



## 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**

<b>Introduction</b>	<b>5</b>
<b>Projets scientifiques expertisés</b>	<b>6</b>
Projet : 1998007 Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	6
Projet : 1998022 Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles	6
Projet : 1998053 Intitulé : Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	8
Projet : 2002003 Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	9
Projet : 2003008 Intitulé : Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	10
Projet : 2003013 Intitulé : Développements et applications des méthodes particulières	10
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.	12
Projet : 2005003 Intitulé : Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins".	12
Projet : 2005004 Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands	13
Projet : 2005010 Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.	14
Projet : 2005013 Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.	14
Projet : 2005014 Intitulé : Etudes cinétiques des transformations de phases dans des alliages modèles des aciers.	15
Projet : 2006003 Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.	16
Projet : 2006007 Intitulé : Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc	17
Projet : 2006011 Intitulé : Simulation d'écoulements liquide-gaz : DNS et LES	18
Projet : 2006013 Intitulé : Etude par DFT du mécanisme de la cooligomérisation 2:1 d'Alcynes et d'alcènes catalysée par les complexes du cobalt	18
Projet : 2007001	19

Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement	
Projet : 2007003	20
Intitulé : Modélisation de l'évolution de la microstructure dans un acier modèle au cours de traitements thermiques	
Projet : 2007013	21
Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés	
Projet : 2008001	21
Intitulé : Étude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe <sub>2</sub> /YFe <sub>2</sub> .	
Projet : 2008002	22
Intitulé : Étude des structures et des mécanismes de formation d'arylmagnésiates.	
Projet : 2008003	22
Intitulé : Mécanisme de copolymérisation de cétènes disubstitués avec des cétones.	
Projet : 2008005	22
Intitulé : Etude du processus d'agrégation dans les solutions aqueuses : Analyse par simulation de dynamique moléculaire classique et quantique	
Projet : 2008007	23
Intitulé : Étude de la catalyse de réactions de Diels-Alder par les sels d'étain (IV).	
Projet : 2008006	24
Intitulé : Étude de l'impact de la convection profonde tropicale sur la composition chimique de la haute troposphère et de la basse stratosphère.	
Projet : 2008008	24
Intitulé : Simulation en hydrodynamique avec une méthode SPH.	
Projets : 2008012 (comptabilisé 2003006)	24
Intitulé : Modélisation Numérique de l'élastoplasticité de milieux solides hétérogènes.	
Projet : 2008013	24
Intitulé : Simulations d'écoulements fluides réactifs - Interactions flamme/paroi, combustion petite échelle, combustion stratifiée	
Projet : 2009002	25
Intitulé : Régionalisation des changements climatiques	
Projet : 2009005	26
Intitulé : Modélisation des propriétés optiques des objets complexes	
Projet : 2009006	27
Intitulé : K-Epsilon - Projet académique	
Projet : 2009007	27
Intitulé : Propriétés structurales et électroniques des Interfaces AlN/GaN	
Projet : 2009008	28
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.	
Projet : 2010006	28
Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique	
Projet : 2010010	29

Intitulé : Topologie quantique	
Projet : 2010012	29
Intitulé : Etudes théoriques de processus atmosphériques en milieu multiphasique	
Projet : 2011001	30
Intitulé : Etude théorique du mécanisme d'une réaction de carbométallation intramoléculaire	
Projet : 2011002	30
Intitulé : Simulation numérique en hydrodynamique navale par méthode SPH	
Projet : 2011005	31
Intitulé : Etude sur modèles chimiques de réactions de Friedel-Crafts appliquée à la synthèse de polyaryléthercétones	
Projet : 2011007	31
Intitulé : Modélisation de systèmes nanostructurés : nanoparticules magnétiques, conducteurs ioniques	
Projet : 2011008	32
Intitulé : Etude ab-initio du processus de bio-minéralisation du carbonate de calcium	
Projet : 2011009	32
Intitulé : Structures de basse énergie d'ions moléculaires d'intérêt biologique isolés	
Projet : 2011010	32
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	
Projet : 2011011	33
Intitulé : Modélisation Moléculaire de Polyamides Biosourcés	
Projet : 2011012	33
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.	
Projet : 2011101	33
Intitulé : Exploration de l'espace conformationnel des interfaces protéines-protéines	
Projet : 2011102	34
Intitulé : Tests de performance d'un code CPU-GPU	
<b>Contributions des structures du Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire</b>	<b>35</b>
RNMM : SMS EA 3233	35
Intitulé : Sciences et Méthodes Séparatives	
RNMM : CERMN	37
Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie	
RNMM : Plateforme PISSARO	39
Intitulé : Plateforme Instrumentale en Sciences Séparatives et Analytiques de Rouen	

## A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIHAN sur la période octobre 2010 à septembre 2011.

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

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

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

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

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

## B. Projets scientifiques expertisés

### 1. Projet : 1998007

**Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Jean-Guy CAPUTO

Laboratoire : LMI (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites en 2011 : 52

**Publications**

1. J.-G. Caputo, A. Knippel and E. Simo, "Oscillations of simple networks", submitted to J. Phys. A, <http://arxiv.org/abs/1109.3071>
2. J. Scola, Y. Dumont, N. Keller, M. Vallée, J.-G. Caputo, I. Sheikin, P. Lejay, A. Pautrat, "Incomplete spin-reorientation in Yttrium orthoferrite", Phys. Rev. B, (2011 In press)
3. J.-G. Caputo and B. Sarels, "Reaction-diffusion front crossing a local defect", Phys. Rev. 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", Phys. Rev. E (2011 In press)
5. J.-G. Caputo et L. Loukitch, "Dynamics of point Josephson junctions in a microstrip line", Physica C 471, 344–356, (2011), <http://arxiv.org/abs/1004.0409>

**Conférences**

1. "Reaction-diffusion fronts crossing localized defects", présentation par B. Sarels à la Conférence "Nonlinear evolution equations and wave phenomena: computation and theory", University of Georgia, 4-7 Avril 2011.
2. Séminaire par J.G. Caputo, Université Technique du Danemark, Aout 2011.

**Principales collaborations internationales**

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

### 2. Projet : 1998022

**Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

Laboratoire : LMFN - CORIA (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2011 : 1 300 225

**Publication dans des Revues Internationales**

1. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Sadot, O., Glazer, E. Computational study of shock-wave interaction with multiple obstacles using immersed boundary methods. International Journal for Numerical Methods in Engineering. DOI: 10.1002/nme.3271 (2011).

2. Glazer, E., Sadot, O., Hadjadj, A., Chaudhuri, A. Velocity scaling of a reflected shock wave off a circular cylinder. *Physical Review E*, 83 066317 (2011).
3. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Chinnayya, A. On the use of immersed boundary methods for shock/obstacle interactions. *Journal of Computational Physics*, 230(5): 1731-1748, (2011).
4. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Chinnayya, A., Palerm, S. Numerical Study of Compressible Mixing Layers using High-Order WENO Schemes. *Journal of Scientific Computing*, 47(2): 170-197, (2011).
5. Ngomo, D., Chaudhuri, A. Chinnayya, 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).
6. Taieb, D., Ribert, G., Hadjadj, A. Numerical simulations of shock focusing over concave surfaces. *AIAA Journal*, 48(1): 1739-1747 (2010).
7. Hadjadj, A., Ben-Dor, G. Underexpanded and overexpanded supersonic jets. *International Journal of Aerospace Innovations* 2(4): 1-3 (2010).
8. 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

1. A. Chinnayya, 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.
2. A. Chinnayya, A. Hadjadj, E. Del Pretre, L. Domergue, J-F. Haas. Numerical simulation and experimental investigation of blast wave mitigation in dry aqueous foams. 22th International Colloquium on Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), University of California, Irvine, 24-29 July, 2011.
3. Y. Kivity, J. Falcovitz, A. Hadjadj, A. Chaudhuri, O. Sadot, E. Glazer, 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.
4. E. Del Pretre, L. Domergue, J-F. Haas, A. Chinnayya, A. Hadjadj. Blast wave attenuation by dry aqueous foams. 28th International Symposium on Shock Waves (ISSW28), Manchester, UK, 17-22 July, 2011.
5. A. Chinnayya, A. Hadjadj. Numerical study of detonation wave propagation in narrow channels. 28th International Symposium on Shock Waves (ISSW28), Manchester, UK, 17-22 July, 2011.
6. E. Del Pretre, J.F. Haas, A. Chauvin, G. Jourdan, L. Houas, A. Chinnayya, A. Hadjadj. Secondary atomization on two-phase shock wave structure. 28th International Symposium on Shock Waves (ISSW28), Manchester, UK, 17-22 July, 2011.
7. A. Chaudhuri, 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.
8. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Sadot, O., Ben-Dor, G. (2010) Study of shock waves interaction with array of cylinders. 21st International Symposium on Military Aspects of Blast and Shock (MABS21), Jerusalem, Israel, October 3-8, 2010.
9. Del Prete, E., Chinnayya, A., Hadjadj, A., Domergue, L., Haas, J.F. (2010) Numerical modeling of shock wave attenuation by aqueous foams. 19th International Shock Interaction Symposium (ISIS19), Moscow, Russia, August 31 – Sept. 3, 2010.
10. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Sadot, O., Ben-Dor, G. (2010) Study of shock waves interaction with array of cylinders. 19th International Shock Interaction Symposium (ISIS19), Moscow, Russia, August 31 – Sept. 3, 2010.
11. 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 Visualisation (ISFV14), Exco, Diego, Korea, June 21-24, 2010.

12. Ngomo, D., Chinnayya, A., Hadjadj, A. (2010) Numerical simulation of the influence of dissipative effects on the propagation of détonation waves in narrow shock tubes. V European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECCOMAS 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. Chaudhuri (2009-2011). Post-doc, INSA de Rouen.

#### Stages Master

1. A. Levillain (2011). Stage Master - CORIA, INSA de Rouen.
2. A. Sow (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. Roux, F. Bhatt, J. Foret, B. de Courcy, N. Gresh, J.-P. Piquemal, C. J. Jeffery, 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. Devereux, M-C. van Severen, O. Parisel, J.-P. Piquemal, and N. Gresh. *J. Chem. Theory 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 surrogates. N. Gresh, B. de Courcy, J.-P. Piquemal, J. Foret, S. Courtiol-Legourd, and L. Salmon, *J. Phys. Chem. B*, 115, 8604-8616 (2011)
4. Interactions within the alcohol dehydrogenase Zn(II)-metalloenzyme active site: interplay between subvalence, electron correlation/dispersion, and charge transfer/induction effects. B. de Courcy, J.-P. Dognon, C. Clavaguera, N. Gresh, and J.-P. Piquemal. *Int. J. Quantum Chem.* 111, 1213-1221 (2011)



5. Many-body Exchange-Repulsion in Polarizable Molecular Mechanics. I. Orbital based approximations and applications to hydrated metal cation complexes. R. Chaudret, N. Gresh, O. Parisel, and J-P. Piquemal J. Comput. Chem. 31, 2949-2957 (2011).

**Articles soumis**

1. Towards Improved Treatment of Metal Cations in Polarizable Molecular Mechanics using the Hybrid Gaussian Electrostatics / Distributed Multipoles GEM/SIBFA approach. R. Chaudret, N. Gresh, O. Parisel, T. A. Darden, G. Andres Cisneros, and J-P. Piquemal. J. Chem. Phys., soumis.
2. Towards accurate solvation dynamics of lanthanides and actinides in water using polarizable force fields: from gas phase energetics to hydration free energies. A. Marjolin, C. Gourlaouen, C. Clavaguéra, P. Ren, J. Wu, N. Gresh, J-P. Dognon, J-P. Piquemal. Theoret. Chem. Acc., soumis

**Conférences invitées**

1. Titre: 'Polarizable water molecules and ligand-protein recognition.'
  - a. Congrès international en République Tchèque. Intitulé du Congrès: 'Modelling interactions in Biomolecules', Hruba Skala, 4-9 Septembre 2011. Organisateur: Dr. Jaroslav Burda, Charles University, Prague.
  - b) Atelier international CECAM, Laboratoire de Chimie Théorique (LCT), UPMC, Paris. 12-15 Septembre. Organisateur: Kenneth J. Jordan, Université de Pittsburgh, USA, et Jean-Philip Piquemal, LCT, Paris.

**Thèse encadrée**

1. Mlle. Elodie Goldwaser, Thèse CIFRE depuis Novembre 2010. Modélisation d'inhibiteurs ciblant des protéines impliquées dans l'angiogénèse.

**Collaborations**

1. Prof. Jean-Philip Piquemal, Laboratoire de Chimie Théorique, UMR 7616 CNRS, U. Pierre-et-Marie-Curie.
2. Dr. Laurent Salmon, Laboratoire de Chimie Bioorganique et Bioinorganique, UMR 8182 CNRS, U. Paris-Sud.
3. Dr. Mike Devereux, Université de Bale, Suisse

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

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Claude ROZE

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2011 : 39 505

**Publications**

1. S. Idlahcen, C. Rozé, L. Méès, T. Girasole and J.B. Blaisot. « Sub-picosecond ballistic imaging of a liquid jet » Exp. Fluids. doi:10.1007/s00348-011-1220-1 (2011).

**Stages**

1. G. Vaudor, «Simulation numérique d'une mesure de vitesse sur un jet Diesel», Rapport de Master 2, juillet 2011.

**Thèses**

1. Y. Yuan, «Simulation de la diffusion de la lumière par un objet irrégulier et application à l'imagerie des sprays», thèse de l'Université de Rouen (soutenance début 2012).

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

Famille Thématique : 2b. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Alain BERLEMONT

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2011 : 48 983

**Publications**

1. J. Chesnel, J. Reveillon, T. Menard, F.X. Demoulin, «Subgrid analysis of liquid jet atomization», Atomisation and Spray Technology, 21 (1): 41-67, 2011

**Articles soumis**

1. J. Cousin, A. Berlemont, T. Ménard, S. Grout, «Primary breakup Simulation of a Liquid Jet Discharged by a Low-Pressure Compound Nozzle», soumis à Computers and Fluids 2011.
2. B. Duret, G. Luret, T. Menard, A. Berlemont, J. Reveillon, F.X. Demoulin, «DNS Analysis of turbulent mixing in two-phase flows» soumis à International Journal of Multiphase flow, 2011

**Conférences internationales**

1. G. Luret, T. Menard, A. Berlemont, J. Reveillon, F.X. Demoulin, «DNS Analysis of interactions between turbulence and evaporating liquid-gas interface», 24th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Istoril, Portugal, 2011.

**Thèses**

1. Emeline Noël, soutenance prévue en 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. Ecoulements non réactifs

Porteur : Grégory 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. Rivoalen. The Immersed Boundary Method applied to Smoothed Particle Hydrodynamics without remeshing. Submitted to Journal of Computational Physics.
2. G. Pinon, P. Mycek, G. Germain, and E. Rivoalen. Numerical simulation of the wake of marine current turbines with particle method. Submitted to Renewable Energy.
3. J-M. Cherfils, G. Pinon, and E. Rivoalen. JOSEPHINE : A parallel SPH code for free-surface flows. Submitted to Computer Physics Communications.
4. G. Perret, A. Poupardin, G. Pinon, N. Bourneton, E. Rivoalen, and J. Brossard. Vortex kinematic around a submerged plate under water waves. Part I : Experimental analysis. Submitted to to European Journal of Mechanics B/Fluids.

5. T. Bachetti, J.M. Etancelin, J.V. Facq, B. Gaurier, G. Germain, F. Maganga, P. Mycek, G. Pinon, and E. Rivoalen. Vers une caractérisation réaliste des conditions de fonctionnement des hydroliennes. In proof in : La Houille Blanche, International Water Journal, 2011.
6. F. Maganga, G. Germain, J. King, G. Pinon, and E. Rivoalen. Flow characteristic effects on marine current turbine behaviour and on its wake properties. IET Renew. Power Gener., Vol. 4(6) :doi :10.1049/iet-rpg.2009.0205 p. 498–509, 2010.

#### **Autres productions scientifiques**

1. G. Pinon. Les jets d'Inverseurs de poussée d'un avion en phase d'atterrissage. Broché – Éditions Universitaires Européennes - ISBN-10 : 6131508658 - ISBN-13 : 978- 6131508653, 2010.
2. G. Pinon, J-M Cherfils, E. Rivoalen, and S. Huberson. Code 3D Particulaire - dépôt de licence : APP (Agence pour la Protection des Programmes). Inter Deposit Digital Number - Numero Adhérent : 09.76.12643, IDDN.FR.001.480048.000.S.P.2010.000.31235, 3 dec. 2010.

#### **Conférences internationales avec comité de lecture**

1. P. Mycek, B. Gaurier, G. Germain, C. Lothodé, G. Pinon, and E. Rivoalen. Caractérisation numérique et expérimentale des interactions entre deux hydroliennes. 2ème Conférence Méditerranéenne Côtière et Maritime, Tanger, Marocco, 22-24 Nov 2011.
2. P. Mycek, B. Gaurier, G. Germain, G. Pinon, and E. Rivoalen. Numerical and experimental study of the interaction between two marine current turbines. Proceedings of the 9th European Wave and Tidal Energy Conference (EWTEC), Southampton, UK, September, 5-9 2011.
3. A. Poupardin, N. Bourneton, G. Perret, G. Pinon, E. Rivoalen, and J. Brossard. Hydrodynamics perturbations generated by waves and submerged structures such as marine energy converters. Proceedings of the 9th European Wave and Tidal Energy Conference (EWTEC), Southampton, UK, September, 5-9 2011.
4. A. Poupardin, N. Bourneton, G. Perret, G. Pinon, E. Rivoalen, and J. Brossard. Vortex dynamics around an immersed structure. EGU General Assembly 2011 (EGU), Vienna, Austria, April, 3-8 2011.
5. F. Maganga, G. Pinon, G. Germain, and E. Rivoalen. Wake properties characterisation of marine current turbine. 3rd International Conference on Ocean Energy (ICOE), Bilbao, Spain, 6-8 oct. 2010.
6. J-M. Cherfils, L. Blonce, G. Pinon, and E. Rivoalen. IB-SPH simulations of wave-body interactions. 5th international SPHERIC workshop, Manchester, UK, June, 23-29 2010.

#### **Conférences nationales avec comité de lecture**

1. J-M. Cherfils, L. Blonce, G. Pinon, and E. Rivoalen. Simulation en méthode particulaire de l'interaction houle-ouvrages marins. 12ème Journée de l'Hydrodynamique, Nantes, France, 17-19 nov. 2010.
2. G. Germain, F. Maganga, B. Gaurier, J.V. Facq, T. Bachetti, G. Pinon, E. Rivoalen, and J.M. Etancelin. Vers une caractérisation réaliste des conditions de fonctionnement des hydroliennes. 12ème Journée de l'Hydrodynamique, Nantes, France, 17-19 nov. 2010.
3. A. Poupardin, N. Bourneton, G. Perret, G. Pinon, E. Rivoalen, and J. Brossard. Sillages tourbillonnaires des structures immergées. XIèmes Journées Nationales Génie Côtier / Génie Civil, 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. Rivoalen. Simulation en méthode particulaire des sollicitations hydrodynamiques d'ouvrages marins. XIèmes Journées Nationales Génie Côtier / Génie Civil, Les Sables d'Olonne, France, (DOI :10.5150/jngcgc.2010.009- C - ISBN 978-2-35921-003-3) :p. 69–78, 22-24 Juin 2010.
5. F. Maganga, G. Germain, J.V. Facq, B. Gaurier, E. Rivoalen, and G. Pinon. Caractérisation expérimentale du sillage généré par une hydrolienne - influence du taux de turbulence ambiant. XIèmes Journées Nationales Génie Côtier / Génie Civil, Les Sables d'Olonne, France, (DOI :10.5150/jngcgc.2010.088-M - ISBN 978-2-35921-003-3) :p. 795–802, 22-24 Juin 2010.

**Thèses soutenues**

1. J-M. Cherfils : Développements et applications de la méthode SPH aux écoulement visqueux à surface libre. 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 quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Jacques MADDALUNO

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites en 2011 : 92 394

**Publications**

1. "Are sp Lithiated Carbons More Nucleophilic than sp<sup>2</sup> or sp<sup>3</sup> Ones? A Comparative DFT Study of the Condensation of Propynyllithium Aggregates on Formaldehyde". Fressigne, C; Maddaluno, J, J. Or.g Chem. 2010, 75,1427-1436
2. "First Substoichiometric Version of the Catalytic Enantioselective Addition of an Alkylolithium to an Aldehyde". Lecachey, B ; Fressigne, C ; Oulyadi, H ; Harrison-Marchand, A ; Maddaluno, J., Chem. Commun. 2011, 47, 9915-9917.

**Communication**

1. "Catalytic enantioselective 1,2-addition of methyllithium on tolualdehyde by real-time matchnig of the lithiated partners", 17th European Symposium on Organic Chemistry (ESOC 17), Heraklion (Crête), 14 juillet 2011

**Thèse en cours**

1. "Déprotonation vs condensation: a DFT theoretical study of the interaction between an enolisable carbonyl compound and lithiated bases/nucleophiles", Marchois J.

**Collaborations**

- Prof Hassan Oulyadi, Université Rouen (ANR)
- Prof. Annie-Claude Gaumont, ENSI Caen
- Prof. Hélène Gérard, Université Paris VI (ANR)
- Prof. Jean-Marc Campagne, ENSC 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 du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2011 : 3 257

**Publications**

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

**Affiches**

1. D. Ledue, D. Brinis, H. Kachkachi, R. Patte, "Influence des interactions dipolaires sur la susceptibilité dynamique d'assemblées d'agrégats ferromagnétiques", XIVème Colloque Louis Néel "Couches minces et nanostructures magnétiques", Brest (20-23 septembre 2011)

**Communications**

1. D. Ledue, H. Kachkachi, R. Patte, "Dynamic susceptibility of ordered-systems of ferromagnetic nanoclusters : Effect of dipolar interactions", 5th International Conference on Surfaces, Coatings and Nanostructured Materials (NANOSMAT-5), Reims, France (18-21/10/2010)
2. D. Brinis, D. Ledue, A. Laggoun, "Dynamique d'aimantation dans les assemblées d'agrégats ferromagnétiques : Effet des interactions dipolaires", Journée des doctorants du Groupe de Physique des Matériaux, 15 juin 2011

**Collaborations**

- Université de Boumerdes (Algérie)
- Université de Perpignan

**Thèses**

1. Drifa Brinis, "Dynamique d'aimantation dans les assemblées d'agrégats ferromagnétiques : Effets des interactions", Thèse de l'Université de Rouen, septembre 2010.

---

**9. Projet : 2005004**

---

**Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Jana SOPKOVA

Laboratoire : CERMN (CAEN)

Heures.CPU produites 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 Thématique : Chimie

Porteur : Eric HENON

Laboratoire : UMR 6519 (REIMS)

Heures.CPU produites en 2011 : 3 135

**Publication**

1. Aline Banchet-Cadeddu $\pm$ , Eric Hénon , Manuel Dauchez, Jean-Hugues Renault, Fanny Monneaux, and Arnaud Haudrechy, The Stimulating adventure of KRN7000 , Org. & Biomol. Chem., 9 (2011), 3080-3104: a review

**Communications**

1. C. Barberot, H. Khartabil, C. Szalata, J. Sapi , S. Gérard, E. Hénon, Primary amine addition to an unsaturated bromoderivative of levulinic acid: a computational study, Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Saint-Jacques de Compostelle, Espagne, 17-22 juillet 2011
2. H. Khartabil, M. Laronze-Cochard, J. Sapi, E. Hénon, New isothiazolone derivatives obtained by a Diels-Alder cycloaddition : a theoretical study, Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Saint-Jacques de Compostelle, Espagne, 17-22 juillet 2011
3. C. Coiffier, E. Hénon, P. Goekjian and A. Haudrechy, Analysis of preferred conformations of C-Furanosides by means of quantum mechanics approaches, Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Saint-Jacques de Compostelle, Espagne, 17-22 juillet 2011

**Thèses impliquées par des calculs réalisés en partie au CRIHAN**

1. Claire Coiffier 2009-2011... "Approche top-down pour la recherche de substrats biologiquement actifs : Analyse des conformations préférentielles de C-furanosides"
2. Chantal Barberot 2010-... "Conception orientée par modélisation moléculaire de molécules d'intérêt thérapeutique : exploitation du pharmacophore pyridazinone pour le traitement potentiel des maladies bronchopulmonaires"
3. Mariam Choumane 2011-... " Etude par modélisation moléculaire d'alpha-galactosylcéramides à visée thérapeutique, analogues du KRN 7000 "

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Isabelle CHATAIGNER

Laboratoire : LFAOC - IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites en 2011 : 38 219

**Publications**

1. Dentel, H.; Chataigner, I.; Le Cavalier, F.; Gulea, M. Tetrahedron Lett. 2010, 51, 6014-6017.  
" First catalytic enantioselective version of a thia hetero-Diels–Alder reaction with dithioesters."
2. Dentel, H.; Chataigner, I.; Lohier, J.-F. ; Gulea, M. in preparation  
« Asymmetric Diastereoselective thia-Hetero-Diels-Alder Reactions of dithioesters. »

3. Lee, S. ; Diab, S. ; Queval, 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 Fonctionalized 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. Hélène Gérard, Laboratoire de chimie théorique, UPMC, Paris VI.
- Avec le Dr. Mihaela Gulea, LCMT de Caen
- Avec les Pr. Laurent Joubert 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. Roussel, S. Novy, V. Kuksenko, 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. Roussel, S. Novy, V. Kuksenko, 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. Kuksenko, 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. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Pascale DOMINGO

Laboratoire : LMFN - CORIA (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2011 : 3 065 456

**Publications**

1. G. Ribert, K. Wang, L. Vervisch (2011) A multi-zone 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. Vervisch Mixing (2011) time-history effects in Large Eddy Simulation of non-premixed turbulent flames: Flow-Controlled Chemistry Tabulation, *Combust. Flame*, [doi:10.1016/j.combustflame.2011.06.005](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.06.005)
3. G. Lodier, L. Vervisch, V. Moureau, P. Domingo (2011) Composition-space premixed flamelet solution with differential diffusion for in situ flamelet-generated manifolds, *Combust. Flame* [Volume 158, Issue 10](#)
4. V. Moureau, P. Domingo, L. Vervisch (2011) From Large-Eddy Simulation to Direct Numerical Simulation of a lean premixed swirl flame: Filtered Laminar Flame-PDF modeling, *Combust. Flame* 158(7): 1340-1357 [\[4\]](#)
5. V. Moureau, P. Domingo, L. Vervisch (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. Vervisch (2010) Self-similar behavior and chemistry tabulation of burnt-gases diluted premixed flamelets including heat-loss *Combust. Theory 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 du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2011 : 39 694

**Publications**

1. J. Boisse, H. Zapolsky, A.G. Khachaturyan « 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. Zapolsky, W. Lefebvre, S. G. Fries, R. Patte and P. Pareige, "Precipitation kinetics study of Al – Zr – 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. Zapolsky and A.G. Khachaturyan, "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. Zapolsky « From atomistic to mesoscale description of phase transitions », The 36-th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics, Avril 2011, Lviv, Ukraine
2. H. Zapolsky « Atomic density function modeling of phase transitions » Laboratory of Physics of Nonlinear Media, March 2011, Tomsk, Russia.
3. M Ekholm, H Zapolsky, A Ruban, I Vernyhora, D. Ledue, 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 ; Zapolsky, 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. Zapolsky, A.G. Khachaturyan « « 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. Zapolsky, "Kinetics of precipitation of metastable Al<sub>3</sub>Zr L12 phase at 400°C » EUROMAT 2011, Montpellier.

**Affiches**

1. N. Masquelier, W. Lefebvre, R. Patte, H. Zapolsky, "Etude de la cinétique de précipitation de la phase métastable Al<sub>3</sub>Zr (L12)", Journée des doctorants de l'Ecole Doctorale SPMII, Rouen, 12 avril 2011
2. M. Certain, H. Zapolsky, "Modéliser les métaux : méthode du Champ de Phase Cristallin ", Journée des doctorants de l'Ecole Doctorale SPMII, Rouen, 12 avril 2011

**Collaborations**

- Nexans, Laboratoire de Mathématiques et Applications (Université de Poitiers)

**Thèses en cours**

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

**Stages**

1. Manon Bonvalet, "Etude de la cinétique de précipitation dans Al - Zr en champ de phase", (Université de Rouen, M1), mars-mai 2011
2. Antoine Vaugeoin, « 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. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : François-Xavier DEMOULIN

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2011 : 100

**Publication**

1. J. Chesnel, J. Réveillon, T. Ménard, F.X. Demoulin, "Subgrid analysis of liquid jet atomization", Atomisation and Spray Technology, 21(1): 41-67, 2011

**Cours dans une école d'été**

1. F.X. Demoulin, "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. Demoulin, J. Reveillon, J. Chesnel and B. Duret, Towards fully coupled modeling of liquid atomization and dispersed spray, 1st Ercoftac Conference on simulation of of Multiphase flows in Gasification and Combustion , 2011.
2. Duret, B., Ménard, T., Berlemont, A., Reveillon, J., Demoulin, 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 quantique 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. Barbazanges, M.; Augé, M.; Moussa, J.; Amouri, H.; Aubert, C.; Desmarests, C.; Fensterbank, L.; Gandon, V.; Malacria, M.; Ollivier, 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.; Guillot, R.; Malacria, M.; Tabet, J.-C.; Goddard, J.-P.; Fensterbank, L.; Gandon, V.; Gimbert, Y. Chem. Sci. 2011, DOI: 10.1039/C1SC00478F.

- Using Nazarov Electrocyclization to Stage Chemoselective [1,2]-Migrations: Stereoselective Synthesis of Functionalized Cyclopentenones. Leboeuf, D.; Huang, J.; Gandon, V.; Frontier, A. J. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, DOI: 10.1002/anie.201104870
- Activated Phenacenes from Phenylenes by Nickel-Catalyzed Alkyne Cycloadditions. Gu, Z.; Boursalian, G. B.; Gandon, V.; Padilla, R.; Shen, H.; Timofeeva, T. V.; Tongwa, P.; Vollhardt, K. P. C.; Yakovenko, A. A. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, DOI: 10.1002/anie.201103428
- Solvent/Base Effects in the Selective One-Pot Synthesis of Phenanthridinones involving High-Valent Palladium Species: Experimental and Theoretical Studies. Donati, L.; Leproux, P.; Prost, E.; Michel, S.; Tillequin, F.; Gandon, V.; Porée, F.-H. *Chem. Eur. J.* 2011, DOI: 10.1002/chem.201101354.
- Au-Catalyzed 1,3-Acyloxy Migration/5-exo-dig Cyclization/1,5-Acyl Migration of Diynyl Esters. Leboeuf, D.; Simonneau, A.; Aubert, C.; Malacria, M.; Gandon, V.; Fensterbank, L. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, 50, 6868–6871.
- New Elements in the Gold(I)-Catalyzed Cycloisomerization of Enynol Ester Derivatives Embedding a Cyclohexane Template. Harrak, Y.; Makhlof, M.; Azzaro, S.; Mainetti, E.; Lopez Romero, J. M.; Cariou, K.; Gandon, V.; Goddard, J.-P.; Malacria, M.; Fensterbank, L. *J. Organomet. Chem.* 2011, 696, 388–399
- A Gallium-Catalyzed Cycloisomerization/Friedel–Crafts Tandem. Li, H.-J.; Guillot, R.; Gandon, V. *J. Org. Chem.* 2010, 75, 8435–8449.
- Cobalt-Mediated Linear 2:1 Cooigomerization of Alkynes with Enol Ethers to Give 1-Alkoxy-1,3,5-Trienes: A Missing Mode of Reactivity. Leboeuf, D.; Iannazzo, L.; Geny, A.; Malacria, M.; Vollhardt, K. P. C.; Aubert, C.; Gandon, V. *Chem. Eur. 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 Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Florent LOUIS

Laboratoire : PC2A (Villeneuve d'Ascq)

Heures.CPU produites en 2011 : 43 655

**Publications**

- CANNEAUX S., WALLET A., RIBAUCCOUR M., LOUIS F. , A Theoretical Study of the NCN ( $^3\Sigma^-$ ) Biradical Thermochemical Properties: Implications for combustion chemistry, *Computational and Theoretical Chemistry*, 967, 67-74, 2011
- LOUIS F., CERNUSAK I., CANNEAUX S., MECIAROVA K., Atmospheric reactivity of  $\text{CH}_3\text{I}$  and  $\text{CH}_2\text{I}_2$  with OH radicals: A Comparative study of the H- versus I-abstraction. *Computational and Theoretical Chemistry*, special issue "Theoretical chemistry of atmospheric processes", 965, 275-284, 2011
- MECIAROVA K., SULKA M., CANNEAUX S., LOUIS F., CERNUSAK I. A Theoretical Study of the Kinetics of the Forward and Reverse Reactions  $\text{HI} + \text{CH}_3 = \text{I} + \text{CH}_4$ , *Chemical Physics Letters*, 517, 149-154, 2011.
- HAMMAECHER C., CANNEAUX S., LOUIS F., CANTREL L. A Theoretical Study of the H-abstraction Reactions from HOI by Moist Air Radiolytic Products (H, OH, and O ( $^3P$ )) and Iodine Atoms ( $2P_{3/2}$ ) *Journal of Physical Chemistry A*, 115, 6664-6674, 2011

**Communications orales dans des colloques et congrès avec actes**

- ČERNUŠÁK I., MEČIAROVÁ K., ŠULKA M., SUDOLSKÁ M., LOUIS F., CANNEAUX S., CANTREL L. Heavy iodine in spotlight, 4th Japan-Czech-Slovak Symposium for Theoretical and Computational Chemistry, Byšice (République Tchèque), 18-20 Mai 2011.

2. ČERNUŠÁK I., LOUIS F., MEČIAROVÁ K., CANNEAUX S., ŠULKKA M., Atmospheric chemistry of iodine World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Santiago de Compostela (Espagne), 17-22 Juillet 2011
3. CANTREL L., BADAWI M., LOUIS F., CANNEAUX S., Ability of theoretical chemistry to predict thermochemistry and reactivity of gaseous caesium species of nuclear safety interest, World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Santiago de Compostela (Espagne), 17-22 Juillet 2011

**Communications orales dans des colloques et congrès sans actes**

1. MEČIAROVÁ K., ŠULKKA M., ČERNUŠÁK I., LOUIS F., CANNEAUX S., Atmospheric reactivity of iodoalkanes with OH radicals, Groupe de Cinétique et de Photochimie en Phase Gazeuse, Villeneuve d'Ascq, 30-31 Mai 2011

**Affiches dans des colloques et congrès avec actes**

1. MEČIAROVÁ K., ŠULKKA M., ČERNUŠÁK I., LOUIS F., CANNEAUX S., The reactivity of OH radical toward CH<sub>2</sub>Cl molecule in the atmosphere, 4th Japan-Czech-Slovak Symposium for Theoretical and Computational Chemistry, Byšice (Czech Republic), 18-20 Mai 2011
2. LOUIS F., MEČIAROVÁ K., ŠULKKA M., COURTS T., HAMMAECHER C., CANNEAUX S., ČERNUŠÁK I., Reactivity of halogenated alkanes: implications for the environment, 10th Central European Symposium on Theoretical Chemistry, Torun (Pologne), 25-28 Septembre 2011

**Collaborations**

- Université de Reims Champagne Ardenne (Thibaud Cours)
- Comenius University, Bratislava (Ivan Cernusak)

**18. Projet : 2007003****Intitulé : Modélisation de l'évolution de la microstructure dans un acier modèle au cours de traitements thermiques**

Famille Thématique : Matériaux

Porteur : Nicolas LECOQ

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2011 : 75

**Publications**

1. E. Henry, E. Andrieu, J. Lacaze, F. Danoix, N. Lecoq, "Study by differential thermal analysis of reverse spinodal transformation in 15-5 PH alloy", Solid State Phenomena, Vols. 172-174 (2011) pp 338-343
2. N. Lecoq, J. Lacaze, F. Danoix, R. Patte, "Phase-field modelling of spinodal decomposition during ageing and heating", Solid State Phenomena, Vols. 172-174 (2011) pp 1072-1077
3. N. Lecoq, H. Zapolsky, P. Galenko, "Numerical approximation of the Cahn-Hilliard equation with memory effects in the dynamic of phase separation", Discrete and Continuous Dynamical Systems, 2011, in press
4. M. Grasselli, N. Lecoq and M. Pierre, "A long-time stable fully discrete approximation of the Cahn-Hilliard equation with inertial term", Discrete and Continuous Dynamical Systems, 2011, in press

**Collaborations**

- CIRIMAT (Toulouse)

**Stage**

1. G. Larée, "Caractérisation d'un alliage Fe-Cr par la méthode des champs de phase", (Université de Cergy-Pontoise, L3) avril-juin 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. Gonzales-Baro, S. Malo, J.-M.I Rueff, S. Petit, M.-B. Lepetit, B. Raveau, N. Barrier, «The dehydration of  $\text{SrTeO}_3(\text{H}_2\text{O})$  - a topotactic reaction for preparation of the new metastable strontium oxotellurate(IV) phase  $\square\epsilon\text{-SrTeO}_3$ », Dalton Transactions 40, 5538 (2011).

**Articles soumis**

1. M.B. Lepetit, B. Mercey, C. Simon, «Understanding interface effects in perovskites 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 à Phys. Rev B.
3. K. Singh, N. Bellido, C. Simon, J. Varignon, M.-B. Lepetit, A. De Muer, S. Pailhès, «Role of ferromagnetic component in the ferroelectricity of  $\text{YMnO}_3$ », soumis à Phys. Rev B.
4. S. Chausson, M.-B. Lepetit, O. Perez, R. Retoux, J.M. Rueff, C. Simon, L. Le Pluart, P.A. Jaffrès, «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 du French-Japanese symposium on quantum magnetism in spin, charge and orbital systems.

**Thèse**

1. Julien VARIGNON, «Etude du couplage 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 du Rouvray)

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](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 DyFe<sub>2</sub>(1) /YFe<sub>2</sub>(4) in function of the temperature", S. Djedai, P.E. Berche, C. Dufour, Condensed Matter and Material Physics (CMMP10) Warwick University, Coventry, Royaume-Uni (14/16-12-2010)

**Affiche**

1. "Simulation Monte Carlo du couplage d'échange dans le système DyFe<sub>2</sub>(1) /YFe<sub>2</sub>(4) en fonction de la température", S. Djedai, P.E. Berche, K. Dumesnil, C. Dufour, Nanomagnetism and Spintronics, 24-25/11/2010, Grenoble

**Collaboration**

- Université de Tébessa

**Thèse**

1. S. Djedai ("Modélisation et simulations numériques de multicouches 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 : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Abdenacer IDRISSE

Laboratoire : LASIR (Villeneuve d'Ascq)

Heures.CPU produites en 2011 : 263 409

**Publications**

1. Reorientation relaxation in supercritical ammonia, I. Vyalov, M. Kiselev, T. Tassaing, J.C. Soetens, M. Federov, P. damay, A. Idrissi, J. Mol. Liq., Année: 2011, Volume: 159, Pages: 31 - 37

2. Heterogeneity of the local structure in Sub- and supercritical ammonia: a voronoi polyhedra analysis  
A. Idrissi, I. Vyalov, M. Kiselev, M.V. Fedorov, P. Jedlovszky, J. Phys. Chem. B, Année: 2011, Volume: 115, Pages: 9646 - 9652
3. Assessment of the potential models of acetone/CO<sub>2</sub> and ethanol/CO<sub>2</sub> mixtures by computer simulation and thermodynamic integration in liquid and supercritical states, A. Idrissi, I. Vyalov, M. Kiselev, P. Jedlovszky, Phys. Chem. Chem. Phys., Année: 2011, Volume: 13, Pages: 16272 – 16281
4. Local structure in sub- and supercritical CO<sub>2</sub>: a Voronoi polyhedra analysis study, A. Idrissi, I. Vyalov, P. Damay, M. Kiselev, Y.P. Puhovski, P. Jedlovszky, J. Mol. Liq., Année: 2010, Volume: 153, Pages: 20 - 24
5. The effect of urea on the structure of water: a molecular dynamics simulation, A. Idrissi, M. Gerard, P. Damay, M. Kiselev, Y.P. Puhovski, E. Cinar, P. Lagant, G. Vergoten, J. Phys. Chem. B, Année: 2010, Volume: 114, Pages: 4731 - 4738

### Communications orales

1. Cellobiose solvation free energy in ScCO<sub>2</sub> with cosolvent, I.Vyalov, A. Idrissi, M. Kiselev, 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/CO<sub>2</sub> and ethanol/CO<sub>2</sub> mixtures by computer simulation and thermodynamic integration in liquid and supercritical states. A. Idrissi, I.Vyalov, M. Kiselev , P. Jedlovszky, Séminaire à l'institut de la chimie des solutions , Ivanovo, Russia, Juillet 2011
3. Clustering and structure of sub- and supercritical fluids. Vyalov I., Idrissi A., Kiselev M.G, 18 Mars 2010, "Journées Nord-Ouest Européennes des Jeunes Chercheurs", Villeneuve d'Ascq, France
4. Cellobiose solvation free energy in SC CO<sub>2</sub> with co-solvents. Vyalov I. I., Idrissi A., Kiselev M. G., 2010, Leipzig, Germany, "Solvation in Complex Liquids: Bridging Length Scales by Theory and Experiment"
5. Modelling of cellobiose solvation in supercritical fluids, Vyalov I. I., Idrissi A., Kiselev M. G. ", 2011, Irkutsk, Russia, "Supercritical Fluids (SCFs): Fundamentals, Technologies, Innovations"
6. Modeling solvation of cellobiose in supercritical CO<sub>2</sub> and its mixtures with acetone and ethanol Vyalov I.I., Idrissi A., Kiselev M.G. ", 2011, Warsaw, Poland, "New outlook on molecular liquids from short scale to long scale dynamics"

### Thèse

1. Thèse de Vyalov Ivan (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. Mécanique des fluides

Porteur : Arnaud MARTEL

Laboratoire : UCO<sub>2</sub>M (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 du Havre, 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 Thématique : Chimie

Porteur : Emmanuel RIVIERE

Laboratoire : UMR 6089 (REIMS)

Heures.CPU produites en 2011 : 2 927

**26. Projet : 2008008**

**Intitulé : Simulation en hydrodynamique avec une méthode SPH.**

Famille Thématique : Mécanique des fluides

Porteur : David LETOUZE

Laboratoire : LMF (NANTES)

Heures.CPU produites en 2011 : 14 501

**27. Projets : 2008012 (comptabilisé 2003006)**

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

Famille Thématique : Mécanique des solides

Porteur : Fabrice BARBE

Laboratoire : LMR - UMR 6138 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2010 : 1689

**Article de revue internationale**

1. A. Tahimi, F. Barbe, L. Taleb, R. Quey, A. Guillet, Evaluation of microstructure-based transformation plasticity models from experiments on 100C6 steel, Computational Material Science, Sous presse, doi:10.1016/j.commatsci.2011.01.052

**Thèse soutenue**

1. Abdeladhim Tahimi, Plasticité induite par transformations de phases dans les aciers. Expérience vs modélisations, Thèse de doctorat de l'INSA de Rouen, Juillet 2011

**28. Projet : 2008013**

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

Famille Thématique : 2b. Ecoulements réactifs ou/et multiphasiques

Porteur : Yves D'ANGELO

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2011 : 641 440

**Publications**

1. CNF2011 E. Albin, Y. D'Angelo & L. Vervisch, Flow streamline based Navier–Stokes Characteristic Boundary Conditions : modeling for transverse and corner outflows, Computers & Fluids, 2011, doi : 10.1016/j.compfluid.2011.08.005.



2. IJNLM2011 G. Boury & Y. D'Angelo, On third order density contrast expansion of the 11 evolution equation for wrinkled unsteady premixed flames, International Journal of Non-Linear Mechanics, doi :10.1016/j.ijnonlinmec.2011.05.018
3. IFNMF2011 E. Albin, Y. D'Angelo & L. Vervisch, Using staggered grids with acoustic boundary conditions when solving compressible reactive Navier-Stokes equations. International Journal for Numerical Methods in Fluids, 2011, doi :10.1002/flid.2520.
4. IHMT2011 J. Dombard, B. Leveugle, L. Selle, J. R. Eveillon, T. Poinso & Y. D'Angelo, Modeling heat transfer in diluted two-phase flows using the Mesoscopic Eulerian Formalism, en cours d'acceptation à International Journal of Heat and Mass Transfer, 2011.
5. CAF2011 E. Albin & Y. D'Angelo, Assessment of an Evolution Equation Modelling approach for 3D expanding wrinkled premixed flames, soumis à Combustion & Flame, 2011.
6. ECM2011s M. Sjostrand, Y. D'Angelo, S. Liu & B. Renou, "Direct Numerical Simulation of a cubic air-methane microcombustor", European Combustion Meeting, Cardiff, July 2011.
7. ECM2011i B. Leveugle, J. R. Eveillon & Y. D'Angelo, "DNS study of Flame/wall interaction and heat transfer", European Combustion Meeting, Cardiff, July 2011.
8. ECM2011a E. Albin & Y. D'Angelo, "Effects of Navier-Stokes Characteristic Outflow Boundary Conditions : modeling for transverse flows", European Combustion Meeting, Cardiff, July 2011.

### Conférences et posters

1. Corfu2011i B. Leveugle, Y. D'Angelo & J. R. Eveillon, DNS of Flame/Wall Interaction and Heat Transfer at the Wall, Int. Conf. on Numerical Combustion, April 2011, Corfu, Greece.
2. Corfu2011a E. Albin & Y. D'Angelo, Study of expanding turbulent flames : comparisons between DNS, EEM and experimental results, Int. Conf. on Numerical Combustion, April 2011, Corfu, Greece.
3. Corfu2011s M. Sjostrand & Y. D'Angelo, Direct Numerical Simulation of a cubic meso-scale Methane-Air combustor, Int. Conf. on Numerical Combustion, April 2011, Corfu, Greece.

## 29. Projet : 2009002

### Intitulé : Régionalisation des changements climatiques

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Thierry CASTEL

Laboratoire : CRC - UMR 5210 (DIJON)

Heures.CPU produites en 2011 : 62 258

### Publications

1. Xu Y., T. Castel, Y. Richard, C. Cuccia and B. Bois 2011, Burgundy Regional Climate Change and its potential impact on Grapevines, Climate Dynamics. In revision.
2. Richard Y., B. Bois, T. Castel, J.-P. Chabin, J. Crétaf, C. Cuccia, D. Thévenin, Géostatistique, radio sondages et modèles numériques à aire limitée : données et méthodes croisées pour l'étude d'un événement froid en France, AIC, p 513-518.
3. Cuccia C. Richard Y., T. Castel, B. Bois, D. Thévenin, Évolution des structures spatiales récurrentes des températures quotidiennes en Bourgogne AIC, p153-158
4. Duc G., Blancard S., Hénault C., Lecomte C., Petit M.-S., Bernicot M.-H., Bizouard F., Blanc N., Blondon A., Blosseville N., Bonnin E., Bois B., Castel T., Challan-Belval C., Coulon C., Delattre M., Deytieux V., Dobrecourt J.-F., Dumas M., Geloën M., Humeau F., Huot E., Jeuffroy M.-H., Killmayer M., Larmure A., Lelay D., Leseigneur A., Mabire J.-B., Mangin P., Marget P., Million G., Raynard L., Robin P., Ronget D., Richard Y., Vaccari V., Vermue A., Villard A., Villery J., Vivier C., 2010, Potentiels et leviers pour développer la production et l'utilisation des protéagineux dans le cadre d'une agriculture durable en Bourgogne, Innovations Agronomiques, 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 Cédric Cuccia sur « Changements climatiques et potentialités viticole du pinot noir et du 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 », 51 p.

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

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Kuan Fang REN

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2011 : 10 332

**Publication**

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

**Thèse en cours**

1. Y. Yuan. 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 Rouen.

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Yann ROUX

Entreprise : K-EPSILON (SOPHIA ANTIPOLIS)

Heures.CPU produites en 2011 : 122 961

**Thèse en cours**

1. Mathieu Durand, Interaction fluide-structure souple et légère, application aux voiliers, thèse CIFRE avec l'ECN (Ecole Centrale de Nantes) et l'IRENav (Institut de Recherche de l'Ecole Navale)

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

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

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : LRPMM (DAMIGNY)

Heures.CPU produites en 2011 : 81 298

**Publications**

1. "Screw threading dislocations in AlN: structural and electronic properties of In & O doped material", Kioseoglou, E. Kalesaki, I. Belabbas, J. Chen, G. Nouet, H. Kirmse, W. Neumann, Ph. Komninou and Th. Karakostas, J. Appl. Phys. 110, 053715 (2011)
2. "A new atomistic model for the threading screw dislocation core in wurtzite GaN". I. Belabbas, J. Chen and G. Nouet. Computational Materials Science, 51, 206 (2011).

**Communications**

1. "Different behaviors of Al distributions in AlInN and AlGaN alloys containing c-screw dislocations", Huaping LEI, Jun CHEN, and Pierre RUTERANA, Congrès EDS 2010 à Brighton, UK.
2. J. Kioseoglou, E. Kalesaki, I. Belabbas, J. Chen, G. Nouet, Ph. Komninou and Th. Karakostas. Effect of screw threading dislocations on the optoelectronic properties of AlN. XXVII PanHellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science. Limassol (Cyprus), 18th-21st September 2011.
3. J. Kioseoglou, E. Kalesaki, I. Belabbas, J. Chen, G. Nouet, Th. Karakostas and Philomela Komninou, Screw Threading Dislocations as Conductive Nanowires in AlN: Role of Doping, MRS Fall Meeting Boston (USA), Nov 28th-Dec 2nd 2011.
4. J. Kioseoglou, E. Kalesaki, I. Belabbas, J. Chen, G. Nouet, H. Kirmse, W. Neumann, Ph. Komninou and Th. Karakostas. Structural and electronic properties of decorated screw dislocation cores in AlN, 8th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies – NN11, Thessaloniki, Greece, 12-15 July 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 : Sylvian 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 Multiply Functionalized Mesoporous Films with Ion Conduction Properties, J. Am. Chem. Soc. 2011, 133, 16023-16036.

**Publications en cours de rédaction**

1. D.H. Brouwer, 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. Nour and D. Massiot, Comparison of Cluster and Planewave-Based First Principle Approaches for the Calculations of Two-Bond Si-O-Si Scalar Couplings in Zeolites, in preparation.

**Communications orales dans des conférences internationales**

1. S.Cadars, M.Allix, D.H.Brouwer, R.Shayib, M.G.Nagendrchar, Z.Nour, M.Deschamps, M.F.Hsieh, A.W.Burton, S.I.Zones, D.Massiot, B.F.Chmelka, Structure Determinations of Molecularly-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.Allix, R.Shayib, H.Dozol, A.W.Burton, S.I.Zones, D.Massiot, B.F.Chmelka, Structure Determination of a New 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 : 9. Physique, chimie et propriétés des matériaux

Porteur : Denis LEDUE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

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", XIVème Colloque Louis Néel "Couches minces et nanostructures magnétiques", Brest (20-23 septembre 2011), Prix du Meilleur Poster

**Collaboration**

- Spintec (Grenoble)

**Thèse**

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

**Stage**

1. Jeremy Fourre, "Bicouches à anisotropie d'échange: etude 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 L. 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, Campus Sursee, Sursee (Suisse), François Zielinski, Vincent Tognetti et Laurent Joubert, « Condensed descriptors for reactivity: a methodological study » (poster).
4. Quitel 2011, 4-9 Décembre 2011, Riviera Maya (Mexique), 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. Hanoune, D. Duflot, 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 quantique 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 acetylenic substituent on the intramolecular carbolithiation of alkynes", Fressigné, C.; Girard, A.-L.; Durandetti, M.; Maddaluno, J. En préparation.

**Communications**

1. "Heterocyclization by intramolecular carbometallation of alkynes"  
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. Rudy Lhermet, "Carbométallation intramoléculaire d'alcynes et alcènes hétérosubstitués", Université de Rouen, novembre 2011

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Pierre-Michel GUILCHER

Laboratoire : Hydrocean (NANTES)

Heures.CPU produites en 2011 : 259 019

**Thèse**

1. Thèse de Matthieu de Lefte, avec le LMF (Laboratoire de Mécanique des Fluides) de l'ECN (Ecole Centrale de Nantes).

**Collaborations**

- Laboratoire de Mathématique Jean Leray de l'Université de Nantes (UMR6629 CNRS)
- Laboratoire de Mécanique des Fluides de l'Ecole Centrale de Nantes
- Projet Citeph
- Projet TULCS (Tools for Ultra Large Containers Ships)
- Projet NextMuSE (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 quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Georges DUPAS

Laboratoire : ECOFH (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU produites en 2011 : 63 143

**Publications**

1. Rod-like conjugated molecules with ethynylene linkage and pyridazines 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 Substitutive Coupling of Electronrich Heterocycles: First Study on Oxazole and Thiazole-4-Carboxylate Series. Laure Théveau, Cécile Verrier, Pierrick Lassalas, Thibaut Martin,] Georges Dupas, Olivier Quérolle, Luc Van'Hijfte, Francis Marsais, Christophe Hoarau
3. Mechanism Selection for Regiocontrol in Direct Substitutive Coupling of Electronrich Heterocycles: First Study on Oxazole and Thiazole-4-Carboxylate Series. Laure Théveau, Cécile Verrier, Pierrick Lassalas, Thibaut Martin,] Georges Dupas, Olivier Quérolle, Luc Van'Hijfte, Francis Marsais, Christophe Hoarau
4. The First Example of the Diels-Alder Reaction for Fluorinated Ketene dithioacetals, soumis à *Tetrahedron*

**Collaborations**

- Equipe du Pr Jean-Philippe Bouillon (SMS EA 3233)
- Dr Christophe Hoarau, UMR 6014 COBRA

**Thèses en cours**

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

**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 YNiO<sub>3</sub> perovskite: a GGA+U APW approach" Malgorzata Szwaja 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<sub>0.5</sub>Li<sub>0.5</sub>TiO<sub>3</sub>" Manuscript ID IONICS-2010-0140.R2 B.Sitamze S.Zekeng S.Domnang F.Calvayrac and A.Bulou
3. "Coupled structural and magnetic properties of ferric fluoride nanostructures: part II, a Monte-Carlo Heisenberg study" B.Fongang Y.Labaye S.Zekeng J.-M.Grenèche and F.Calvayrac MAGMA-D-10-00117R2 to appear in *J.Magnetism and Magnetic Materials* 2011

**Publication en préparation**

1. Lattice dynamics of  $\beta$ -SnWO<sub>4</sub> : infrared, polarized Raman and ab-initio calculations  
Justyna WOJCIK , Noureddine MHADHBI , François GOUTENOIRE, Florent CALVAYRAC, Gwenaël CORBEL,  
Philippe LACORRE , Alain BULOU

**Conférence et poster**

1. "Ab initio modelling of ligands and nanoparticles used in magnetic hyperthermia" K. Brymora S. Ammar  
J. Fouineau 2, N. Yaacoub 1, J.-M. Grenèche 1, F. Calvayrac Communication à Nanomedicine Summer  
School, Lutherstadt 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 Willy Leclerc (2010- )

**Stages**

1. Stage de master 2 de Delphine Guérard



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

Famille Thématique : Matériaux

Porteur : Jocelyne Galy

Laboratoire : IMP - INSA Lyon (VILLEURBANNE)

Heures.CPU produites en 2011 : 8 652

**Thèse en cours**

1. Thèse de Thibault Cousin - Projet ANR « Du glucose aux polyamides : nouveaux procédés d'accès et de transformation de l'hydroxyméthylfurfural. »

**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 Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Christian DUFOUR

Laboratoire : CIMAP - UMR 6252 (CAEN)

Heures.CPU produites en 2011 : 1 458

**Publications**

1. Electromagnetic modeling of waveguide amplifier based on Nd<sup>3+</sup> Si-rich SiO<sub>2</sub> layers by means of the ADE-FDTD method, Dufour, Christian; Cardin, Julien; Debieu, Olivier; et al., NANOSCALE RESEARCH LETTERS Volume: 6, Article Number: 278, DOI: 10.1186/1556-276X-6-278, Published: APR 4 2011.

**Communications lors de congrès internationaux**

1. EMRS European Materials Research Society (EMRS Warsaw).

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

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Xavier MORELLI

Laboratoire : IMR (MARSEILLE)

Heures.CPU produites en 2011 : 15 843

**Publication**

1. Morelli, X., Bourgeas, R., and Roche, P., Chemical and Structural Lessons from recent successes in Protein-Protein Interaction Inhibition (2P2I). Current Opinion Chemical Biology 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 à l'occasion de ce test a été communiqué à l'équipe technique du 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 (Accelrys), et SYBYL (Tripos) pour :

- La description et l'analyse des structures cristallines
- Les études de croissance cristalline et de prédiction de morphologie
- L'analyse du polymorphisme et de transitions solide-solide
- L'étude des mécanismes de désolvatation 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 study with Ciclopirox crystals, A Waldschmidt, N. Couvrat, B. Berton, V. Dupray, S. Morin, S. Petit, G. Coquerel, *Cryst. Growth Des.*, 2011, 11 (6), 2463-2470
2. About aged heterogeneous liquid inclusions inside organic crystals in relation to crystal formation, structure and morphology, A. Waldschmidt, I. Rietveld, N. Couvrat, V. Dupray, M. Sanselme, B. Berton, B. Nicolai, N. Mahé, S. Petit, R. Céolin, G. Coquerel, *Cryst. Growth Des.*, 2011, 11 (6), 2580-2587
3. Crystal structures, dehydration mechanism and chiral discrimination in the solid state of a hydantoin derivative, Y. Amharar, S. Petit, M. Sanselme, Y. Cartigny, M.-N. Petit, G. Coquerel, *Cryst. Growth Des.*, 2011, 11 (6), 2453-2462
4. Formation of crystalline hollow whiskers 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 unnatural bulky amino acids, L. Ferron, F. Guillen, S. Coste, G. Coquerel, P. Cardinael, J. Schwartz, J.-M. Paris, J.-C. Plaquevent, *Tetrahedron*, 2011, 67 (33), 6036-6044
6. Efficient preparation of enantiomerically pure  $\alpha$ -aryl- $\alpha$ -trifluoromethylglycines via Auto Seeded Programmed Polythermic Preferential Crystallization of 5-aryl-5-trifluoromethylhydantoins T. Martin, C. Massif, N. Wermester, J. Linol, S. Tisse, P. Cardinael, G. Coquerel, J.-P. Bouillon, *Tetrahedron: Asymmetry*, 2011, 22 (1), 12-21
7. Resolution of ( $\pm$ )-Imeglamin-2,4-dichlorophenylacetate methanol solvate by Preferential Crystallization S. Wacharine-Antar, G. Levilain, V. Dupray, G. Coquerel, *Org. Proc. Res. Dev.*, 2010, 14, 1358-1363
8. Pitfalls and rewards of Preferential Crystallization, G. Levilain, 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. Semenishyna, V. Pavlovsky, Y. Simonov, S. Makan, I. Boyko, N. Burenkova, M. Gdaniec, P. Cardinael, J.-P. Bouillon, A. Mazepa, *Eur. J. Med. Chem.*, 2010, 45(4) 1346-1351

#### **Communications au cours de congrès internationaux**

1. Study of solid-liquid and solid-vapour equilibria in tenatoprazole salt/solvents systems, G. Tauvel, Y. Cartigny, M. Sanselme, G. Coquerel, XXXVII èmes JEEP, Saint Avold, Mars-Avril 2011, Abstract book, p. 47-48.
2. Development of a zone melting prototype applied to organic compounds, N. Couvrat, S. Tisse, Y. Cartigny, G. Coquerel, XXXVII èmes JEEP, Saint Avold, Mars-Avril 2011, Abstract book, p. 49-50.
3. On the systematic presence of gas in liquid inclusions, A. Waldschmidt, B. Berton, V. Dupray, 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. Rougeot, J. Mahieux, F. Guillen, J.-C. Plaquevent, 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. Levilain, G. Coquerel, XXXVII èmes JEEP, Saint Avold, Mars-Avril 2011, Abstract book, p. 139-140 (prix poster).
2. Subambient heterogeneous equilibria of: 5-(4-Ethylphenyl)-5-Methylhydantoin in Methanol - water mixtures. A case of solvent dependant chiral discrimination in the solid state, Y. Amharar, S. Petit, M. Sanselme, Y. Cartigny, 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. Dupray, 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 hydantoin  
Y. Amharar, S. Petit, M. Sanselme, Y. Cartigny, M-N Petit, G. Coquerel, BIWIC-18, Delft (NL), September 2011, ISBN 978-94-6191-00365, pp. 221-226
5. Particle amorphization during spray drying 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 Analysis and Use of Phase Diagrams to design enantiomeric resolutions by crystallization, Directeur G. Coquerel, soutenance Octobre 2010, thèse Européenne.
2. LAMBERT Olivier, Study of the precipitation phenomenon of X-Rays contrast media for medical imaging, Directeur G. Coquerel, soutenance Mai 2011, thèse Européenne.
3. COUVRAT Nicolas, Four case studies on the impact of the heterogeneous equilibria on physicochemical behaviour of organic solids, Directeur G. Coquerel, soutenance Mai 2011, thèse Européenne.
4. MARTINS Damien Etude d'un procédé de cristallisation par atomisation et développement d'un prototype original de spray dryer en vue d'accéder à des nanomatériaux, Directeur G. Coquerel, Septembre 2011.
5. AMHARAR Youness, Etude des origines moléculaires de la discrimination chirale à l'état solide, Directeur S. Petit, soutenance fin 2011.
6. WALDSCHMIDT Audrey, Etude des mécanismes de formation de défauts micro- et macroscopiques à l'intérieur de cristaux organiques à vocation pharmaceutique, 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 écotoxicologiques et toxicologiques des produits chimiques (programmes ANR).
- Inhibiteurs des interactions protéine-protéine.
- Etudes structures activités de ligands sérotoninergiques.
- Analyses des données issues de diffraction RX.

**Publication**

1. Lozano, S.; Halm-Lemeille, M.P.; Lepailleur, A.; Rault, S.; Bureau, R. Consensus QSAR Related to Global or MOA Models. Application to Acute Toxicity for Fish. *Mol. Inf.* 2010, 29, 803-813.
2. Chosson E., Rochais C., Legay R., Sopkova-de Oliveira Santos J., Rault S., Dallemagne P. First and mild synthesis of fluorene-9-malonic acid and some substituted derivatives via the intramolecular hydroarylation of 2-phenylbenzylidenemalonic acids, *Tetrahedron* , 2011, 67, 2548-2554.
3. Julienne D., Delacroix O., Lohier J.-F., Sopkova-de Oliveira Santos J., Gaumont A.-C. Mechanistic Insights into the Palladium-Catalysed Asymmetric Phosphination of Cyclohexenyl Triflate., *European Journal of Inorganic Chemistry* , 2011, 16, 2489-2498.
4. Cheikh N., Bar N., Choukchou-Braham N., Mostefa-Kara B., Lohier J.-F., Sopkova-de Oliveira Santos J., Villemin D. Efficient synthesis of new butenolides by subsequent reactions: Application for the synthesis of original iminolactones, bis-iminolactones and bislactones. *Tetrahedron* , 2011, 47, 1540-1551
5. Marassio G., Prangé T., David H.N., Sopkova-de Oliveira Santos J., Gabison L., Delcroix N., Abraini J., Colloc'h N. A pressure-response crystallographic study of binding mode of urate oxidase with xenon, nitrous oxide and mixture of both. *Faseb* , 2011, 25, 1-10.
6. Rochais C., Yougnia R., Cailly T., Sopkova-de Oliveira Santos J., Rault S. One-pot synthesis of new aza- and diaza-aminophenanthrenes. *Tetrahedron*, 2011, 67, 5806-5810.
7. Sopkova-de Oliveira Santos, Jana; voisin-chiret, anne sophie; Burzicki, Gregory; Sebaoun, Laure; Sebban, Muriel; Lohier, Jean-François; Legay, Rémi; Oulyadi, Hassan; Bureau, Ronan; Rault, Sylvain. Structural characterisations of oligopyridyl foldamers,  $\alpha$ -helix mimetics. *J. Chem. Inf. Model.* 2011, accepted.
8. Lepailleur, A.; Bureau, R.; Halm-Lemeille, M.P.; Bouquet, M.; Pecquet, R.; Paris-Soubayrol, 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.; Lepailleur, A.; Bureau, R.; Rault, R. QSARs Models for Honeybees Contact Toxicity Based on Mode of Action Classification: the Case of Acetylcholinesterase Inhibitors. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 2011, submitted.
10. Lecoutey, C.; Rochais, C.; Butt-Gueulle, S.; Corvaisier, S.; Dulin, F.; Lepailleur, A.; Sopkova-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 Chémoinformatique, 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. Dulin, F.; Halm-Lemeille, M.-P.; Lozano, S.; Lepailleur, A.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Rault, S.; Bureau, R. Honeybees contact toxicity associated to acetylcholinesterase inhibitors: QSAR and docking studies. 5èmes Journées de la Société Française de Chémoinformatique, Cabourg, 13-14 Octobre 2011.
2. Lepailleur, A.; Freret, T.; Lemaître, S.; Boulouard, M.; Dauphin, F.; Lesnard, A.; Lancelot, J.C.; Rault, S.; Bureau, R. Pyrrolo[1,2-a]thieno[3,2-e]pyrazines and Benzo[h][1,6]naphthyridine derivatives as ligands of H3 / 5-HT4 receptors. IVèmes Rencontres Normandes en Chimie-Biologie-Santé, Caen, 25 Novembre 2010.
3. Lepailleur, A.; Freret, T.; Lemaître, S.; Boulouard, M.; Dauphin, F.; Lesnard, A.; Lancelot, J.C.; Bureau, R.; Rault, S. Benzo[h][1,6]naphthyridine derivatives as ligands of H3 / 5-HT4 receptors. XIXème congrès du Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique, Rouen, 2-3 Septembre 2010.

**Collaborations universitaires (inter)régionales.**

1. Projet sur les peptides 26RFa : Unité INSERM U 413 (Dr. H. Vaudry, Dr J. Leprince) et IRCOF, laboratoire de RMN (Pr I. Milazzo), Université de Rouen, France. Dépôt du projet PIRCE en cours (infrastructure-d'excellence).
2. Projet Emergence (Innotox2, 2009-2012) : collaborations GREYC UMR 6072 et UMRM100 (UCBN).
3. Projet émergence (2011 – 2014) sur les IPP: Les interactions protéine-protéine (IPP) comme sources de conception de nouveaux médicaments anticancéreux : application à la recherche d'inhibiteurs des protéines anti-apoptotiques de la famille Bcl-2 pour le traitement des cancers de l'ovaire chimiorésistants. Collaboration GRECAN.

**Projet ANR.**

1. Projet INNO-TOX. Projet se plaçant dans le cadre de la thématique REACh. Collaboration PCAS (M. Bouquet) / CNRS 7186 (P. Vasseur). Fin 05/2011.
2. Projet pharm@ecotox, début 01/2011. Résidus pharmaceutiques et écotoxicologie en milieu marin. Collaboration avec ISM-LPTC (Université de Bordeaux), GMPC (Université de Caen Basse-Normandie), UMR M100 (Université de Caen Basse-Normandie), LIEBE (Université de Metz).

**Nouvelle thèse**

1. Mme Jade FOGHA (début septembre 2011)  
Financement région (programme émergence sur les IPP).  
Sujet : Mise en évidence d'une nouvelle classe de dérivés anti-apoptotiques, inhibiteurs d'interactions protéine-protéine.

**Thèse achevée**

1. M. Sylvain Lozano (soutenance décembre 2010).  
Financement ANR.  
Sujet : (Q)SAR et classification hiérarchique pour un ensemble hétérogène de données en écotoxicologie et toxicologie.

**Enseignements**

1. Travaux pratiques de modélisation moléculaire dans le cadre de l'UFR des sciences pharmaceutiques : 90 étudiants (autour de 40 heures).

### 3. RNMM : Plateforme PISSARO

#### Intitulé : Plateforme Instrumentale en Sciences Séparatives et Analytiques de Rouen

Responsable : JOUENNE Thierry

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 Cedex
- U1073 INSERM, Nutrition, Inflammation et dysfonction de l'Axe Intestin-Cerveau, 22 Bd Gambetta, 76183 ROUEN Cedex
- EA4358, Laboratoire Glyco-MEV : Glycobiologie 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 Réactivité Analyse (COBRA), IRCOF, rue Tesnières, 76131 Mont Saint Aignan Cedex
- U905 INSERM U.905 - Unité Inserm/Université de Rouen "Physiopathologie et biothérapies des maladies inflammatoires et autoimmunes", 22 Bd Gambetta, 76183 ROUEN Cedex

#### **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., Rihouey, C., Jouenne, 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., López, I., Jouenne, 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. Martí, S., Rodríguez-Baño, J., Catel-Ferreira, M., Jouenne, 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., Jouenne, 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., Jouenne, T. and F. Limam. Anti-Candida effect of bacillomycin D-like lipopeptides from *Bacillus subtilis* B38. *FEMS Microbiol. Lett.*, sous presse.
10. Dé, E., Cosette, P., Coquet, L. Siroy, A., Alexandre, S., Duncan, A, Naudin, B., Rihouey, C., Schaumann, A., Junter, G.A. and T. Jouenne. Membrane proteomes of *Pseudomonas aeruginosa* and *Acinetobacter baumannii*. *Path. Biol*, 2011, 59: e137-E140.

11. Kellenberger, C., Leone, P., Coquet, L., Jouenne, T., Reichhart J.-M., and A. Roussel. Structure-function 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., Jouenne, T., Leprince, J., Vaudry, H., Kolodziejek, J., Nowotny, N. and J.D. KING. Evidence from the structures of skin antimicrobial peptides that populations of *Lithobates chiricahuensis* (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., Jouenne, T., Vaudry, H., King, J.D. and J.M. Conlon. Peptidomic analysis of skin secretions demonstrates that *Xenopus muelleri* and *Xenopus alboventralis* (*X. muelleri* West) are not conspecific. *Peptides*, 2011, 32 : 1502-1508
15. CONLON, J.M., Mechkarska, M., Eman Ahmed, E., Laurent Coquet, L., Jouenne, T., Leprince, J., Vaudry, H., Marc P. Hayes, M.P. and G. Padgett-Flohr. Host defense peptides in skin secretions of the Oregon spotted frog *Rana pretiosa*: implications for species resistance to chytridiomycosis. *Develop. Comp. Immunol.*, 2011, 35: 644-649.
16. Blin, T., Purohit, V., Leprince, J., Jouenne, 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., Thebault, P., Liu, P.-H., Guenoun, P., Daillant, J. and S. Landis. Organization of block copolymers using nanoimprint lithography: comparaison of theory and experiments, *Macromolecules*, 2011, 44: 2206-2211.
18. Voxeur A, Gilbert L, Rihouey C, Driouich A, Rothan C, Baldet P, and P. Lerouge; 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, Coëffier M, Claeysens S, Leclaire S, Cailleux AF, Bôle-Feysot C, Chan P, Donnadiou N, Lerebours E, Lavoinnie A, Boyer O, Vaudry D and P. Déchelotte. Effects of an enteral glucose supply 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 by matrix-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-Thievent C, Hardouin J, Malbouyres M, Bréchet N, Nasciutti L, Barret A, Teillon J, Guillon E, Etienne E, Caron M, Joubert-Caron R, Monnot C, Ruggiero F, Muller L, and S. Germain. Lysyl oxidase-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., Mugnier P., Nordmann P., Siroy A., Jouenne T and E. Dé. Structure-Function 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., Jouenne, T. and E. DE. Growth of *Acinetobacter baumannii* in pellicle enhanced the expression of potential virulence factors. *Plos one*, 2011, 6: 1-11 (e26030).