lisation d inhibite rs ciblant des prot ines impliq es dans l angiog n se.

Collaborations

1. Prof. Jean-Philip Piq emal, Laboratoire de Chimie Th ori q e, UMR 7616 CNRS, U. Pierre-et-Marie-C rie.
2. Dr. La rent Salmon, Laboratoire de Chimie Bioorganiq e et Bioinorganiq e, UMR 8182 CNRS, U. Paris-S d.
3. Dr. Mike De ere , Uni ersit de Bale, S isse

4. Projet : 2002003**Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses**

Famille Th mati q e : 5. Ph si q e th ori q e et ph si q e des plasmas

Porte r : Cla de ROZE

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne d Ro ra)

He res.CPU prod ites en 2011 : 39 505

Publications

1. S. Idlahcen, C. Ro , L. M s, T. Girasole and J.B. Blaisot. S b-picosecond ballistic imaging of a liq id jet E p. Fl ids. doi:10.1007/s00348-011-1220-1 (2011).

Stages

1. G. Va dor, Sim lation n m ri q e d ne mes re de itesse s r n jet Diesel , Rapport de Master 2, j illet 2011.

Thèses

1. Y. Y an, Sim lation de la diff sion de la l mi re par n objet irr g lier et application l imagerie des spras , th se de l Uni ersit de Ro en (so tenance d b t 2012).

5. Projet : 2003008**Intitulé : Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray**

Famille Thématique : 2b. Éléments réactifs et multiphasiques

Porteur : Alain BERLEMONT

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne de Roanne)

Heures CPU produites en 2011 : 48 983

Publications

1. J. Chesnel, J. Reaillon, T. Menard, F.X. Demolin, *Spectral analysis of liquid jet atomization*, *Atomization and Spray Technology*, 21(1): 41-67, 2011

Articles soumis

1. J. Cosin, A. Berlemont, T. Menard, S. Grot, *Primary breakup simulation of a liquid jet discharged by a nozzle - Pressure field and noise*, *Submitted to Computers and Fluids*, 2011.
2. B. Dret, G. Loret, T. Menard, A. Berlemont, J. Reaillon, F.X. Demolin, *DNS analysis of turbulent mixing in two-phase flows*, *Submitted to International Journal of Multiphase Flow*, 2011

Conférences internationales

1. G. Loret, T. Menard, A. Berlemont, J. Reaillon, F.X. Demolin, *DNS analysis of interactions between turbulence and evaporating liquid-gas interface*, *24th European Conference on Liquid Atomization and Sprays*, Sorbus, Portugal, 2011.

Thèses

1. Emeline Noll, *Stabilité et déformation*, 2012

Projets

1. Projet européen FIRST (Fuel Injector Research for Sustainable Technology).

6. Projet : 2003013**Intitulé : Développements et applications des méthodes particulières**

Famille Thématique : 2a. Éléments non réactifs

Porteur : Grégor PINON

Laboratoire : LMPG EA 2255 (LE HAVRE)

Heures CPU produites en 2011 : 209 747

Article avec comité de lecture

1. J-M. Cherfils, G. Pinon, and E. Rioualen. *The Immersed Boundary Method applied to Smoothed Particle Hydrodynamics with remeshing*. *Submitted to Journal of Computational Physics*.
2. G. Pinon, P. Mankin, G. Germain, and E. Rioualen. *Numerical simulation of the wake of marine current turbines with particle method*. *Submitted to Renewable Energy*.
3. J-M. Cherfils, G. Pinon, and E. Rioualen. *JOSEPHINE : A parallel SPH code for free-surface flows*. *Submitted to Computer Physics Communications*.
4. G. Perret, A. Poppard, G. Pinon, N. Bonneton, E. Rioualen, and J. Brossard. *Vortex kinematics around a submerged plate under water waves. Part I : Experimental analysis*. *Submitted to European Journal of Mechanics B/Fluids*.

5. T. Bachetti, J.M. Etancelin, J.V. Facq, B. Gariier, G. Germain, F. Maganga, P. Mcek, G. Pinon, and E. Ri oalen. Vers ne caract risation r aliste des conditions de fonctionnement des h droliennes. In proof in : La Ho ille Blanche, International Water Jo rnal, 2011.
6. F. Maganga, G. Germain, J. King, G. Pinon, and E. Ri oalen. Flo characteristic effects on marine c rrent t rbine beha io r and on its ake properties. IET Rene . Po er Gener., Vol. 4(6) :doi :10.1049/iet rpg.2009.0205 p. 498 509, 2010.

Autres productions scientifiques

1. G. Pinon. Les jets d In erse rs de po ss e d n a ion en phase d atterrissage. Broch ditions Un ersitaires E rope nnes - ISBN-10 : 6131508658 - ISBN-13 : 978- 6131508653, 2010.
2. G. Pinon, J-M Cherfils, E. Ri oalen, and S. H berson. Code 3D Partic laire - d p t de licence : APP (Agence po r la Protection des Programmes). Inter Deposit Digital N mber - N mero Adh rent : 09.76.12643, IDDN.FR.001.480048.000.S.P.2010.000.31235, 3 dec. 2010.

Conférences internationales avec comité de lecture

1. P. Mcek, B. Gariier, G. Germain, C. Lothod , G. Pinon, and E. Ri oalen. Caract risation n m riq e et e p rimentale des interactions entre de h droliennes. 2 me Conf rence M diterran enne C ti re et Maritime, Tanger, Marocco, 22-24 No 2011.
2. P. Mcek, B. Gariier, G. Germain, G. Pinon, and E. Ri oalen. N mercial and e perimental st d of the interaction bet een t o marine c rrent t rbines. Proceedings of the 9th E ropean Wa e and Tidal Energ Conference (EWTEC), So thampton, UK, September, 5-9 2011.
3. A. Po pardin, N. Bo rneton, G. Perret, G. Pinon, E. Ri oalen, and J. Brossard. H drod namics pert rbations generated b a es and s bmerged str ct res s ch as marine energ con erters. Proceedings of the 9th E ropean Wa e and Tidal Energ Conference (EWTEC), So thampton, UK, September, 5-9 2011.
4. A. Po pardin, N. Bo rneton, G. Perret, G. Pinon, E. Ri oalen, and J. Brossard. Vorte d namics aro nd an immersed str ct re. EGU General Assembl 2011 (EGU), Vienna, A stria, April, 3-8 2011.
5. F. Maganga, G. Pinon, G. Germain, and E. Ri oalen. Wake properties characterisation of marine c rrent t rbine. 3rd International Conference on Ocean Energy (ICOE), Bilbao, Spain, 6-8 oct. 2010.
6. J-M. Cherfils, L. Blonce, G. Pinon, and E. Ri oalen. IB-SPH sim lations of a e-bod interactions. 5th international SPHERIC orkshop, Manchester, UK, J ne, 23-29 2010.

Conférences nationales avec comité de lecture

1. J-M. Cherfils, L. Blonce, G. Pinon, and E. Ri oalen. Sim lation en m thode partic laire de l interaction ho le-o rages marins. 12 me Jo rn e de l H drod namiq e, Nantes, France, 17-19 no . 2010.
2. G. Germain, F. Maganga, B. Gariier, J.V. Facq, T. Bachetti, G. Pinon, E. Ri oalen, and J.M. Etancelin. Vers ne caract risation r aliste des conditions de fonctionnement des h droliennes. 12 me Jo rn e de l H drod namiq e, Nantes, France, 17-19 no . 2010.
3. A. Po pardin, N. Bo rneton, G. Perret, G. Pinon, E. Ri oalen, and J. Brossard. Sillages to rbillonnaires des str ct res immerg es. XI mes Jo rn es Nationales G nie C tier / G nie Ci il, Les Sables d Olonne, France, (DOI :10.5150/jngcgc.2010.089-P - ISBN 978-2- 35921-003-3) :p. 803 812, 2010.
4. J-M. Cherfils, L. Blonce, G. Pinon, and E. Ri oalen. Sim lation en m thode partic laire des sollicitations h drod namiq es d o rages marins. XI mes Jo rn es Nationales G nie C tier / G nie Ci il, Les Sables d Olonne, France, (DOI :10.5150/jngcgc.2010.009- C - ISBN 978-2-35921-003-3) :p. 69 78, 22-24 J in 2010.
5. F. Maganga, G. Germain, J.V. Facq, B. Gariier, E. Ri oalen, and G. Pinon. Caract risation e p rimentale d sillage g n r par ne h drolienne - infl ence d ta de t rb lence ambient. XI mes Jo rn es Nationales G nie C tier / G nie Ci il, Les Sables d Olonne, France, (DOI :10.5150/jngcgc.2010.088-M - ISBN 978-2-35921-003-3) :p. 795 802, 22-24 J in 2010.

Thèses soutenues

1. J-M. Cherfils : Développement et applications de la méthode SPH à la caractérisation de surfaces libres. Thèse soutenue le 17 mars 2011
2. F. Maganga : Soutenance prévue en décembre 2011

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantitative et modélisation moléculaire

Porteur : Jacques MADDALUNO

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures CPU produites en 2011 : 92 394

Publications

1. Are sp³ Lithiated Carbons More Nucleophilic than sp² or sp³ Ones? A Comparative DFT Study of the Condensation of Propenyl Lithium Aggregates on Formaldehyde. Fressigne, C; Maddaluno, J, J. Org. Chem. 2010, 75, 1427-1436
2. First Stoichiometric Version of the Catalytic Enantioselective Addition of an Alkyl Lithium to an Aldehyde. Lecache, B; Fressigne, C; Olladi, H; Harrison-Marchand, A; Maddaluno, J., Chem. Commun. 2011, 47, 9915-9917.

Communication

1. Catalytic enantioselective 1,2-addition of methyllithium on tolaldehyde by real-time matching of the lithiated partners, 17th European Symposium on Organic Chemistry (ESOC 17), Heraklion (Crete), 14-18 July 2011

Thèse en cours

1. Deprotonation and condensation: a DFT theoretical study of the interaction between an enolisable carbon compound and lithiated bases/nucleophiles, Marchois J.

Collaborations

Prof Hassan Olladi, Université de Rouen (ANR)

Prof. Annie-Claude Gamont, ENSI Caen

Prof. Hélène Gérard, Université Paris VI (ANR)

Prof. Jean-Marc Campagne, ENSCM Montpellier (ANR)

8. Projet : 2005003**Intitulé : Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins".**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Denis LEDUE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne de Roubaix)

Heures CPU produites en 2011 : 3 257

Publications

1. D. Ledue, R. Patte, H. Kachkachi, "Dimensional susceptibility of weakly interacting ferromagnetic nanoclusters", Journal of Nanoscience and Nanotechnology (2011), in press

Affiches

1. D. Led e, D. Brinis, H. Kachkachi, R. Patte, "Infl ence des interactions dipolaires s r la s ceptibilit d namiq e d'assembl es d'agr gats ferromagn tiq es", XIV me Colloq e Lo is N el "Co ches minces et nanostr ct res magn tiq es", Brest (20-23 septembre 2011)

Communications

1. D. Led e, H. Kachkachi, R. Patte, "D namic s ceptibilit of ordered-s stems of ferromagnetic nanocl sters : Effect of dipolar interactions", 5th International Conference on S rfaces, Coatings and Nanostr ct red Materials (NANOSMAT-5), Reims, France (18-21/10/2010)
2. D. Brinis, D. Led e, A. Laggo n, "D namiq e d'aimantation dans les assembl es d'agr gats ferromagn tiq es : Effet des interactions dipolaires", Jo rn e des doctorants d Gro pe de Ph siq e des Mat ria , 15 j in 2011

Collaborations

Uni ersit de Bo merdes (Alg rie)

Uni ersit de Perpignan

Thèses

1. Drifa Brinis, "D namiq e d'aimantation dans les assembl es d'agr gats ferromagn tiq es : Effets des interactions", Th se de l Uni ersit de Ro en, septembre 2010.

9. Projet : 2005004**Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands**

Famille Th matiè e : 7. D namiq e mol c laire appliq e la biologie

Porte r : Jana SOPKOVA

Laboratoire : CERMN (CAEN)

He res.CPU prod ites en 2011 : 827

Voir projet RNMM : CERMN en fin de document

10. Projet : 2005010**Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.**

Famille Th matiq e : Chimie

Porte r : Eric HENON

Laboratoire : UMR 6519 (REIMS)

He res.CPU prod ites en 2011 : 3 135

Publication

1. Aline Banchet-Cadedd , Eric H non , Man el Da che , Jean-H g es Rena lt, Fann Monnea , and Arna d Ha drech , The Stim lating ad ent re of KRN7000 , Org. & Biomol. Chem., 9 (2011), 3080-3104: a re ie

Communications

1. C. Barberot, H. Khartabil, C. S alata, J. Sapi , S. G rard, E. H non, Primar amine addition to an nsat rated bromoderi ati e of le linic acid: a comp tational st d , Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Comp tational Chemists (WATOC), Saint-Jacq es de Compostelle, Espagne, 17-22 j illet 2011
2. H. Khartabil, M. Laron e-Cochard, J. Sapi, E. H non, Ne isothia olone deri ati es obtained b a Diels-Alder c cloaddiiton : a theoretical st d , Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Comp tational Chemists (WATOC), Saint-Jacq es de Compostelle, Espagne, 17-22 j illet 2011
3. C. Coiffier, E. H non, P. Goekjian and A. Ha drech , Anal sis of preferred conformations of C-F ranosides b means of q ant m mechanics approaches, Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Comp tational Chemists (WATOC), Saint-Jacq es de Compostelle, Espagne, 17-22 j illet 2011

Thèses impliquées par des calculs réalisés en partie au CRIHAN

1. Claire Coiffier 2009-2011 Approche top-do n po r la recherche de s bstrats biologiq ement actifs : Anal se des conformations pr f rentielles de C-f ranosides
2. Chantal Barberot 2010- Conception orient e par mod lisation mol c laire de mol c les d int r t th rape tiq e: e ploitation d pharmacophore p rida inone po r le traitement potentiel des maladies bronchop lmonaires
3. Mariam Cho mane 2011- " Et de par mod lisation mol c laire d alpha-galactos lc ramides is e th rape tiq e, analog es d KRN 7000 "

11. Projet : 2005013**Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.**

Famille Th matiq e : 8. Chimie q antiq e et mod lisation mol c laire

Porte r : Isabelle CHATAIGNER

Laboratoire : LFAOC - IRCOF (Mont Saint Aignan)

He res.CPU prod ites en 2011 : 38 219

Publications

1. Dentel, H.; Chataigner, I.; Le Ca elier, F.; G lea, M. Tetrahedron Lett. 2010, 51, 6014-6017. " First catal tic enantioselecti e rsion of a thia hetero-Diels–Alder reaction ith dithioesters."
2. Dentel, H.; Chataigner, I.; Lohier, J.-F. ; G lea, M. in preparation As mmetric Diastereoselecti e thia-Hetero-Diels-Alder Reactions of dithioesters.

3. Lee, S. ; Diab, S. ; Q e al, P. ; Sebban, M. ; Chataigner, I. ; Piettre, S. R. in preparation
Aromatic Carbon-Carbon Double Bonds as Dipolarophiles : Facile Transformations of Benzene Derivatives and Other Aromatic Rings into Functionalized Polycycles .
4. Chataigner, I. ; Gérard, H. in preparation
Selectivities of the domino multicomponent [4+2]/[3+2] cycloadditions of nitroheteroaromatics with substituted alkenes : a DFT analysis

Conférences - Séminaires

1. 03/03/11: Université de Southampton, Southampton (UK)
"Dearomatization Reactions by Cycloadditions "
2. 28/04/11: Université de Florence, Florence (Italie)
"Dearomatization Reactions by Cycloadditions "
3. 21/10/11: Université de Nantes, Nantes (France)
"Dearomatization Reactions by Cycloadditions "

Communications

1. 07/10 : ISCC-9, Florence (Italie), 1 Poster
" Dearomatizing Tandem cascade [4+2]/[3+2] Cycloadditions on nitroarenes."
2. 07/11 : ESOC, Hersonisos (Greece), 1 Poster
" Dearomatizing Tandem cascade [4+2]/[3+2] Cycloadditions on nitroarenes."

Collaborations

Avec le Dr. H. I. ne Gérard, Laboratoire de chimie théorique, UPMC, Paris VI.
Avec le Dr. Mihaela G. lea, LCMT de Caen
Avec les Pr. Laurent Jobert et Dr. Vincent Tognetti, UMR COBRA, Rouen

12. Projet : 2005014**Intitulé : Etudes cinétiques des transformations de phases dans des alliages modèles des aciers.**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Cristelle PAREIGE

Laboratoire : GPM UMR 6634 CNRS - Université de Rouen

Heures CPU produites en 2011 : 400

Publications

1. C. Pareige, M. Rossel, S. Noé, V. K. ksenko, P. Olsson, C. Domain, P. Pareige, "Kinetic study of phase transformation in a highly concentrated Fe-Cr alloy : Monte Carlo simulation versus experiments", Acta Mater. 59 (2011) 2402-2411.

Communications dans des congrès internationaux

1. C. Pareige, M. Rossel, S. Noé, V. K. ksenko, P. Olsson, C. Domain, "Kinetic study of phase transformation in a Fe-25%Cr alloy at 500 C: Monte Carlo simulation versus experiments", EuroMat 2011, Montpellier, France, septembre 2011

Communications dans des workshops internationaux

1. C. Pareige, V. K. ksenko, P. Pareige, "Intra-granular precipitation and inter-granular segregation under neutron irradiation in some Fe-Cr alloys - comparison with ion irradiation", 19th Workshop on Multiscale Modelling of and basic experiments on FeCr Alloys, Stockholm, 8-9 novembre 2011

13. Projet : 2006003**Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.**

Famille Thématique : 2b. Éléments réactifs et multiphasiques

Porteur : Pascale DOMINGO

Laboratoire : LMFN - CORIA (Saint Etienne de Roza)

Heures CPU produites en 2011 : 3 065 456

Publications

1. G. Ribert, K. Wang, L. Verisch (2011) A multi-scale self-similar chemistry tabulation with application to auto-ignition including cool-flames effects, *Fuel*, [doi:10.1016/j.fuel.2011.07.036](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2011.07.036)
2. N. Enjalbert, P. Domingo, L. Verisch (2011) time-history effects in Large Eddy Simulation of non-premixed turbulent flames: Flow-Controlled Chemistry Tabulation, *Combustion and Flame*, [doi:10.1016/j.combustflame.2011.06.005](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.06.005)
3. G. Lodier, L. Verisch, V. Moëreau, P. Domingo (2011) Composition-space premixed flamelet solution with differential diffusion for in situ flamelet-generated manifolds, *Combustion and Flame* [Vol. 158, Issue 10](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.06.005)
4. V. Moëreau, P. Domingo, L. Verisch (2011) From Large-Eddy Simulation to Direct Numerical Simulation of a lean premixed swirl flame: Filtered Laminar Flame-PDF modeling, *Combustion and Flame* 158(7): 1340-1357 [4]
5. V. Moëreau, P. Domingo, L. Verisch (2011) Design of a massively parallel CFD code for complex geometries *C.R. Mécanique* 339(2/3): 141-148.
6. K. Wang, G. Ribert, P. Domingo, L. Verisch (2010) Self-similar behavior and chemistry tabulation of burnt-gases diluted premixed flamelets including heat-loss *Combustion and Modelling* 14(4): 541-570.

Communications & posters

1. 3 communications : Congrès français de mécanique
2. 3 communications : International Conference Numerical Combustion
3. 3 communications : ICDERS
4. 2 posters : European Combustion meeting

Collaboration

1. EM2C : Ecole Centrale Paris
2. CERFACS
3. Georgia Tech (USA)

Thèses

9 thèses en cours

14. Projet : 2006007**Intitulé : Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Helena ZAPOLSKY

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne de Roanne)

Heures CPU produites en 2011 : 39 694

Publications

1. J. Boisse, H. Zapolsk, A.G. Khachatryan Atomic-scale modeling of nanostructure formation in Fe-Ga alloys with giant magnetostriction: Cascade ordering and decomposition, Acta Mat. V.59, pp. 2656-2668.
2. N. Masquelier, H. Zapolsk, W. Lefebvre, S. G. Fries, R. Patte and P. Pareige, "Precipitation kinetics study of Al₃Zr-X(Sc or Ti) alloys by phase field simulations and atom probe tomography", Solid State Phenomena, Vols. 172-174 (2011) pp 869-874
3. M. Certain, H. Zapolsk and A.G. Khachatryan, "Atomic density function simulations of crystal growth kinetics of FCC crystal and BCC-FCC transition", Solid State Phenomena, Vols. 172-174 (2011) pp 1234-1239

Communications

1. H. Zapolsk From atomistic to mesoscale description of phase transitions, The 36-th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, April 2011, Lviv, Ukraine
2. H. Zapolsk Atomic density function modeling of phase transitions Laboratoire de Physique of Nonlinear Media, March 2011, Tomsk, Russia.
3. M. Ekholm, H. Zapolsk, A. Raban, I. Vernhara, D. Ledev, I. Abrikosov "Influence of the Magnetic State on the Chemical Order-Disorder Transition Temperature in Fe-Ni Permalloys", APS March Meeting 2011, March 21-25, 2011; Dallas, Texas
4. Y. Khon, H. Zapolsk, P. Kaminski Mechanism of pattern formation on the crystal surface in the domain of elasticity, MESO 2011, September 2011, Tomsk, Russia.
5. J. Boisse, H. Zapolsk, A.G. Khachatryan Atomic-scale modeling of nanostructure formation in Fe-Ga alloys with giant magnetostriction: Cascade ordering and decomposition, EUROMAT 2011, Montpellier, 2011.
6. N. Masquelier, W. Lefebvre, R. Patte, H. Zapolsk, "Kinetics of precipitation of metastable Al₃Zr L12 phase at 400 C", EUROMAT 2011, Montpellier.

Affiches

1. N. Masquelier, W. Lefebvre, R. Patte, H. Zapolsk, "Etude de la cinétique de précipitation de la phase métastable Al₃Zr (L12)", Journée des doctorants de l'Ecole Doctorale SPMII, Roanne, 12 avril 2011
2. M. Certain, H. Zapolsk, "Modéliser les matériaux : méthode de Champ de Phase Cristallin", Journée des doctorants de l'Ecole Doctorale SPMII, Roanne, 12 avril 2011

Collaborations

Neans, Laboratoire de Mathématiques et Applications (Université de Poitiers)

Thèses en cours

1. Marilène Certain, "Champ de phase et champ de phase cristallin pour l'étude de la croissance et coalescence de précipités Al-Zr-Sc", (octobre 2008 -)
2. Nicolas Masquelier, "Caractérisation et modélisation de transformations microstructurales pour la mise à point d'une nouvelle génération d'alliages d'aluminium pour conducteurs électriques", (septembre 2009-)

Stages

1. Manon Bonalet, "Etude de la cinétique de précipitation dans Al - Zr en champ de phase", (Université de Rouen, M1), mars-mai 2011
2. Antoine Vaigeoin, "Modélisation des transitions de phases à l'échelle atomique" (Université de Rouen, L3) 14 avril 2011-16 juin 2011

15. Projet : 2006011**Intitulé : Simulation d'écoulements liquide-gaz : DNS et LES**

Famille Thématique : 2b. Écoulements réactifs multi-phasiques

Porteur : François-Xavier DEMOULIN

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne de Rouen)

Heures CPU produites en 2011 : 100

Publication

1. J. Chesnel, J. Reillon, T. Mard, F.X. Demolin, "Subgrid analysis of liquid jet atomization, Atomization and Spray Technology", 21(1): 41-67, 2011

Cours dans une école d'été

1. F.X. Demolin, "Turbulence in liquid-gas flow with interface deformation", Summer School ANISO 2011, Morphology and dynamics of anisotropic flows, 18th July, Cargèse, Corsica, 2011

Conférences:

1. F.X. Demolin, J. Reillon, J. Chesnel and B. Dret, "Towards full coupled modeling of liquid atomization and dispersed spray", 1st Ercoftac Conference on simulation of multiphase flows in Gasification and Combustion, 2011.
2. Dret, B., Mard, T., Berlemont, A., Reillon, J., Demolin, F.-X. "DNS analysis of interactions between turbulence and evaporating liquid-gas interface. In: 24th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems. Istoril, Portugal, 2011.

16. Projet : 2006013**Intitulé : Etude par DFT du mécanisme de la cooligomérisation 2:1 d'Alcynes et d'alcènes catalysée par les complexes du cobalt**

Famille Thématique : 8. Chimie organique et modélisation moléculaire

Porteur : Vincent GANDON

Laboratoire : UMR 7611, C229 (PARIS)

Heures CPU produites en 2011 : 43 459

Publications

1. Enantioselective Ir(I)-Catalyzed Carbocyclization of 1,6-Enynes Using the Chiral Counterion Strategy. Barbaanges, M.; Aguiar, M.; Mossa, J.; Amori, H.; Albert, C.; Desmarests, C.; Fensterbank, L.; Gandon, V.; Malacria, M.; Ollier, C. Chem. Eur. J. 2011, accepté.
2. Tracking Gold Acetylides in Gold(I)-Catalyzed Cycloisomerization Reactions of Enynes. Simonneau, A.; Jaroschik, F.; Lesage, D.; Karanik, M.; Gillot, R.; Malacria, M.; Tabet, J.-C.; Goddard, J.-P.; Fensterbank, L.; Gandon, V.; Gimbert, Y. Chem. Sci. 2011, DOI: 10.1039/C1SC00478F.

- Using Na aro Electrocli ation to Stage Chemoselecti e [1,2]-Migrations: Stereoselecti e S nthesis of F nctionali ed C clopentenones. Leb f, D.; H ang, J.; Gandon, V.; Frontier, A. J. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, DOI: 10.1002/anie.201104870
- Acti ated Phenacenes from Phen lenes b Nickel-Catal ed Alk ne C cloadditions. G , Z.; Bo rsalian, G. B.; Gandon, V.; Padilla, R.; Shen, H.; Timofee a, T. V.; Tong a, P.; Vollhardt, K. P. C.; Yako enko, A. A. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, DOI: 10.1002/anie.201103428
- Sol ent/Base Effects in the Selecti e One-Pot S nthesis of Phenanthridinones in ol ing High-Valent Palladi m Species: E perimental and Theoretical St dies. Donati, L.; Lepro , P.; Prost, E.; Michel, S.; Tilleg in, F.; Gandon, V.; Por e, F.-H. *Chem. E r. J.* 2011, DOI: 10.1002/chem.201101354.
- A -Catal ed 1,3-Ac lo Migration/5-e o-dig C cli ation/1,5-Ac l Migration of Di n l Esters. Leb f, D.; Simonnea , A.; A bert, C.; Malacria, M.; Gandon, V.; Fensterbank, L. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, 50, 6868–6871.
- Ne Elements in the Gold(I)-Catal ed C cloisomeri ation of En nol Ester Deri ati es Embedding a C clohe ane Template. Harrak, Y.; Makhlo f, M.; A aro, S.; Mainetti, E.; Lope Romero, J. M.; Cario , K.; Gandon, V.; Goddard, J.-P.; Malacria, M.; Fensterbank, L. *J. Organomet. Chem.* 2011, 696, 388–399
- A Galli m-Catal ed C cloisomeri ation/Friedel Crafts Tandem. Li, H.-J.; G illot, R.; Gandon, V. *J. Org. Chem.* 2010, 75, 8435–8449.
- Cobalt-Mediated Linear 2:1 Cooligomeri ation of Alk nes ith Enol Ethers to Gi e 1-Alko -1,3,5-Trienes: A Missing Mode of Reacti it . Leb f, D.; Ianna o, L.; Gen , A.; Malacria, M.; Vollhardt, K. P. C.; A bert, C.; Gandon, V. *Chem. E r. J.* 2010, 16, 8904–8913.

17. **Projet : 2007001**

Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement

Famille Th mati q e : 8. Chimie q antiq e et mod lisation mol c laire

Porte r : Florent LOUIS

Laboratoire : PC2A (Villene e d Ascq)

He res.CPU prod ites en 2011 : 43 655

Publications

- CANNEAUX S., WALLET A., RIBAUCCOUR M., LOUIS F., A Theoretical St d of the NCN ($^3\Sigma^-$) Biradical Thermochemical Properties: Implications for comb stion chemistr , *Computational and Theoretical Chemistr* , 967, 67-74, 2011
- LOUIS F., CERNUSAK I., CANNEAUX S., MECIAROVA K., Atmospheric reacti it of CH_3I and CH_2I_2 ith OH radicals: A Comparati e st d of the H- ers s l-abstraction. *Computational and Theoretical Chemistr* , special iss e Theoretical chemistr of atmospheric processes, 965, 275-284, 2011
- MECIAROVA K., SULKA M., CANNEAUX S., LOUIS F., CERNUSAK I. A Theoretical St d of the Kinetics of the For ard and Reerse Reactions $\text{HI} + \text{CH}_3 = \text{I} + \text{CH}_4$, *Chemical Ph sics Letters*, 517, 149-154, 2011.
- HAMMAECHER C., CANNEAUX S., LOUIS F., CANTREL L. A Theoretical St d of the H-abstraction Reactions from HOI b Moist Air Radiol tic Prod cts (H, OH, and O (3P)) and Iodine Atoms ($2P_{3/2}$) *Jo rnal of Ph sical Chemistr A*, 115, 6664-6674, 2011

Communications orales dans des colloques et congrès avec actes

- ČERNUŠ K I., MEČIAROV K., ŠULKA M., SUDOLSK M., LOUIS F., CANNEAUX S., CANTREL L. Hea iodine in spotlight, 4th Japan-C ech-Slo ak S mposi m for Theoretical and Computational Chemistr , B šice (R p bliq e Tch q e), 18-20 Mai 2011.

2. ČERNUŠ K I., LOUIS F., MEČIAROV K., CANNEAUX S., ŠULKA M., Atmospheric chemistr of iodine World Association of Theoretical and Comp tational Chemists (WATOC), Santiago de Compostela (Espagne), 17-22 J illet 2011
3. CANTREL L., BADAWI M., LOUIS F., CANNEAUX S., Abilit of theoretical chemistr to predict thermochemistr and reacti it of gaseo s caesi m species of n clear safet interet, World Association of Theoretical and Comp tational Chemists (WATOC), Santiago de Compostela (Espagne), 17-22 J illet 2011

Communications orales dans des colloques et congrès sans actes

1. MEČIAROV K., ŠULKA M., ČERNUŠ K I., LOUIS F., CANNEAUX S., Atmospheric reacti it of iodoalkanes ith OH radicals, Gro pe de Cin tiq e et de Photochimie en Phase Ga e se, Villene e d Ascq, 30-31 Mai 2011

Affiches dans des colloques et congrès avec actes

1. MEČIAROV K., ŠULKA M., ČERNUŠ K I., LOUIS F., CANNEAUX S., The reacti it of OH radical to ard CH_2Cl molec le in the atmosphere, 4th Japan-C ech-Slo ak S mposi m for Theoretical and Comp tational Chemistr , B šice (C ech Rep blic), 18-20 Mai 2011
2. LOUIS F., MEČIAROV K., ŠULKA M., COURTS T., HAMMAEACHER C., CANNEAUX S., ČERNUŠ K I., Reacti it of halogenated alkanes: implications for the en ironment, 10th Central E ropean S mposi m on Theoretical Chemistr , Tor n (Pologne), 25-28 Septembre 2011

Collaborations

Uni ersit de Reims Champagne Ardenne (Thiba d Co rs)
Comeni s Uni ersit , Bratisla a (I an Cern sak)

18. Projet : 2007003

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

Famille Th mati q e : Mat ria

Porte r : Nicolas LECOQ

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne d Ro ra)

He res.CPU prod ites en 2011 : 75

Publications

1. E. Henr , E. Andrie , J. Laca e, F. Danoi , N. Lecoq, "St d b differential thermal anal sis of re erse spinodal transformation in 15-5 PH allo ", Solid State Phenomena, Vols. 172-174 (2011) pp 338-343
2. N. Lecoq, J. Laca e, F. Danoi , R. Patte, "Phase-field modelling of spinodal decomposition d ring ageing and heating", Solid State Phenomena, Vols. 172-174 (2011) pp 1072-1077
3. N. Lecoq, H. Zapolsk , P. Galenko, "N merial appro imation of the Cahn-Hilliard eq ation ith memor effects in the d namic of phase separation", Discrete and Contin o s D namical S stems, 2011, in press
4. M. Grasselli, N. Lecoq and M. Pierre, "A long-time stable f ll discrete appro imation of the Cahn-Hilliard eq ation ith inertial term", Discrete and Contin o s D namical S stems, 2011, in press

Collaborations

CIRIMAT (To lo se)

Stage

1. G. Lar e, "Caract risation d' n alliage Fe-Cr par la m thode des champs de phase", (Uni ersit de Cerg - Pontoise, L3) a ril-j in 2011

19. Projet : 2007013**Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Sébastien PETIT

Laboratoire : CRISMAT (CAEN)

Heures CPU produites en 2011 : 151 445

Publication

1. B. Stöger, M. Weil, Enrique J. Baran, A. C. González-Baro, S. Malo, J.-M. Le Ruff, S. Petit, M.-B. Lepetit, B. Raebia, N. Barrier, The dehydration of $\text{SrTeO}_3(\text{H}_2\text{O})$ - a topotactic reaction for preparation of the new metastable strontium orthotellurate(IV) phase $\beta\text{-SrTeO}_3$, Dalton Transactions 40, 5538 (2011).

Articles soumis

1. M.B. Lepetit, B. Merce, C. Simon, Understanding interface effects in perovskite thin films, soumis Phys. Rev. Letters.
2. J. Soret, M.B. Lepetit, Electronic structure of the $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ compound from ab initio interactions, soumis Phys. Rev. B.
3. K. Singh, N. Bellido, C. Simon, J. Varignon, M.-B. Lepetit, A. De Meyer, S. Pailhès, Role of ferromagnetic component in the ferroelectricity of YMnO_3 , soumis Phys. Rev. B.
4. S. Chassin, M.-B. Lepetit, O. Perez, R. Reto, J.M. Le Ruff, C. Simon, L. Le Plâtre, P.A. Jaffrés, Influence of the alkyl chain length on the magnetic properties of Copper(II) n-alkylphosphonates from single crystal and powder structure studies, soumis pour publication.

Communication

1. M.-B. Lepetit, Ab initio determination of effective models in magnetic compounds, actes de French-Japanese symposium on quantum magnetism in spin, charge and orbital systems.

Thèse

1. Julien VARIGNON, Etude de découplage magnéto-électrique par des calculs ab initio, thèse de l'Université de Caen-Basse Normandie soutenue le 26 octobre 2011.

20. Projet : 2008001**Intitulé : Étude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques $\text{DyFe}_2/\text{YFe}_2$.**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Pierre-Emmanuel BERCHE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne de Rouen)

Heures CPU produites en 2011 : 5 214

Publication

1. "Monte Carlo simulation of the magnetic exchange spring system $\text{DyFe}_2(1)/\text{YFe}_2(4)$.", S. Djedai and P.E. Berche, Journal of Physics: Conference Series 286 (2011) 012036
http://iopscience.iop.org/1742-6596/286/1/012036/pdf/1742-6596_286_1_012036.pdf

Communication

1. "Monte carlo simulation of the magnetic exchange spring system $D_{Fe2(1)}/YFe2(4)$ in function of the temperature", S. Djedai, P.E. Berche, C. Dufour, Condensed Matter and Material Physics (CMMP10) Warwick University, Coventry, Roma-University (14/16-12-2010)

Affiche

1. "Simulation Monte Carlo de couplage d'échange dans le système $D_{Fe2(1)}/YFe2(4)$ en fonction de la température", S. Djedai, P.E. Berche, K. Desnail, C. Dufour, Nanomagnetism and Spintronics, 24-25/11/2010, Grenoble

Collaboration

Université de Tébessa

Thèse

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

21. Projet : 2008002**Intitulé : Étude des structures et des mécanismes de formation d'arylmagnésiates.**

Famille Thématique : Chimie

Porteur : Georges DUPAS

Laboratoire : LCOFH (Mont Saint Aignan)

Heures CPU produites en 2011 : 853

Voir projet 2011005

22. Projet : 2008003**Intitulé : Mécanisme de copolymérisation de cétènes disubstitués avec des cétones.**

Famille Thématique : Chimie

Porteur : Georges DUPAS

Laboratoire : LCOFH (Mont Saint Aignan)

Heures CPU produites en 2011 : 2872

Voir projet 2011005

23. Projet : 2008005**Intitulé : Etude du processus d'agrégation dans les solutions aqueuses : Analyse par simulation de dynamique moléculaire classique et quantique**

Famille Thématique : Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Abdenacer IDRISSE

Laboratoire : LASIR (Villeneuve d'Ascq)

Heures CPU produites en 2011 : 263 409

Publications

1. Reorientation relation in supercritical ammonia, I. Valo, M. Kisele, T. Tassaing, J.C. Soetens, M. Federo, P. Dama, A. Idrissi, J. Mol. Liq., Année: 2011, Volume: 159, Pages: 31 - 37

2. Heterogeneity of the local structure in S_b- and supercritical ammonia: a Voronoi polyhedra analysis
A. Idrissi, I. Valo, M. Kisele, M.V. Fedoro, P. Jedloski, J. Phys. Chem. B, Année: 2011, Volume: 115, Pages: 9646 - 9652
3. Assessment of the potential models of acetone/CO₂ and ethanol/CO₂ mixture by computer simulation and thermodynamic integration in liquid and supercritical states, A. Idrissi, I. Valo, M. Kisele, P. Jedloski, J. Phys. Chem. Chem. Phys., Année: 2011, Volume: 13, Pages: 16272 - 16281
4. Local structure in S_b- and supercritical CO₂: a Voronoi polyhedra analysis study, A. Idrissi, I. Valo, P. Dama, M. Kisele, Y.P. Pihoski, P. Jedloski, J. Mol. Liq., Année: 2010, Volume: 153, Pages: 20 - 24
5. The effect of water on the structure of water: a molecular dynamics simulation, A. Idrissi, M. Gerard, P. Dama, M. Kisele, Y.P. Pihoski, E. Cinar, P. Lagant, G. Vergoten, J. Phys. Chem. B, Année: 2010, Volume: 114, Pages: 4731 - 4738

Communications orales

1. Cellobiose solvation free energy in ScCO₂ with cosolvent, I. Valo, A. Idrissi, M. Kisele, Trilateral Seminar (Russia, Germany, France): Solvation in Complex Liquids by Theory and Experiment, 23-25 June, 2010, Germany
2. Assessment of the potential models of acetone/CO₂ and ethanol/CO₂ mixture by computer simulation and thermodynamic integration in liquid and supercritical states. A. Idrissi, I. Valo, M. Kisele, P. Jedloski, Sminaire l'Institut de la chimie des solutions, l'ano, Russia, Juillet 2011
3. Clustering and structure of S_b- and supercritical fluids. Valo I., Idrissi A., Kisele M.G., 18 Mars 2010, "Journées Nord-Ouest Européennes des Jeunes Chercheurs", Villeneuve d'Ascq, France
4. Cellobiose solvation free energy in SC CO₂ with co-solvents. Valo I.I., Idrissi A., Kisele M. G., 2010, Leipzig, Germany, "Solvation in Complex Liquids: Bridging Length Scales by Theory and Experiment"
5. Modelling of cellobiose solvation in supercritical fluids, Valo I.I., Idrissi A., Kisele M. G., 2011, Irkutsk, Russia, "Supercritical Fluids (SCFs): Fundamentals, Technologies, Innovations"
6. Modeling solvation of cellobiose in supercritical CO₂ and its mixture with acetone and ethanol Valo I.I., Idrissi A., Kisele M.G., 2011, Warsaw, Poland, "New outlook on molecular liquids from short scale to long scale dynamics"

Thèse

1. Thèse de Valo I. (soutenance prévue pour le 09/12/2011)

24. Projet : 2008007

Intitulé : Étude de la catalyse de réactions de Diels-Alder par les sels d'étain (IV).

Famille Thématique : 2a. Mécanisme des fluides

Porteur : Arnaud MARTEL

Laboratoire : UCO2M (Le Mans)

Heures CPU produites en 2010 : 13 068

Publication

1. Org. Lett., 2011, 13 (15), pp 4004 - 4007
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ol2015225>

Collaboration

Laboratoire URCOM de l'Université d'Haïre, Equipe d'accueil CNRS 3221

25. Projet : 2008006

Intitulé : Étude de l'impact de la convection profonde tropicale sur la composition chimique de la haute troposphère et de la basse stratosphère.

Famille Th matiq e : Chimie

Porte r : Emmanuel RIVIERE

Laboratoire : UMR 6089 (REIMS)

He res.CPU prod ites en 2011 : 2 927

26. Projet : 2008008

Intitulé : Simulation en hydrodynamique avec une méthode SPH.

Famille Th matiq e : Mécanique des fluides

Porte r : David LETOUZE

Laboratoire : LMF (NANTES)

He res.CPU prod ites en 2011 : 14 501

27. Projets : 2008012 (comptabilisé 2003006)

Intitulé : Modélisation Numérique de l'élastoplasticité de milieux solides hétérogènes.

Famille Th matiq e : Mécanique des solides

Porte r : Fabrice BARBE

Laboratoire : LMR - UMR 6138 (Saint Etienne d Ro ra)

He res.CPU prod ites en 2010 : 1689

Article de revue internationale

1. A. Tahimi, F. Barbe, L. Taleb, R. Q e , A. G illet, E al ation of microstr ct re-based transformation plasticit models from e periments on 100C6 steel, Comp tational Material Science, So s presse, doi:10.1016/j.commatsci.2011.01.052

Thèse soutenue

1. Abdeladhim Tahimi, Plasticit ind ite par transformations de phases dans les aciers. E p rience s mod lisations, Th se de doctorat de l'INSA de Ro en, J illet 2011

28. Projet : 2008013

Intitulé : Simulations d'écoulements fluides réactifs - Interactions flamme/paroi, combustion petite échelle, combustion stratifiée

Famille Th matiq e : 2b. Eco lements r actifs o /et m ltiphasiq es

Porte r : Yves D'ANGELO

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne d Ro ra)

He res.CPU prod ites en 2011 : 641 440

Publications

1. CNF2011 E. Albin, Y. D Angelo & L. Ver isch, Flo streamline based Na ier Stokes Cha- racteristic Bo ndar Conditions : modeling for trans erse and corner o tflo s, Comp ters & Fl ids, 2011, doi : 10.1016/j.compfl id.2011.08.005.

2. IJNLM2011 G. Bo r & Y. D Angelo, On third order densit contrast e pansion of the 11 e ol tion eq ation for wrinkled nstead premi ed flames, International Jo rnal of Non-Linear Mechanics, doi :10.1016/j.ijnonlinmec.2011.05.018
3. IFNMF2011 E. Albin, Y. D Angelo & L. Ver isch, Using staggered grids ith aco stic bo n- dar conditions hen sol ing compressible reacti e Na ier-Stokes eq ations. International Jo rnal for N merical Methods in FI ids, 2011, doi :10.1002/flid.2520.
4. IJHMT2011 J. Dombard, B. Le e gle, L. Selle, J. R e eillon, T. Poinso t & Y. D Angelo, Modeling heat transfer in dil ted t o-phase flo s sing the Mesoscopic E lerian Formalism, en co rs d acceptance International Jo rnal of Heat and Mass Transfer, 2011.
5. CAF2011 E. Albin & Y. D Angelo, Assessment of an E ol tion Eq ation Modelling approach for 3D e panding wrinkled premi ed flames, so mis Comb stion & Flame, 2011.
6. ECM2011s M. Sjostrand, Y. D Angelo, S. Li & B. Reno , Direct N merical Sim lation of a c bic air-methane microcomb stor, E ropean Comb stion Meeting, Cardiff, j l 2011.
7. ECM2011i B. Le e gle, J. R e eillon & Y. D Angelo, DNS st d of Flame/ all interaction and heat transfer, E ropean Comb stion Meeting, Cardiff, j l 2011.
8. ECM2011a E. Albin & Y. D Angelo, Effects of Na ier Stokes Characteristic O tflo Bo n- dar Conditions : modeling for trans erse flo s, E ropean Comb stion Meeting, Cardiff, j l 2011.

Conférences et posters

1. Corf 2011i B. Le e gle, Y. D Angelo & J. R e eillon, DNS of Flame/Wall Interaction and Heat Transfer at the Wall, Int. Conf. on N merical Comb stion, april 2011, Corf , Greece.
2. Corf 2011a E. Albin & Y. D Angelo, St d of e panding t rb lent flames : comparisons bet een DNS, EEM and e perimental res lts, Int. Conf. on N merical Comb stion, april 2011, Corf , Greece.
3. Corf 2011s M. Sjostrand & Y. D Angelo, Direct N merical Sim lation of a c bic meso-scale Methane-Air comb stor, Int. Conf. on N merical Comb stion, april 2011, Corf , Greece.

29. Projet : 2009002

Intitulé : Régionalisation des changements climatiques

Famille Th mati q e : 1. En ironnement

Porte r : Thierr CASTEL

Laboratoire : CRC - UMR 5210 (DIJON)

He res.CPU prod ites en 2011 : 62 258

Publications

1. X Y., T. Castel, Y. Richard, C. C ccia and B. Bois 2011, B rg nd Regional Climate Change and its potential impact on Grape ines, Climate D namics. In re ision.
2. Richard Y., B. Bois, T. Castel, J.-P. Chabin, J. Cr tat, C. C ccia, D. Th enin, G ostatistiq e, radio sondages et mod les n m riq es aire limite : donn es et m thodes crois es po r l' t de d' n nement froid en France, AIC, p 513-518.
3. C ccia C. Richard Y., T. Castel, B. Bois, D. Th enin, ol tion des str ct res spatiales r c rrentes des temp rat res q otidiennes en Bo rgogne AIC, p153-158
4. D c G., Blancard S., H na It C., Lecomte C., Petit M.-S., Bernicot M.-H., Bi o ard F., Blanc N., Blondon A., Blosselle N., Bonnin E., Bois B., Castel T., Challan-Bel al C., Co lon C., Delattre M., De tie V., Dobreco rt J.-F., D mas M., Geloen M., H mea F., H ot E., Je ffro M.-H., Killma er M., Larm re A., Lela D., Leseigne r A., Mabire J.-B., Mangin P., Marget P., Million G., Ra nard L., Robin P., Ronget D., Richard Y., Vaccari V., Verm e A., Villard A., Viller J., Vi ier C., 2010, Potentiels et le iers po rd elopper la prod ction et l' tilisation des prot agine dans le cadre d' ne agric lt re d rable en Bo rgogne, Inno ations Agronomiq es, 11, 157-173.

Communications

1. CUCCIA C., B. BOIS, A. PARKER, C. VAN LEEUWEN, T. CASTEL, I. GARCIA DE CORTAZAR-ATAURI, Y. RICHARD, Variability of estimated dates of the occurrence of development stages of Pinot noir in Burgundy : Dependence of phenological model choice for current and future climate, 17th International Symposium, GiESCO, 29th of August - 2nd September 2011, Asti-Alba (CN), Italy
2. BOIS B., J.-P. CHABIN, P. PETITOT, M. ADRIAN, M. MADELIN, H. QUENOL, D. THEVENIN, J. VILLERY, T. CASTEL, Y. RICHARD, FROST RISK SPATIAL ANALYSIS AND ZONING FOR VITICULTURE AT LOCAL SCALE LEVEL USING DIGITAL GEOGRAPHICAL INFORMATION DATA, FIELD INFORMATION AND WINEGROWERS SURVEY, 17th International Symposium, GiESCO, 29th of August - 2nd September 2011, Asti-Alba (CN), Italy .

Collaborations

Nansen Environment and Remote Sensing Center, Bergen, Norway
INRA Nancy, UMR LERFOB
INRA Dijon : UMR 102 LEG
Centre Départemental Météo-France
Bureau Interprofessionnel des Vins de Bourgogne (BIVB)
Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie (Ademe)

Thèses et masters

1. Thèse de Cécilia Courty Changements climatiques et potentialités viticoles de pinot noir et de Chardonnay en Bourgogne. Université de Bourgogne, Ecole Doctorale E2S.
2. Master recherche de Geoffrey Klein sur Variabilité interannuelle (1989-2009) simulée (ARW/WRF) et observée (Météo-France) des précipitations en Bourgogne, 51p.

30. Projet : 2009005**Intitulé : Modélisation des propriétés optiques des objets complexes**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Kan Fang REN

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne de Roanne)

Heures CPU produites en 2011 : 10 332

Publication

1. K.F. Ren, F. Onofri, C. Roand and T. Girasole. Vectorial complex model and application to 2D scattering of plane wave by a spheroidal particle. Optics Letters, 36(03), 370-372, 2011.

Colloques

1. K.F. Ren, C. Roand and T. Girasole. Tracés de rayons vectoriels complexes par géométrie différentielle pour la diffusion de la lumière par un objet de forme irrégulière. 11^{ème} colloque international francophone de climatologie (Contrôles et Mesures Optiques pour l'Industrie), Toulouse (France), 15-19 novembre 2010.
2. K.F. Ren, C. Roand and T. Girasole. Application of the vectorial complex model to the scattering of an ellipsoid particle 13^{ème} International Symposium on Electromagnetic and light scattering (ELS XIII), Taormina (Italy).

Thèse en cours

1. Y. Yan. Simulation de la diffusion de la lumière par des objets irréguliers et application à l'imagerie des sprays. Thèse en cours à l'Université de Roanne.

31. Projet : 2009006**Intitulé : K-Epsilon - Projet académique**

Famille Th matiq e : 2a. Eco lements non r actifs

Porte r : Yann ROUX

Entreprise : K-EPSILON (SOPHIA ANTIPOLIS)

He res.CPU prod ites en 2011 : 122 961

Thèse en cours

1. Mathie D rand, Interaction fl ide-str ct re so ple et l g re, application a oiliers, th se CIFRE a ec l ECN (Ecole Centrale de Nantes) et l IRENa (Institut de Recherche de l Ecole Na ale)

32. Projet : 2009007**Intitulé : Propriétés structurales et électroniques des Interfaces AlN/GaN**

Famille Th matiq e : 9. Ph siq e, chimie et propri t s des mat ria

Porte r : J n CHEN

Laboratoire : LRPMN (DAMIGNY)

He res.CPU prod ites en 2011 : 81 298

Publications

1. "Scre threading dislocations in AlN: str ct ral and electronic properties of In & O doped material", Kioseoglo , E. Kalesaki, I. Belabbas, J. Chen, G. No et, H. Kirmse, W. Ne mann, Ph. Komnino and Th. Karakostas, J. Appl. Ph s. 110, 053715 (2011)
2. "A ne atomistic model for the threading scre dislocation core in rt ite GaN". I. Belabbas, J. Chen and G. No et. Comp tational Materials Science, 51, 206 (2011).

Communications

1. "Different beha iors of Al distrib tions in AlInN and AlGaN allo s containing c-scre dislocations", H aping LEI, J n CHEN, and Pierre RUTERANA, Congr s EDS 2010 Brighton, UK.
2. J. Kioseoglo , E. Kalesaki , I. Belabbas , J. Chen, G. No et , Ph. Komnino and Th. Karakostas. Effect of scre threading dislocations on the optoelectronic properties of AlN. XXVII PanHellenic Conference on Solid State Ph sics and Materials Science. Limassol (C pr s), 18th-21st September 2011.
3. J. Kioseoglo , E. Kalesaki, I. Belabbas, J. Chen, G. No et, Th. Karakostas and Philomela Komnino , Scre Threading Dislocations as Cond cti e Nano ires in AlN: Role of Doping, MRS Fall Meeting Boston (USA), No 28th-Dec 2nd 2011.
4. J. Kioseoglo , E. Kalesaki , I. Belabbas , J. Chen, G. No et , H. Kirmse, W. Ne mann, Ph. Komnino and Th. Karakostas. Str ct ral and electronic properties of decorated scre dislocation cores in AlN, 8th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies NN11, Thessaloniki, Greece, 12-15 J l 2011.

33. Projet : 2009008

Intitulé : 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.

Famille Thématique : Physique des Matériaux

Porteur : Sylvain CADARS

Laboratoire : CEMTHI (ORLEANS)

Heures CPU produites en 2011 : 1 926

Publications parues

1. G.L. Athens, D. Kim, J.D. Epping, S. Cadars, Y. Ein-Eli and B.F. Chmelka, Molecular Optimization of Multifunctionalized Mesoporous Films with Ion Conduction Properties, *J. Am. Chem. Soc.* 2011, 133, 16023-16036.

Publications en cours de rédaction

1. D.H. Broer, S. Cadars, J. Eckert and B.F. Chmelka, Structure Solution of a Partially Ordered Layered Silicate Material by Solid-State NMR Spectroscopy, in preparation.
2. S. Cadars, J.R. Yates, Z. Noor and D. Massiot, Comparison of Cluster and Plane-Wave-Based First Principle Approaches for the Calculations of T₁-Bond Si-O-Si Scalar Couplings in Zeolites, in preparation.

Communications orales dans des conférences internationales

1. S. Cadars, M. Alli, D.H. Broer, R. Shaib, M.G. Nagendrchar, Z. Noor, M. Deschamps, M.F. Hsieh, A.W.B. Rton, S.I. Zones, D. Massiot, B.F. Chmelka, Structure Determinations of Molecular-Ordered Layered Silicates Lacking Long-Range 3D Crystallinity 7th Alpine Conference on Solid-State NMR Chamonix France 11-15/09/2011.
2. S. Cadars, M. Alli, R. Shaib, H. Dol, A.W.B. Rton, S.I. Zones, D. Massiot, B.F. Chmelka, Structure Determination of a Novel Layered Silicate Material Lacking Long-Range 3D Crystallinity MRS Spring Meeting 2011 San Francisco 25/04/2011 29/05/2011.

34. Projet : 2010006

Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique

Famille Thématique : Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Denis LEDUE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne de Roanne)

Heures CPU produites en 2011 : 4 354

Publication

1. A. Maitre, D. Ledue, R. Patte, "Interfacial roughness and temperature effects on exchange bias properties in coupled ferromagnetic/antiferromagnetic bilayers", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Accepted (in press).

Affiche

1. A. Maitre, D. Ledue, R. Patte, "Influence de la microstructure et de la température sur l'anisotropie d'échange : étude par simulations numériques", XIV^{me} Colloque Louis Néel "Couches minces et nanostructures magnétiques", Brest (20-23 septembre 2011), *Prédictions Meilleures Poster*

Collaboration

Spintec (Grenoble)

Thèse

1. Adeline Maitre, "Etude de par simulations numériques de renversement d'aimantation dans les matériaux à anisotropie d'axe", octobre 2009.

Stage

1. Jerem Fofre, "Bicoches à anisotropie d'axe: etude de par simulations numériques", (Université de Rouen, L3 MPM), mai-juin 2011

35. Projet : 2010010**Intitulé : Topologie quantique**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures CPU produites en 2011 : 52 521

Publication

1. Vincent Tognetti et Laurent Joubert, On the influence of density functional approximations on some local Bader's atoms-in-molecules properties, Journal of Physical Chemistry A, 115 (2011), 5505-5515.

Communications dans des congrès internationaux

1. WATOC - 2011, 17-22 Juillet 2011, Saint-Jacques de Compostelle (Espagne), Vincent Tognetti, Laurent Joubert, On the use of Bader's atoms-in-molecules theory for the study of agnostic bonds (oral).
2. WATOC - 2011, 17-22 Juillet 2011, Saint-Jacques de Compostelle (Espagne), François Zielinski, Vincent Tognetti et Laurent Joubert, Condensed descriptors for reactivity: a methodological study (oral).
3. 47th Symposium for Theoretical Chemistry, 21-25 Août 2011, Camp de Sise, Sise (Suisse), François Zielinski, Vincent Tognetti et Laurent Joubert, Condensed descriptors for reactivity: a methodological study (poster).
4. QITel 2011, 4-9 Décembre 2011, Riviera Maya (Mélique), François Zielinski, Vincent Tognetti et Laurent Joubert, Condensed descriptors for reactivity: a methodological study (poster).

Thèse

1. Thèse de doctorat de François Zielinski, (2009-2012).

36. Projet : 2010012**Intitulé : Etudes théoriques de processus atmosphériques en milieu multiphasique**

Famille Thématique : Dynamique Moléculaire

Porteur : Thibaud COURS

Laboratoire : UMR 6089 (REIMS)

Heures CPU produites en 2011 : 3 057

Publication en cours de rédaction

1. Theoretical study of the reaction $H_2CO + H_2O$: a possible catalytic effect of the presence of water?, P. Delcroix, B. Hanoine, D. Delflot, T. Cours.

Collaboration

1. Collaboration avec le laboratoire PC2A UMR CNRS 8522 - Université de Lille 1

Thèse

1. P. Delcroix : Thèse sur le Formaldéhyde (H_2CO) et la réaction $H_2CO + H_2O$.

37. Projet : 2011001**Intitulé : Etude théorique du mécanisme d'une réaction de carbométallation intramoléculaire**

Famille Thématique : 8. Chimie quantitative et modélisation moléculaire

Porteur : Catherine FRESSIGNE

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures CPU produites en 2011 : 6 789

Publication

1. DFT theoretical study about the influence of the acetlenic substituent on the intramolecular carbolithiation of alkenes, Fressigne, C.; Girard, A.-L.; D'Randetti, M.; Maddaleno, J. En préparation.

Communications

1. "Heterocyclization by intramolecular carbometallation of alkenes
The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM)
Honolulu (Hawaï, USA), 15 décembre 2010
2. Intramolecular carbometallation of triple bonds: access to heterocyclic scaffolds"
Séminaire à l'Université de York (Pr. P. O'Brien)
York (Royaume-Uni), 19 juillet 2011

Thèse en cours

1. R. Delhermet, Carbométallation intramoléculaire d'alcènes et alcènes hétérosubstitués, Université de Rouen, novembre 2011

38. Projet : 2011002**Intitulé : Simulation numérique en hydrodynamique navale par méthode SPH**

Famille Thématique : 2a. Éléments non rigides

Porteur : Pierre-Michel GUILCHER

Laboratoire : Hydrocean (NANTES)

Heures CPU produites en 2011 : 259 019

Thèse

1. Thèse de Matthieu de Lefèvre, à l'École LMF (Laboratoire de Mécanique des Fluides) de l'ECN (École Centrale de Nantes).

Collaborations

Laboratoire de Mathématiques Jean Lera de l'Université de Nantes (UMR6629 CNRS)

Laboratoire de Mécanique des Fluides de l'École Centrale de Nantes

Projet Citeph

Projet TULCS (Tools for Ultra Large Containers Ships)

Projet Ne tM SE (Next generation Multi-mechanics Simulation Environment)

39. Projet : 2011005**Intitulé : Etude sur modèles chimiques de réactions de Friedel-Crafts appliquée à la synthèse de polyaryléthercétones**

Famille Thématique : 8. Chimie organique et modification moléculaire

Porteur : Georges DUPAS

Laboratoire : ECOFH (MONT SAINT AIGNAN)

Heures CPU produites en 2011 : 63 143

Publications

1. Rod-like conjugated molecules with ethylene linkage and p-rida lines moieties: synthesis and light emitting properties, Hadad, C.; Fiol-Petit, C.; Cornec, A.-S.; Dupas, G.; Ramondenc, Y.; Plé, N, *Heterocycles*, 2010, 81 (6), 1445-1457.
2. Mechanism Selection for Regiocontrol in Direct Substitution Coupling of Electronrich Heterocycles: First Study on Oxazole and Thiazole-4-Carboxylate Series. Laure Théa, Cécile Verrier, Pierrick Lassalas, Thibaut Martin, Georges Dupas, Olivier Querolle, Luc Van Hijfte, Francis Marsais, Christophe Hoara
3. Mechanism Selection for Regiocontrol in Direct Substitution Coupling of Electronrich Heterocycles: First Study on Oxazole and Thiazole-4-Carboxylate Series. Laure Théa, Cécile Verrier, Pierrick Lassalas, Thibaut Martin, Georges Dupas, Olivier Querolle, Luc Van Hijfte, Francis Marsais, Christophe Hoara
4. The First Example of the Diels-Alder Reaction for Fluorinated Ketene dithioacetals, *Synthesis* Tetrahedron

Collaborations

Equipe dirigée par Jean-Philippe Boilllon (SMS EA 3233)

Dr Christophe Hoara, UMR 6014 COBRA

Thèses en cours

1. Thèse de Sigismund Melissen, thèse de l'Université de Roen, contrat CIFRE avec ARKEMA
2. Thèse de Anne-Sophie Cornec, thèse de l'Université de Roen.

40. Projet : 2011007**Intitulé : Modélisation de systèmes nanostructurés : nanoparticules magnétiques, conducteurs ioniques**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Florent CALVAYRAC

Laboratoire : LPEC (LE MANS)

Heures CPU produites en 2011 : 321

Publications

1. "Modelling noncollinear spin structure in YNiO₃ perovskite: a GGA+U APW approach" Malgorzata Saja and Florent Calvayrac 2011 *J. Phys.: Conf. Ser.* 289 012002 doi:10.1088/1742-6596/289/1/012002
2. "An Ab-Initio Molecular Dynamics study of ionic conductivity in hexagonal Lithium Lanthanum Titanate Oxide La_{0.5}Li_{0.5}TiO₃" Manuscript ID IONICS-2010-0140.R2 B.Sitam et S.Zekeng S.Domnang F.Calvayrac and A.B. Ilo
3. "Complément structural et propriétés magnétiques de l'oxyde de fer nanostructuré: partie II, à Monte-Carlo Heisenberg" B.Fongang Y.Laba et S.Zekeng J.-M.Grenche and F.Calvayrac MAGMA-D-10-00117R2 to appear in *J. Magnetism and Magnetic Materials* 2011

Publication en préparation

1. Lattice dynamics of β -SnWO₄ : infrared, polarized Raman and ab-initio calculations
J. St. na WOJCIK , No. reddine MHADHBI , François GOUTENOIRE, Florent CALVAYRAC, Génaël CORBEL,
Philippe LACORRE , Alain BULOUE

Conférence et poster

1. "Ab initio modelling of ligands and nanoparticles used in magnetic hyperthermia" K. Br. mora S. Ammar
J. Fo. inea 2, N. Yaacob 1, J.-M. Grenche 1, F. Calarac Communication Nanomedicine Summer
School, L. therstadt Wittenberg, juin 2011

41. Projet : 2011008**Intitulé : Etude ab-initio du processus de bio-minéralisation du carbonate de calcium**

Famille Thématique : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux
Porteur : Bessem BEN DOUDOU
Laboratoire : LRPMN (DAMIGNY)
Heures CPU produites en 2011 : 241 235

Les travaux effectués n'ont pas conduit à publication.

42. Projet : 2011009**Intitulé : Structures de basse énergie d'ions moléculaires d'intérêt biologique isolés**

Famille Thématique : Chimie
Porteur : Jean-Christophe POULLY
Laboratoire : GANIL (CAEN)
Heures CPU produites en 2011 : 3 083

Les travaux effectués n'ont pas conduit à publication.

43. Projet : 2011010**Intitulé : Calcul des propriétés mécaniques par homogénéisation stochastique des matrices renforcées par des NTC (Nano Tube de Carbone) dans le cadre de l'élasticité tridimensionnelle dans le cadre d'une approche par décomposition de domaine**

Famille Thématique : Mathématiques appliquées
Porteur : Philippe KARAMIAN
Laboratoire : LMNO (CAEN)
Heures CPU produites en 2011 : 34 430

Thèse en cours

1. Thèse de Will Leclerc (2010-)

Stages

1. Stage de master 2 de Delphine Gérard

44. Projet : 2011011**Intitulé : Modélisation Moléculaire de Polyamides Biosourcés**

Famille Th matiq e : Mat ria

Porte r : Jocel ne Gal

Laboratoire : IMP - INSA L on (VILLEURBANNE)

He res.CPU prod ites en 2011 : 8 652

Thèse en cours

1. Th se de Thiba lt Co sin - Projet ANR D gl cose a pol amides : no ea proc d s d acc s et de transformation de l h dro meth lf rf ral.

45. Projet : 2011012**Intitulé : Interaction Onde Matière dans des nanostructures composites de type isolant/semiconducteur/ terre rare ou isolant/métal. Applications aux guides d'ondes amplificateurs et au domaine de la plasmonique.**

Famille Th matiq e : 5. Ph siq e th oriq e et ph siq e des plasmas

Porte r : Christian DUFOUR

Laboratoire : CIMAP - UMR 6252 (CAEN)

He res.CPU prod ites en 2011 : 1 458

Publications

1. Electromagnetic modeling of a eg ide amplifier based on Nd³⁺ Si-rich SiO₂ la ers b means of the ADE-FDTD method, D fo r, Christian; Cardin, J lien; Debie , Oli ier; et al., NANOSCALE RESEARCH LETTERS Vol me: 6, Article N mber: 278, DOI: 10.1186/1556-276X-6-278, P blished: APR 4 2011.

Communications lors de congrès internationaux

1. EMRS E ropean Materials Research Societ (EMRS Warsa).

46. Projet : 2011101**Intitulé : Exploration de l'espace conformationnel des interfaces protéines-protéines**

Famille Th matiq e : 7. D namiq e mol c laire appliq e la biologie

Porte r : Xa ier MORELLI

Laboratoire : IMR (MARSEILLE)

He res.CPU prod ites en 2011 : 15 843

Publication

1. Morelli, X., Bo rgeas, R., and Roche, P., Chemical and Str ct ral Lessons from recent s ccesses in Protein-Protein Interaction Inhibition (2P2I). C rrent Opinion Chemical Biolog 15, 1-7, 2011.

47. Projet : 2011102**Intitulé : Tests de performance d'un code CPU-GPU**

Famille Thématique : Energétique

Porteur : Olivier GICQUEL

Laboratoire : EM2C (CHATENAY-MALABRY)

Heures CPU produites en 2011 : 1 343

Le rapport détaillé des performances mesurées l'occasion de ce test a été communiqué à l'équipe technique de CRIHAN.

C. Contributions des structures du Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire

1. RNMM : SMS EA 3233

Intitulé : Sciences et Méthodes Séparatives

Responsable : Pr. COQUEREL Gérard

Laboratoire : Sciences et Méthodes Séparatives (SMS) UPRES EA 3233

IRCOF-Université de Rouen, 76821 Mont Saint-Aignan Cedex

Thématiques principales

Utilisation des logiciels Cerius et Materials Studio (Accelerator), et SYBYL (Tripos) pour :

La description et l'analyse des structures cristallines

Les mécanismes de croissance cristalline et de prédiction de morphologie

L'analyse de polymorphisme et de transitions solide-solide

L'impact de des mécanismes de dissolution de cristaux organiques

L'analyse de la reconnaissance supramoléculaire et chirale.

Publications

1. Impact of gas composition in the mother liquor on the formation of macroscopic inclusions and crystal growth rates. Case studied with Ciclopiro crystals, A. Waldschmidt, N. Corrat, B. Berton, V. Dupré, S. Morin, S. Petit, G. Coquerel, Cryst. Growth Des., 2011, 11 (6), 2463-2470
2. Abo taged heterogeneous liquid inclusions inside organic crystals in relation to crystal formation, structure and morphology, A. Waldschmidt, I. Rietveld, N. Corrat, V. Dupré, M. Sanselme, B. Berton, B. Nicolai, N. Mahé, S. Petit, R. Coloin, G. Coquerel, Cryst. Growth Des., 2011, 11 (6), 2580-2587
3. Crystal structure, dehydration mechanism and chiral discrimination in the solid state of a hantoin derivative, Y. Amharar, S. Petit, M. Sanselme, Y. Cartignat, M.-N. Petit, G. Coquerel, Cryst. Growth Des., 2011, 11 (6), 2453-2462
4. Formation of crystalline hollow fibers as relics of organic dissipative structures, D. Martins, T. Stelzer, J. Ulrich, G. Coquerel, Cryst. Growth Des., 2011, 11 (7), 3020-3026
5. Design and scalable synthesis of new chiral selectors. Part 1: Synthesis and characterization of a new constrained cyclopeptide from natural basic amino acids, L. Ferron, F. Gillen, S. Coste, G. Coquerel, P. Cardinael, J. Schart, J.-M. Paris, J.-C. Plaquevent, Tetrahedron, 2011, 67 (33), 6036-6044
6. Efficient preparation of enantiomerically pure α -aryl- β -trifluoromethyl amines via a seeded programmed preferential crystallization of 5-aryl-5-trifluoromethyl hantoin. T. Martin, C. Massif, N. Wermester, J. Linol, S. Tisse, P. Cardinael, G. Coquerel, J.-P. Boilllon, Tetrahedron: Asymmetry, 2011, 22 (1), 12-21
7. Resolution of (S)-Imeglamin-2,4-dichlorophenylacetate in methanol solution by preferential crystallization. S. Wacharine-Antar, G. Leilain, V. Dupré, G. Coquerel, Org. Proc. Res. Dev., 2010, 14, 1358-1363
8. Pitfalls and rewards of preferential crystallization, G. Leilain, G. Coquerel, CrystEngComm., 2010, 12, 1983-1992
9. Synthesis, structure and affinity of novel 3-alkoxy-1,2-dihydro-3H-1,4-benzodiazepin-2-ones for CNS central and peripheral benzodiazepine receptors, S. Andronati, E. Semenishina, V. Paloski, Y. Simoni, S. Makan, I. Bokor, N. Breckenridge, M. Gdaniec, P. Cardinael, J.-P. Boilllon, A. Mape, Eur. J. Med. Chem., 2010, 45(4) 1346-1351

Communications au cours de congrès internationaux

1. Study of solid-liquid and solid-liquid equilibrium in tenatopra ole salt/solvents systems, G. Tassel, Y. Cartign, M. Sanselme, G. Coquerel, XXXVIIèmes JEEP, Saint Aold, Mars-Aril 2011, Abstract book, p. 47-48.
2. Development of a one melting prototype applied to organic compounds, N. Corrat, S. Tisse, Y. Cartign, G. Coquerel, XXXVIIèmes JEEP, Saint Aold, Mars-Aril 2011, Abstract book, p. 49-50.
3. On the systematic presence of gas in liquid inclusions, A. Waldschmidt, B. Berton, V. Dupra, S. Petit, G. Coquerel, BIWIC-18, Delft (NL), September 2011, ISBN 978-94-6191-00365, pp. 314-320.
4. Oddities of the chiral discrimination between enantiomers in the solid state, S. Gonella, C. Rogeot, J. Mahieu, F. Gillen, J.-C. Plaque ent, G. Coquerel, ISIC-18, Zurich (SW), September 2011, p. 26.

Affiches présentées lors de congrès internationaux

1. Influence of the stoichiometry of salts on the chiral discrimination in the solid state of nitrates of N,N-bis(3-pyridinylmethyl)-1,2-diaminocyclohexane, S. Gonella, G. Leilain, G. Coquerel, XXXVIIèmes JEEP, Saint Aold, Mars-Aril 2011, Abstract book, p. 139-140 (pre-print poster).
2. Subambient heterogeneous equilibrium of 5-(4-ethylphenyl)-5-methylchondroin in Methanol-water mixtures. A case of solvent dependent chiral discrimination in the solid state, Y. Amharar, S. Petit, M. Sanselme, Y. Cartign, M.-N. Petit, G. Coquerel, BIWIC-18, Delft (NL), September 2011, ISBN 978-94-6191-00365, pp. 113-117.
3. Gas bubbles as crystal growth inhibitors during the formation of liquid inclusions
A. Waldschmidt, B. Berton, V. Dupra, S. Petit, G. Coquerel, BIWIC-18, Delft (NL), September 2011, ISBN 978-94-6191-00365, pp. 14-19
4. Influence of water molecules on the dehydration mechanism of a racemic hydrate of chondroin
Y. Amharar, S. Petit, M. Sanselme, Y. Cartign, M.-N. Petit, G. Coquerel, BIWIC-18, Delft (NL), September 2011, ISBN 978-94-6191-00365, pp. 221-226
5. Particle amorphization during spreading in humid air, D. Martins, G. Coquerel, ISIC-18, Zurich (SW), September 2011, p. 313.

Thèses

1. QUERNIARD Florian, Thermodynamic study of organic heterogeneous systems: Improvement of Discontinuous Isothermal Thermal Analysis and Use of Phase Diagrams to design enantiomeric resolutions by crystallization, Directeur G. Coquerel, soutenance Octobre 2010, thèse E-ropeenne.
2. LAMBERT Olivier, Study of the precipitation phenomenon of X-Ray contrast media for medical imaging, Directeur G. Coquerel, soutenance Mai 2011, thèse E-ropeenne.
3. COUVRAT Nicolas, Four case studies on the impact of the heterogeneous equilibrium on physicochemical behavior of organic solids, Directeur G. Coquerel, soutenance Mai 2011, thèse E-ropeenne.
4. MARTINS Damien, Etude de la procédure de cristallisation par atomisation et développement d'un prototype original de spray-drying en vue d'accéder aux nanomatériaux, Directeur G. Coquerel, Septembre 2011.
5. AMHARAR Yoann, Etude des origines moléculaires de la discrimination chirale l'état solide, Directeur S. Petit, soutenance fin 2011.
6. WALDSCHMIDT Adrien, Etude des mécanismes de formation de défauts micro- et macroscopiques liés à la cristallisation organique en pharmacie, Directeur S. Petit, soutenance fin 2011.

2. RNMM : CERMN**Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie**

Responsable : Pr. R. BUREAU - Pr. J. SOPKOVA

Laboratoire : CERMN, Université de Caen Basse-Normandie, Bd Becquerel, 14032 Caen, France

Thématiques principales

Estimation des propriétés toxicologiques et toxicologiques des produits chimiques (programmes ANR).

Inhibiteurs des interactions protéine-protéine.

Et des structures actives de ligands rotomériques.

Analyses des données issues de diffraction RX.

Publication

1. Lozano, S.; Halm-Lemeille, M.P.; Lepaille, A.; Ralet, S.; Bureau, R. Consensus QSAR Related to Global or MOA Models. Application to Acetylcholinesterase Inhibitors. *Mol. Inf.* 2010, 29, 803-813.
2. Chosson E., Rochais C., Lega R., Sopko A-de Oliveira Santos J., Ralet S., Dallemagne P. First and mild synthesis of fluorene-9-malonic acid and some substituted derivatives via the intramolecular hydroarylation of 2-phenylbenzylidenemalonics acids, *Tetrahedron*, 2011, 67, 2548-2554.
3. Jullienne D., Delacroix O., Lohier J.-F., Sopko A-de Oliveira Santos J., Garmont A.-C. Mechanistic Insights into the Palladium-Catalyzed Asymmetric Phosphination of Cyclohexene with Triflate, *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2011, 16, 2489-2498.
4. Cheikh N., Bar N., Chokchok-Braham N., Mostefa-Kara B., Lohier J.-F., Sopko A-de Oliveira Santos J., Villemin D. Efficient synthesis of neobutenolides by sequential reactions: Application for the synthesis of original iminolactones, bis-iminolactones and bislactones. *Tetrahedron*, 2011, 47, 1540-1551
5. Marassio G., Prang T., David H.N., Sopko A-de Oliveira Santos J., Gabison L., Delcroix N., Abraini J., Colloc'h N. A pressure-response crystallographic study of binding mode of acetylcholinesterase with enon, nitrosonide and mixture of both. *FASEB*, 2011, 25, 1-10.
6. Rochais C., Yognia R., Caill T., Sopko A-de Oliveira Santos J., Ralet S. One-pot synthesis of neobutenolides and diaminophenanthrenes. *Tetrahedron*, 2011, 67, 5806-5810.
7. Sopko A-de Oliveira Santos, Jana; Joisin-chiret, Anne Sophie; Brücki, Gregor; Sebaon, Laure; Sebban, Muriel; Lohier, Jean-François; Lega, Rami; Ouladi, Hassan; Bureau, Ronan; Ralet, Sébastien. Structural characterisations of oligopeptide foldamers, α -helix mimetics. *J. Chem. Inf. Model.* 2011, accepted.
8. Lepaille, A.; Bureau, R.; Halm-Lemeille, M.P.; Boquet, M.; Pecquet, R.; Paris-Soubrol, C.; Le Goff, J.; André, V.; Vasseur, P.; Maire, M.A. Use of Alternative Methodologies to Predict the Genotoxicity and Carcinogenicity of Thiophene Derivatives. *Chem. Res. Toxicol.* 2011, submitted.
9. Dulin, F.; Halm-Lemeille, M.P.; Lozano, S.; Lepaille, A.; Bureau, R.; Ralet, R. QSARs Models for Honeybees Contact Toxicity Based on Mode of Action Classification: the Case of Acetylcholinesterase Inhibitors. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 2011, submitted.
10. Lecote, C.; Rochais, C.; Bettgele, S.; Coraisier, S.; Dulin, F.; Lepaille, A.; Sopko A-de Oliveira Santos, J.; Dallemagne, D. Synthesis of Dual AChE /5-HT4 Receptors Multi-Target Directed Ligands. *Med. Chem. Comm.* 2011, submitted.

Conférences invités / communications orales

1. Insights on the structure-toxicity relationships of thiophene derivatives. 5èmes Journées de la Société Française de Chimie Informatique, Cabourg, 13-14 Octobre 2011.
2. Use of alternative methodologies to predict the genotoxicity and carcinogenicity of thiophene derivatives. 6th International Symposium on Computational Methods in Toxicology and Pharmacology Integrating Internet Resources (CMTPI-2011), Maribor, 3-7 Septembre 2011.

Communications par affiches

1. D lin, F.; Halm-Lemeille, M.-P.; Lo ano, S.; Lepaille r, A.; Sopko a-de Oli eira Santos, J.; Ra lt, S.; B rea , R. Hone bees contact to icit associated to acet lcholinesterase inhibitors: QSAR and docking st dies. 5 mes Jo rn es de la Soci t Fran aise de Ch moinformatiq e, Cabo rg, 13-14 Octobre 2011.
2. Lepaille r, A.; Freret, T.; Lema tre, S.; Bo lo ard, M.; Da phin, F.; Lesnard, A.; Lancelot, J.C.; Ra lt, S.; B rea , R. P rrolo[1,2-a]thieno[3,2-e]p ra ines and Ben o[h][1,6]naphth ridine deri ati es as ligands of H3 / 5-HT4 receptors. IV mes Rencontres Normandes en Chimie-Biologie-Sant , Caen, 25 No embre 2010.
3. Lepaille r, A.; Freret, T.; Lema tre, S.; Bo lo ard, M.; Da phin, F.; Lesnard, A.; Lancelot, J.C.; B rea , R.; Ra lt, S. Ben o[h][1,6]naphth ridine deri ati es as ligands of H3 / 5-HT4 receptors. XIX me congr s d Gro pement des Pharmacochimistes de l Arc Atlantiq e, Ro en, 2-3 Septembre 2010.

Collaborations universitaires (inter)régionales.

1. Projet s r les peptides 26RFa : Unit INSERM U 413 (Dr. H. Va dr , Dr J. Leprince) et IRCOF, laboratoire de RMN (Pr I. Mila o), Uni ersit de Ro en, France. D p t d projet PIRCE en co rs (infrastr ct re- d e cellence).
2. Projet Emergence (Innoto 2, 2009-2012) : collaborations GREYC UMR 6072 et UMRM100 (UCBN).
3. Projet mergence (2011 2014) s r les IPP: Les interactions prot ine-prot ine (IPP) comme so rces de conception de no ea m dicaments anticanc re : application la recherche d inhibite rs des prot ines anti-apoptotiq es de la famille Bcl-2 po r le traitement des cancers de l o aire chimior sistants. Collaboration GRECAN.

Projet ANR.

1. Projet INNO-TOX. Projet se pla ant dans le cadre de la th mati q e REACh. Collaboration PCAS (M. Bo q et) / CNRS 7186 (P. Vasse r). Fin 05/2011.
2. Projet pharm@ecoto , d b t 01/2011. R sid s pharmace tiq es et coto icologie en milie marin. Collaboration a ec ISM-LPTC (Uni ersit de Bordea), GMPc (Uni ersit de Caen Basse-Normandie), UMR M100 (Uni ersit de Caen Basse-Normandie), LIEBE (Uni ersit de Met).

Nouvelle thèse

1. Mme Jade FOGHA (d b t septembre 2011)
Financement r gion (programme mergence s r les IPP).
S jet : Mise en idence d ne no elle classe de d ri s anti-apoptotiq es, inhibite rs d interactions prot ine-prot ine.

Thèse achevée

1. M. S l ain Lo ano (so tenance d cembre 2010).
Financement ANR.
S jet : (Q)SAR et classification hi rarchiq e po r n ensemble h t rog ne de donn es en coto icologie et to icologie.

Enseignements

1. Tra a pratiq es de mod lisation mol c laire dans le cadre de l'UFR des sciences pharmace tiq es : 90 t diants (a to r de 40 he res).

3. RNMM : Plateforme PISSARO

Intitulé : Plateforme Instrumentale en Sciences Séparatives et Analytiques de Rouen

Responsable : JOUENNE Thierr

Adresse : UMR 6270 CNRS, PBS, Plateforme PISSARO, IRIB, 76821 Mont-Saint-Aignan

Laboratoires impliqués

UMR6270 CNRS Université et INSA de Rouen, Laboratoire PBS : Polymères Biopolymères Surfaces
U982 INSERM, Laboratoire DC2N : Différenciation & Communication Neuronale & Neuroendocrine, Place
Emile Blondel, Faculté des Sciences et Techniques, 76821 Mont-Saint-Aignan Cede
U1073 INSERM, Nutrition, Inflammation et dysfonction de l'axe Intestin-Cerveau, 22 Bd Gambetta, 76183
ROUEN Cede
EA4358, Laboratoire Gluco-MEV : Glucobiologie et Matrice Extracellulaire Végétale, Faculté des Sciences,
bâtiment SCUEOR, IFRMP 23 Université de Rouen 76821 Mont-Saint-Aignan
UMR6014 CNRS, Université et INSA de Rouen, Chimie Organique Bioorganique Reactivité Analytique
(COBRA), IRCOF, rue Tesnières, 76131 Mont Saint Aignan Cede
U905 INSERM U.905 - Unité Inserm/Université de Rouen "Phytopathologie et biopathologies des maladies
inflammatoires et autoimmunes", 22 Bd Gambetta, 76183 ROUEN Cede

Publications

1. YALA, J.F., THEBAULT, P., HEQUET, A., HUMBLLOT, V., PRADIER C.M. and J.M. BERJEAUD; (2011) elaboration of antibiofilm materials by chemical grafting of an antimicrobial peptide. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 89: 623-634.
2. Benamara, H., Rihoë, C., Joenne, T. and S. Alexandre Impact of the biofilm mode of growth on the inner membrane phospholipid composition and lipid domains in *Pseudomonas aeruginosa*. *BBA Biomembranes*, 2011;1808: 98-105
3. Tnani, H., Lapeyre, I., Joenne, T and C.M. Vicent. Protein composition analysis of oil bodies from maize embryos during germination. *J. Plant Physiol.*, 2011 ; 168 : 510-513.
4. BORGHOL, N., MORA, L., NAWFEL, S., LEJEUNE, P., JOUENNE, T., JAFFREZIC-RENAULT, N., and A; OTHMANE. Electrochemical monitoring of Chlorhexidine Digluconate effect on polyelectrolyte immobilized bacteria and kinetic cell adhesion. *J. Biotechnol.* 2011, 151: 114-121.
5. Mart, S., Rodrigo-Baño, J., Catel-Ferreira, M., Joenne, T., Jordi Vila, J., Seifert H. and E. DE. Biofilm formation at the solid-liquid and air-liquid interfaces by *Acinetobacter* species. *BMC Res. Notes*, 2001, 4 : 4 doi: 10.1186/1756-0500-4-5.
6. TABBENE, O., KALAI, L., BEN SLIMENE, I., KARKOUCH, I., ELKAHOUI, S., GHARBI, A., COSETTE, P., MANGONI, M.L., JOUENNE T. and F. LIMAM. Triggering of the antibacterial activity of *Bacillus subtilis* B38 strain against methicillin-resistant *S. aureus*. *Appl. Biochem; Biotechnol.* sous presse.
7. Mechkarska, M., Ojo, O.O., Meetani, M.A., Coquet, L., Joenne, T., Abdel-Wahab, Y.H.A., Flatt, P.R., King, J.D. and J.M. Conlon. Peptidomic analysis of skin secretions from the bullfrog *Lithobates catesbeianus* (Ranidae) identifies multiple peptides with potent insulin-releasing activity. *Peptides*, 2011, 32: 203-208.
8. LALOYAU, X., FAUTRE, E., BLIN, T., PUROHIT, V., LEPRINCE, J., JOUENNE, T., JONAS, A.M. and K. GLINEL. Temperature-responsive polymer brushes switching from bactericidal to cell-repellent. *Adv. Mater.* sous presse.
9. Tabbene, O., Kalai, L., Ben Slimene, I., Karkouch, I., Elkahoui, S., Gharbi, A., Cosette, P., MANGONI, M.L., Joenne, T. and F. Limam. Anti-Candida effect of bacillomycin D-like lipopeptides from *Bacillus subtilis* B38. *FEMS Microbiol. Lett.*, sous presse.
10. D., E., Cosette, P., Coquet, L., Siro, A., Alexandre, S., Dancan, A., Nadin, B., Rihoë, C., Schamann, A., Jinter, G.A. and T. Joenne. Membrane proteomes of *Pseudomonas aeruginosa* and *Acinetobacter baumannii*. *Path. Biol*, 2011, 59: e137-E140.

11. Kellenberger, C., Leone, P., Coquet, L., Joenne, T., Reichhart J.-M., and A. Rossel. Structural-functional analysis of grass clip serine protease involved in *Drosophila* toll pathway activation. *J. Biol. Chem.*, sous presse.
12. Conlon, J.M., Mechkarska, M., Coquet, L., Joenne, T., Leprince, J., Vaudry, H., Kolodziejek, J., Notn, N. and J.D. KING. Evidence from the structures of skin antimicrobial peptides that populations of *Lithobates chiricahensis* (Ranidae) from northern and southern Arizona are nonspecific. *Peptides*, 2011, 32: 664-669.
13. MECHKARSKA, M., AHMED, E., COQUET, L., LEPRINCE, J., JOUENNE, T., VAUDRY, H., KING, J.D., TAKADA, K. and J.M. CONLON. Genome duplications within the Xenopodinae do not increase the multiplicity of antimicrobial peptides in *Silurana paratropicalis* and *Xenopus andrei* skin secretions. *Comp Biochem Physiol Part D Genomics Proteomics*, 2011, 6: 206-212
14. Mechkarska, M., Ahmed, E., Coquet, L., Leprince, J., Joenne, T., Vaudry, H., King, J.D. and J.M. Conlon. Peptidomic analysis of skin secretions demonstrates that *Xenopus melleri* and *Xenopus albentrallis* (*X. melleri* West) are not conspecific. *Peptides*, 2011, 32 : 1502-1508
15. CONLON, J.M., Mechkarska, M., Eman Ahmed, E., Laurent Coquet, L., Joenne, T., Leprince, J., Vaudry, H., Marc P. Haes, M.P. and G. Padgett-Flohr. Host defense peptides in skin secretions of the Oregon spotted frog *Rana pretiosa*: implications for species resistance to chtridiomycosis. *Devlop. Comp. Immunol.*, 2011, 35: 644-649.
16. Blin, T., Purohit, V., Leprince, J., Joenne, T. and K. Glinel. Bactericidal microparticles decorated by an antimicrobial peptide for the easy disinfection of sensitive aqueous solutions. *Biomacromolecules*, 2011, 12: 1259-1264.
17. Man, X. K., Andelman, D., Orland, H., Thebaud, P., Li, P.-H., Genon, P., Daillant, J. and S. Landis. Organization of block copolymers using nanoimprint lithography: comparison of theoretical and experimental results, *Macromolecules*, 2011, 44: 2206-2211.
18. Voer A, Gilbert L, Rihoë C, Driouch A, Rothan C, Baldet P, and P. Leroige; Silencing of the GDP-D-mannose 3,5-epimerase affects the structure and cross-linking of the pectic polysaccharide rhamnogalacturonan II and plant growth in tomato. *J Biol Chem.* 2011, 286: 8014-20.
19. Goichon A, Coffier M, Claessens S, Leclaire S, Caille AF, Bellefleur C, Chan P, Donnadieu N, Lerebours E, Laouine A, Boer O, Vaudry D and P. Dchelotte. Effects of an enteral glucose supplement on protein synthesis, proteolytic pathways, and proteome in human duodenal mucosa. *Am J Clin Nutr.* 2011, 94:784-94.
20. HARDOUIN, J., CREMER, A.G. and A.F. DELMAS. Investigation of in-source decay of oxime-linked peptide biomatrix-assisted laser desorption/ionization time-of-flight mass spectrometry. *Rapid Commun Mass Spectrom.* 2011 25(14):2106-2112. doi: 10.1002/rcm.5071.
21. Bignon M, Pichol-Thiérend C, Hardoin J, Malbores M, Brichot N, Nascitti L, Barret A, Teillon J, Gillon E, Etienne E, Caron M, Jovert-Caron R, Monnot C, Roggiero F, Moller L, and S. Germain. Lslo idase-like protein-2 regulates sprouting angiogenesis and type IV collagen assembly in the endothelial basement membrane. *Blood*, 2011, 118:3979-3989.
22. Catel-Ferreira, M., Coadou G., Molle V., Mignier P., Nordmann P., Siro A., Joenne T and E. D. Structural-functional relationships of CarO, the carbapenem resistance-associated outer membrane protein of *Acinetobacter baumannii*. *J. Antimicrob. Chemother.* 2011 : 66 : 2053-2056.
23. Marti, S., Nait-Chabane, Y., Alexandre, S., Coquet, L., Vila, J., Joenne, T. and E. DE. Growth of *Acinetobacter baumannii* in pellicle enhanced the expression of potential virulence factors. *Plos one*, 2011, 6: 1-11 (e26030).