



Rapport d'activité 2012 - Recueil des publications des laboratoires utilisateurs du pôle de modélisation numérique en 2012

Référence du document : ACC-AB-v1 - Révision 02 - Date de création : 29/01/2013

Validation : HP le 19/03/2013

Documents référencés : aucun

Résumé : Rapport d'Activité 2012 - Volet technique / Pôle Régional de Modélisation Numérique - Recueil des publications des laboratoires utilisateurs

Révisions :

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

Accessibilité

CRIHAN : **OUI**

EXTÉRIEURS : **OUI**

RESTREINT : **NON**

Table des matières

Introduction	5
Projets scientifiques expertisés	6
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	7
Projet : 2002003 Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	8
Projet : 2003008 Intitulé : Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	9
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	10
Projet : 2005003 Intitulé : Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins"	11
Projet : 2005004 Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands	11
Projet : 2005010 Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés	13
Projet : 2005013 Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition	13
Projet : 2005014 Intitulé : Etudes cinétiques des transformations de phases dans des alliages modèles des aciers	14
Projet : 2006003 Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente	14
Projet : 2006007 Intitulé : Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc	15
Projet : 2006013 Intitulé : Etude par DFT du mécanisme de la cooligomérisation 2:1 d'Alcynes et d'alcènes catalysée par les complexes du cobalt	15
Projet : 2007001 Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement	16
Projet : 2007013	17

Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés	
Projet : 2008001	17
Intitulé : Étude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe ₂ /YFe ₂	
Projet : 2008005	18
Intitulé : Etude du processus d'agrégation dans les solutions aqueuses : Analyse par simulation de dynamique moléculaire classique et quantique	
Projet : 2008013	20
Intitulé : Simulations d'écoulements fluides réactifs - Interactions flamme/paroi, combustion petite échelle, combustion stratifiée	
Projet : 2009002	21
Intitulé : Régionalisation des changements climatiques	
Projet : 2009005	21
Intitulé : Modélisation des propriétés optiques des objets complexes	
Projet : 2009006	22
Intitulé : K-Epsilon - Projet académique	
Projet : 2009007	22
Intitulé : Propriétés structurales et électroniques des Interfaces AlN/GaN	
Projet : 2010006	23
Intitulé : Couplage décharge dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique	
Projet : 2010010	23
Intitulé : Topologie quantique	
Projet : 2011001	24
Intitulé : Etude théorique du mécanisme d'une réaction de carbométallation intramoléculaire	
Projet : 2011002	25
Intitulé : Simulation numérique en hydrodynamique navale par méthode SPH	
Projet : 2011003	25
Intitulé : Approche théorique de nouveaux fluorophores pour les sciences de la vie	
Projet : 2011005	26
Intitulé : Etude sur modèles chimiques de réactions de Friedel-Crafts appliquée à la synthèse de polyaryléthercétones	
Projet : 2011007	27
Intitulé : Modélisation de systèmes nanostructurés : nanoparticules magnétiques, conducteurs ioniques	
Projet : 2011012	27
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 : 2012001	28
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 : 2012003	28

Intitulé : Simulation Monte Carlo de la croissance de nano colonnes dans le système Ge-Mn – comparaison à l'expérience à l'échelle atomique	
Projet : 2012006	29
Intitulé : Simulation hautes-fidélités de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe	
Projet : 2012008	30
Intitulé : Modélisation des joints de grains sous irradiation	
Contributions des structures du Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire	31
RNMM : SMS EA 3233	31
Intitulé : Sciences et Méthodes Séparatives	
RNMM : Plateforme PISSARO	33
Intitulé : Plateforme Instrumentale en Sciences Séparatives et Analytiques de Rouen	
RNMM : CERMN	36
Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie	
RNMM : UMR 6014 COBRA	38
Intitulé : Equipe Groupe Matériaux organiques	
RNMM : UMR 6014 COBRA	38
Intitulé : Equipe Analyse et Modélisation	

A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIHAN sur la période octobre 2011 à décembre 2012.

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

6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Jean-Guy CAPUTO

Laboratoire : LMI (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites en 2012 : 45

Publications de rang A

Nombre : 3

Liste :

1. "Fast control of the reflection of a ferroelectric by an extremely short pulse", J.-G. Caputo, A.I. Maimistov and E.V. Kazantseva, J. Optics, in revision (2012)
2. "Electrodynamics of a split-ring Josephson resonator in a microwave line", J.-G. Caputo, I. Gabitov and A.I. Maimistov, Phys Rev. B, 85, 205446, (2012).
3. "Oscillations of simple networks: the role of zero nodes", J.-G. Caputo, A. Knippel and E. Simo, J. Phys. A, (2012) in press <http://arxiv.org/abs/1109.3071>

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 2

Liste :

1. SIAM Conference on nonlinear waves and coherent structures, June 13-16 2012
Seattle USA, Organisation de 2 mini symposium par J.-G. Caputo
2. 3rd International Workshop on laser-matter interaction 2012, June 25-28 2012, Porquerolles, organisé par
Luc Berge, Présentation invitée de J.-G. Caputo

2. Projet : 1998022

Intitulé : Écoulements turbulents compressibles

Famille Thématique : 2a. Écoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

Laboratoire : LMFN - CORIA (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2012 : 1 397 621

Publications de rang A

Nombre : 6

Liste :

1. Britan, A., Shapiro, H., Liverts, M., Ben-Dor, G., Chinnayya, A., Hadjadj, A. Macro-mechanical modeling of blast-wave mitigation in foams. Part I: review of available experiments and models. Shock Waves, DOI: 10.1007/s00193-012-0400-0 (2012).
2. Del Prete, E., Chinnayya, A., Domergue, L., Hadjadj, A., Haas, J.-F. Blast wave mitigation by dry aqueous foams. Shock Waves, DOI: 10.1007/s00193-012-0400-0 (2012).
3. Yee, H.C., Sjogreen, B., Hadjadj, A. Comparative study of three high order schemes for LES of temporally evolving mixing layers. Communications in Computational Physics, 12(5): 1603-1622, (2012).
4. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Sadot, O., Ben-Dor, G. Numerical study of shock-wave mitigation through matrices of solid obstacles. Shock Waves, DOI 10.1007/s00193-012-0362-2 (2012).

5. Hadjadj, A., Yee, H.C., Sjogreen, B. LES of temporally evolving mixing layers by an eighth-order filter scheme. *International Journal Numerical Methods in Fluids*, 70: 1405-1427 (2012).
6. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Sadot, O., Glazer, E. Computational study of shock-wave interaction with multiple obstacles using immersed boundary method. *International Journal Numerical Methods in Engineering*, 89: 975-990 (2012).

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 5

Liste :

1. Haas, J.-F., Chinnayya, A., Hadjadj, A., Rambert, N., Counilh, D., Del Prete, E., Domergue, L. Influence of physical properties of dry aqueous foams on the mitigation of blast waves, *22th International Symposium on Military Aspects of Blast and Shock (MABS21)*, Bourges, France, November 4-9, 2012.
2. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Chinnayya, A. Effect of Reynolds number on flow instabilities of shock focusing over concave surfaces. *20th International Shock Interaction Symposium*, Stockholm, Sweden, 20-24 August 2012.
3. Chaudhuri, A., Hadjadj, A. Numerical simulation of transient flow in supersonic nozzle flows. *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, Nashville, Tennessee, 9-12 January, 2012.
4. Hadjadj, A., Yee, H.C., Sjogreen, B. LES of temporally evolving mixing layers by eighth-order filter scheme. *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, Nashville, Tennessee, 9-12 January, 2012.
5. Yee, H.C., Sjogreen, B., Hadjadj, A. Comparative study of high-order schemes for LES of temporal evolving mixing layers. *50th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, Nashville, Tennessee, 9-12 January, 2012.

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 3

Liste :

1. Georges-Picot, A., Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Palerm, S. LES of shock induced nozzle flow separation. *47th Symposium of Applied Aerodynamics: Wind Tunnel and computation, a joint strategy for flow prediction*, Paris, France, 26-28 March, 2012.
2. Georges-Picot, A., Hadjadj, A., Chaudhuri, A., Palerm, S., Unsteadiness of supersonic flows in convergent divergent nozzles. Journées AUM (Activités Universitaires en Mécanique), Association Française de Mécanique (AFM), Université de Rouen, 29-31 Août, 2012.
3. Ben Nasr, O., Hadjadj, A., Chaudhuri, A., Palerm, S., Computational study of wall-temperature effect in supersonic turbulent boundary layers. Journées AUM (Activités Universitaires en Mécanique), Association Française de Mécanique (AFM), Université de Rouen, 29-31 Août, 2012.

3. Projet : 1998053

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

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Nohad GRESH

Laboratoire : LPMS / FRE 2463 CNRS (Paris)

Heures.CPU produites en 2012 : 249 469

Publications de rang A

Nombre : 3

Liste :

1. Could an anisotropic molecular mechanics/dynamics potential account for sigma hole effects in the complexes of halogenated compounds ?
K. El Hage, J. P. Piquemal, Z. Hobaika, R. G. Maroun, N. Gresh, J. Comput. Chem., *soumis*

2. 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*.
3. Further refinements of next-generation force-fields: non empirical localization of off-centered-points in molecules'
Chaudret, R.; Gresh, N., Piquemal, J. P. *Can. J. Chem.*, *soumis*

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 1

Liste :

1. 2012, Juillet, Telluride, Colorado, Etats-Unis. Atelier international sur les interactions à N-corps.
Organisateurs : Kenneth Jordan, Jean-Philip Piquemal.
Titre : Development, Validation, Applications and Perspectives of Polarizable, Anisotropic Molecular Mechanics Potentials.

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 2012 : 6 224

Publications de rang A

Nombre : 2

Liste :

1. A. Bescond, J. Yon, T. Girasole, C. Jouen, C. Rozé and A. Coppalle. Theoretical and experimental study of light depolarization by nanoparticle fractal aggregates. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 2012, DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.10.011>.
2. K.F. Ren, C. Rozé and T. Girasole. Scattering and transversal divergence of an ellipsoidal particle by using Vectorial Complex Ray Model. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 113(18), 2419-2423, 2012, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.04.015>.
3. A. Bescond, J. Yon, T. Girasole, C. Jouen, C. Rozé and A. Coppalle. Theoretical and experimental study of light depolarization by nanoparticle fractal aggregates. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 1

Liste :

1. A. Bescond, J. Yon, T. Girasole, C. Jouen, C. Rozé and A. Coppalle. Theoretical and experimental study of light depolarization by nanoparticle fractal aggregates. 9th conference on Lasers and Interactions with Particles, LIP 2012, Rouen, 26-30 march 2012.

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 2

Liste :

1. A. Bescond, J. Yon, T. Girasole, C. Jouen, C. Rozé and A. Coppalle. Etude théorique et expérimentale de la dépolarisation de la lumière par des agrégats fractals de nanoparticules. 27ème congrès français sur les aérosols CFA 2012, Paris, 25-26 janvier 2012.

2. C. Rozé, T. Girasole, Y.J. Yuan and K.F. Ren. Application du modèle de Monte Carlo - Tracé de Rayons d'ondes à l'imagerie des sprays. 13ème Congrès Francophone de Techniques Laser, CFTL 2012, Rouen, 18-21 Septembre 2012.

5. **Projet : 2003008**

Intitulé : Suivi d'interf ces pour une méthode Level Set : pplic tion à l' tomis tion de spr y

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

Porteur : Alain BERLEMONT

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

Heures.CPU produites en 2012 : 455 520

Publications de rang A

Nombre : 2

Liste :

1. J. Cousin, A. Berlemont, T. Ménard, S. Grout Primary breakup simulation of a liquid jet discharged by a low-pressure compound nozzle Computers & Fluids, Volume 63, 30, 165–173,2012.
2. B. Duret, G. Luret, T. Menard, A. Berlemont, J. Reveillon and F.X. Demoulin, "DNS Analysis of turbulent mixing in two-phase flows", International Journal of Multiphase Flow Volume 40, 2012, Pages 93-105, 2012.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre :7

Liste :

1. E. Noël, A. Berlemont, J. Cousin, T. Ménard Application of the immersed boundary method to simulate flows inside and outside the nozzles, ICLASS 2012, 12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Heidelberg, Germany, September 2-6, 2012.
- 2.

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Grégory PINON

Laboratoire : LMPG EA 2255 (Le Havre)

Heures.CPU produites en 2012 : 30 928

Publications de rang A

Nombre : 3

Liste :

1. G. Pinon, P. Mycek, G. Germain, and E. Rivoalen. Numerical simulation of the wake of marine current turbines with particle method. *Renewable Energy* 46 (2012) pp:111-126
2. J-M. Cherfils, G. Pinon, and E. Rivoalen. JOSEPHINE : A parallel SPH code for free-surface flows. *Computer Physics Communications* 183 (2012) pp:1468-1480
3. Poupardin, G. Perret, G. Pinon, N. Bourneton, E. Rivoalen, and J. Brossard. Vortex kinematic around a submerged plate under water waves. Part I : Experimental analysis. *European Journal of Mechanics - B/ Fluids*, Volume 34, July–August 2012, Pages 47-55

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 5

Liste :

1. G. Pinon, G. Germain, P. Mycek, B. Gaurier, E. Rivoalen, JM. Cherfils, JV. Facq, T. Bacchetti. Hydroliennes et effets de sillages. 9ème édition des Journées Scientifiques et Techniques du CETMEF, Paris, France, 03 au 05 décembre 2012
2. P. Mycek, G. Pinon, B. Gaurier, G. Germain, E. Rivoalen. Développements numériques pour la modélisation du comportement et du sillage d'hydroliennes. 13ème Journées de l'hydrodynamique, Chatou, France, 21 au 23 novembre 2012. ([Lien : http://website.ec-nantes.fr/actesjh/images/13JH/Articles/Mycek_JH13.pdf](http://website.ec-nantes.fr/actesjh/images/13JH/Articles/Mycek_JH13.pdf))
3. P. Mycek, J-M. Cherfils, C. Loir, B. Gaurier, G. Germain, G. Pinon and E. Rivoalen. Numerical modelling of horizontal axis marine current turbine arrays. Journées de l'Association Universitaire de Mécanique, JAUM2012, Rouen, France, 29 au 31 août 2012.
4. J-M. Cherfils, G. Pinon, and E. Rivoalen. Simulation en méthode particulaire d'un écoulement de houle sur des ouvrages marins. XIIIèmes Journées Nationales Génie Côtier / Génie Civil, Cherbourg, France, 12-14 Juin 2012. (DOI:10.5150/jngcgc.2012.003-C) ([Lien : http://www.paralia.fr/jngcgc/12_03_cherfils.pdf](http://www.paralia.fr/jngcgc/12_03_cherfils.pdf))
5. P. Mycek, B. Gaurier, G. Germain, G. Pinon, E. Rivoalen. Étude numérique du comportement d'hydroliennes à axe horizontal : vers une modélisation d'un parc d'hydroliennes. XIIIèmes Journées Nationales Génie Côtier / Génie Civil, Cherbourg, France, 12-14 Juin 2012. (DOI:10.5150/jngcgc.2012.090-M) ([Lien : http://www.paralia.fr/jngcgc/12_90_mycek.pdf](http://www.paralia.fr/jngcgc/12_90_mycek.pdf))

7. Projet : 2004004**Intitulé : Influence du pH 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 2012 : 92 755

Publications de rang A

Nombre : 1

Liste :

1. "Structure of the mixed aggregates between a chiral lithium amide and phenyllithium or vinylolithium"
Oulyadi, H.; Fressigné, C.; Yuan, Y.; Maddaluno, J.; Harrison-Marchand, A
Organometallics 2012, 31, 4801–4809.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 2

Liste :

1. "Nucleophilic addition of alkyllithiums: enantioselective and catalytic ?"
Journées Grignard (100ème anniversaire du Prix Nobel de Victor Grignard)
CPE Lyon, 21-22 juin 2012
2. "In-depth analyses of dipole-dipole interactions: an efficient route to reach chiral nucleophiles for enantioselective additions."
Harrison-Marchand ; C. Fressigné ; H. Oulyadi; J. Maddaluno
ISHC XVIII Toulouse du 9 au 13 juillet 2012

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 2012 : 14 528

Publications de rang A

Nombre : 2

Liste :

1. « Dynamical susceptibility of weakly interacting ferromagnetic nanoclusters »
D. LEDUE, R. PATTE, H. KACHKACHI
J. Nanoscience and Nanotechnology 12, 1-8 (2012)
2. "Monte Carlo investigation of magnetization switching of interacting ferromagnetic nanoclusters"
D. BRINIS, D. LEDUE, A. LAGGOUN, R. PATTE
A paraître dans Sensor Letters.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 1

1. « Dipolar interaction effect on the magnetization switching of ferromagnetic nanocluster assemblies »
D. BRINIS, D. LEDUE, A. LAGGOUN, R. PATTE, communication par affiche à la conférence *International Workshop on Magnetic Materials and Nanomaterials (MMN'2012)*, 4-6/09/2012, Boumerdes, Algérie

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 2012 : 608

Publications de rang A

Nombre : 8

Liste :

1. Perato S.; Voisin-Chiret A.S.; Sopkova-de Oliveira Santos J.; Sebban M.; Legay R.; Oulyadi H.; Rault S. Synthesis of new linear poly(phenylpyridyl) chains. *Tetrahedron*, 2012, 68, 1910-1917.
2. Sopkova-de Oliveira Santos, J., Voisin-Chiret, A. S.; Burzicki, G., Sebaoun, L.; Sebban, M., Lohier, J.-F., Legay, R., Oulyadi, H.; Bureau, R. and Rault, S. Structural characterizations of oligopyridyl foldamers, α -helix mimetics. *J. Chem. Inf. Mod.*, 2012, 52, 429–439.
3. Dulin F., Halm-Lemeille M.-P., Lozano S., Lepailleur A., Sopkova-de Oliveira Santos J., Rault S., Bureau R. Interpretation of Honeybees contact toxicity associated to Acetylcholinesterase Inhibitors. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2012, 79, 13-21.
4. Voisin-Chiret A. S., Burzicki G., Perato S., De Giorgi M., Sopková-de Oliveira Santos J., Rault S. Aromatic garlands, as new foldamers, to mimic protein secondary structure. *Tetrahedron*, 2012, 68, 4381-4389.
5. Lecoutey C., Rochais C., Genest D., Butt-Gueulle S., Ballandonne C., Corvaisier S., Dulin F., Lepailleur A., Sopkova-de Oliveira Santos J. and Dallemagne P. Synthesis of dual AChE/5-HT4 receptor multi-target directed ligands. *Med. Chem. Commun.*, 2012, 3, 627-634.
6. Dubost E., Dumas N., Fossey C., Magnelli, R., Butt S., Ballandonne C., Caignard, D., Dulin F., Sopkova-de Oliveira Santos J., Millet P., Charnay Y., Rault S., Cailly, T., Fabis F. Synthesis and Structure-Affinity Relationships of Selective High-Affinity 5-HT4 Receptor Antagonists: Application to the Design of New Potential Single Photon Emission Computed Tomography (SPECT) Tracers. *J. Med. Chem.*, 2012, accepted.
7. Experimental characterization of an interaction between 26RFa and its receptor. Leprince, J.; Neveu, C.; Dulin, F.; Lefranc, B.; Santos, J. S. D.; Galas, L.; Calbrix, C.; Chuquet, J.; Vaudry, D.; Vaudry, H.; Bureau, R., *J. Pept. Sci.* 2012, 18, S104-S105.
8. Lohou E., Sopkova-de Oliveira Santos J., Schumann-Bard P., Boulouard M., Stiebing S., Rault S. and Collot V. New hypotheses for the binding mode of 4- and 7-substituted indazoles in the active site of neuronal nitric oxide synthase. *Bioorg. Med. Chem.*, 2012, accepted

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 4

Liste :

1. In silico highlights of varroacide compounds (AChE inhibitors) to protect the honeybee health. Dulin F.; Halm-Lemeille M.P.; Lozano S.; Lepailleur A.; Sopkova-de Oliveira Santos J.; Rault S.; Bureau R. 19th EuroQSAR, Vienne, 26-30 Août 2012.
2. New insights into the mode of action of AChE inhibitors pesticides in honeybees: molecular modeling studies. Dulin F.; Halm-Lemeille M.P.; Lozano S.; Lepailleur A.; Sopkova-de Oliveira Santos J.; Rault S.; Bureau R. 3rd Strasbourg Summer School on Chemoinformatics, Strasbourg, 25-29 Juin 2012.
3. Structural characteristic of oligopyridyl foldamers, α -helix mimetics. Sopkova-de Oliveira Santos J., Voisin-Chiret A. S., Fogha J., Perato S., Sebban M., Bureau R., Oulyadi H. and Rault S. EMBO Workshop - Advances in Protein-Protein Interaction Analysis & Modulation, Roscoff, 6-9 juin 2012.
4. Analysis of mcl-1 and bh3-only proteins: A model for drugs discovery. Fogha J., Sopkova-de Oliveira Santos J., Perato S., Voisin-Chiret A. S., Rault S., Bureau R. 3rd Strasbourg Summer School on Chemoinformatics, Strasbourg, 25-29 Juin 2012.

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 1

Liste :

1. Discovery of selective inhibitors for mcl1. Fogha J., Sopkova-de Oliveira Santos J., Perato S., Voisin-Chiret A. S. Rault S.: Journée des Jeunes Chercheurs, Paris, 2-3 Février 2012

10. Projet : 2005010**Intitulé : Étude théorique de ré ctions chimiques interven nt d ns l synthèse de composés org nofluorés et org nisoufrés**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Eric HENON

Laboratoire : UMR 6519 (Reims)

Heures.CPU produites en 2012 : 524

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 2

Liste :

1. Multicube : De la fonction d'onde aux charges partielles
T. Hashka, C. Etchebest, E. Henon, L. Martiny and M. Dauchez
13ème rencontre des chimistes théoriciens francophones, Marseille 1er-5 juillet 2012
2. Oxydation des alcools catalysées par le chrome : Etude théorique
H. Khartabil, A. Riahi, J. Muzart et E. Henon
13ème rencontre des chimistes théoriciens francophones, Marseille 1er-5 juillet 2012

Thèse

« Modélisation Moléculaire de matrikines et protéines matricielles : approches théoriques », T. Haska, 21 décembre 2012, Université de Reims Champagne-Ardenne.

11. Projet : 2005013**Intitulé : Étude théorique de l ré ctivité d'hétérocycles rom tiques en cyclo ddition**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Isabelle CHATAIGNER

Laboratoire : LFAOC - IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites en 2012 : 6 590

Publications de rang A

Nombre : 3

Liste :

1. Dentel, H.; Chataigner, I.; Lohier, J.-F.; Gulea, M. Tetrahedron 2012, 68, 2326-2335.
" Asymmetric Diastereoselective thia-Hetero-Diels–Alder Reactions of Dithioesters."
2. Aubin, Y.; Colacino E.; Bouchouk D.; Chataigner I.; del Mar Sánchez M.; Martinez J.; Dewynter, G. New J. Chem. 2012, 36, 1560-1563.
"Unprecedented Directed Oxidative Cross-Coupling of Sulfahydantoinis with Aldehydes via a Radical Sulfonate-Sulfinate Conversion."
3. Lee S.; Diab S.; Queval P.; Sebban M.; Chataigner I.; Piettre S. R. accepté pour publication dans Chem. Eur. J.
"Aromatic Carbon-Carbon Double Bonds as Dipolarophiles: Facile Transformation of Uncomplexed Benzene Derivatives and Other Aromatic Rings into Functionalized Polycycles."

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 1

Liste :

1. 8ème forum de technologie des hautes pressions, Enval (France), 22-26 octobre 2012, communication orale
" Organic reactions under high pressure. Facile dearomatization of simple arenes."

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 2012 : 1000

Thèse en cours

1. «Compréhension du rôle du Si, Ni et Mo dans les transformations de phase des aciers ferritiques Fe - C - Cr(5%-25%)» - Jonathan Emo, octobre 2011 - 2014.

Stage

1. "Simulation Monte Carlo de la précipitation accélérée du Cr dans des alliages Fe-Cr irradiés aux neutrons - comparaison à l'expérience" - Manon Bonvalet, Stage de master 2, février - juin 2012.

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 2012 : 2 888 999

Publications de rang A

Nombre : 5

Liste :

1. C. Merlin, P. Domingo, L. Vervisch, "Large Eddy Simulation of turbulent flames in a Trapped Vortex Combustor (TVC) - A flamelet presumed-pdf closure preserving laminar flame speed TVC", C. R. Mécanique 340 (2012) 917-932
2. C. Merlin, P. Domingo, L. Vervisch, "Immersed boundaries in Large Eddy Simulation of compressible flows", Flow Turbulence and Combustion, DOI: 10.1007/s10494-012-9421-0
3. N. Enjalbert, P. Domingo, L. Vervisch, "A turbulent chemistry tabulation approach for the LES of non-premixed combustion based on the description of the mixing history", Combustion and Flames: 159(1), pp. 336-352.
4. G. Ribert, K. Wang, L. Vervisch, "A multi-zone self-similar chemistry tabulation with application to auto-ignition including cool-flames effects", Fuel(91):87-92 (2012)
5. G. Ribert, D. Taieb, X. Petit, G. Lartigue, P. Domingo, "Simulation of supercritical flows in rocket-motor engines: application to cooling channel and injection system", Adv. Aerospace Sci., Prog. Propul. Phys. (4)

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 8

Liste :

1. S. Nambully, P. Domingo, V. Moureau, L. Vervisch, "Modeling differential diffusion in Large Eddy Simulation of a bluff body stabilized premixed weakly-turbulent flame". Eleventh International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Non-Premixed Flames, Darmstadt, 26-28 July.

2. Nambully S., Domingo P., Moureau V., Vervisch L., "Modeling differential diffusion in large-eddy simulation of nonpremixed flames". 7th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, THMT, Palermo, Sicily, Italy 24-27 Sept.
3. Vervisch L. (2012) "Combustion, flames and burner design: Challenges and computing tools", COMBURA'12, Combustion Research and Application, Maastricht, The Netherlands 3-4 Oct.
4. X. Petit, G. Ribert, P. Domingo, "Large Eddy Simulation of supercritical fluid injection", 9th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modeling and Measurements, ETMM9, June 6-8, Thessaloniki, Greece.
5. X. Petit, G. Ribert, P. Domingo, "Large Eddy Simulation of supercritical fluid injection", 50th AIAA ASM Conference, Nashville USA, AIAA 2012-1268
6. S. Nambully, P. Domingo, V. Moureau, L. Vervisch, "Modeling differential diffusion in Large-Eddy Simulation of a bluff body stabilized premixed weakly-turbulent flame", 7th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, THMT, Palermo, Sicily, Italy.
7. Vervisch L. "Challenges and progress in turbulent combustion modeling", 7th International Symposium on Turbulence, Heat and Mass Transfer, THMT, Palermo, Sicily, Italy 24-27 Sept.
8. Vervisch, L. Filtering and SGS modeling: "Some unanswered questions", Eleventh International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Non-Premixed Flames, Darmstadt, 26-28 July.

14. Projet : 2006007**Intitulé : Cinétique de précipitation dans les alliages Al-r-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 2012 : 33 181

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 2

Liste :

1. H. Zapolsky, M. Certain « Pattern Formation in Nature », invited lecture , Ising Lectures, Lviv, Ukraine, 2012.
2. H. Zapolsky, M. Certain, R. Patte « ADF modeling of Fcc–Bcc transition », ESOMAT 2012, St. Petersburg, Russia, 2012.

Communication dans des congrès nationaux

Nombre : 1

Liste :

1. Communication par affiche lors de la journée «Rencontre Science & Innovation 2012 de l'Institut Carnot ESP», Saint Etienne du Rouvray, 3 Juillet 2012.

15. Projet : 2006013**Intitulé : Etude par DFT du mécanisme de la cyclisation 2:1 d'Alcynes et d'Alcènes cyclisée 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 2012 : 94 233

Publications de rang A

Nombre : 3

Liste :

1. Efficient Nazarov Cyclization/Wagner-Meerwein Rearrangement Terminated by a Cu(II)-Promoted Oxidation: Synthesis of 4-Alkylidene Cyclopentenones. Leboeuf, D.; Theiste, E.; Gandon, V.; Daifuku, S. L.; Neidig, M. L.; Frontier, A. J. Chem. Eur. J. 2012, 18, accepté.
2. Experimental and Theoretical Studies on the Nazarov Cyclization/Wagner-Meerwein Rearrangement Sequence. Leboeuf, D.; Gandon, V.; Ciesielski, J.; Frontier, A. J. J. Am. Chem. Soc. 2012, 134, 6296-6308.
3. Synthesis of Aminopyridines and Aminopyridones by Cobalt-Catalyzed [2+2+2] Cycloadditions Involving Yne-Ynamides: Scope, Limitations, and Mechanistic Insight. Garcia, P.; Evanno, Y.; George, P.; Sevrin, M.; Ricci, G.; Malacria, M.; Aubert, C.; Gandon, V. Chem. Eur. J. 2012, 18, 4337-4344.

16. 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 2012 : 65 705

Publications de rang A

Nombre : 6

Liste :

1. Molecular structures and thermodynamic properties of twelve gaseous cesium-containing species of nuclear safety interest: Cs₂, CsH, CsO, Cs₂O, CsX, and Cs₂X₂ (X = OH, Cl, Br, and I)
Journal of Nuclear Materials, 420, 452-462, 2012
BADAWI M., XERRI B., CANNEAUX S., CANTREL L., LOUIS F.
2. Thermochemical Data and Additivity Group Values for Ten Species of o-Xylene Low-Temperature Oxidation Mechanism
Journal of Physical Chemistry A, 116, 592-610, 2012.
CANNEAUX S., VANDEPUTTE R., HAMMAEACHER C., LOUIS F., RIBAUCCOUR M.
3. A Theoretical Study of H-Abstraction Reactions from CH₃Cl and CH₃Br Molecules by ClO and BrO Radicals
Journal of Physical Chemistry A, 116, 4396-4408, 2012.
CANNEAUX S., HAMMAEACHER C., COURTS T., LOUIS F., RIBAUCCOUR M.
4. Ab initio calculations and iodine transport modelling in the reactor coolant system in case of severe accident
Computational and Theoretical Chemistry, special issue "Chemical reactivity, from accurate theories to simple models, in honor of Professor Jean-Claude Rayez", 990, 194-208, 2012.
XERRI B., CANNEAUX S., LOUIS F., TRINCAL J., COUSIN F., BADAWI M., CANTREL L.
5. Detailed modeling of the atmospheric degradation mechanism of very-short lived brominated species
Atmospheric Environment, 59, 514-532, 2012.
KRYSZTOFIK G., CATOIRE V., POULET G., MARECAL V., PIRRE M., LOUIS F., CANNEAUX S., JOSSE B.
6. An extensive methodological theoretical study of the kinetics of the benzylperoxy radical isomerization
Computational and Theoretical Chemistry, 1002, 64-70, 2012.
CANNEAUX S., HAMMAEACHER C., RIBAUCCOUR M.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 4

Liste :

1. Atmospheric degradation of two short-lived brominated hydrocarbons (CHBr_3 and CH_2Br_2)
22nd International Symposium on Gas Kinetics, Boulder (Colorado, USA), 18-22 Juin 2012
KRYSZTOFIK G., POULET G., MARECAL V., PIRRE M., LOUIS F., CANNEAUX S., CATOIRE V.
2. Detailed modeling of the atmospheric degradation mechanism of brominated very-short lived species (VSLs) Quadriennial Ozone Symposium, Toronto (Canada), 27-31 Août 2012
KRYSZTOFIK G., CATOIRE V., MARECAL V., PIRRE M., LOUIS F., CANNEAUX S., POULET G.
3. Thermochemistry of $\text{Cs}_x\text{B}_y\text{O}_z$ type of compounds, Theory and Applications of Computational Chemistry, Pavia (Italie), 2-7 Septembre 2012 VANDEPUTTE R., LOUIS F., CANNEAUX S., CANTREL L.
4. Reactivity of iodoalkanes, 5th International Symposium on Non-equilibrium Processes, Plasma, Combustion, and Atmospheric Phenomena (NEPCAP), Sochi (Russie), 1-6 Octobre 2012
ČERNUŠÁK I., LOUIS F., MEČIAROVÁ K., CANNEAUX S., FEDERIČ J.

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 1

Liste :

1. VANDEPUTTE R., LOUIS F., CANNEAUX S., CANTREL L. Thermochimie des composés de type $\text{Cs}_x\text{B}_y\text{O}_z$, 13ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones (RCTF), Marseille, 1-5 Juillet 2012

17. 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 2012 : 12 161

Publications de rang A

Nombre : 3

Liste :

1. Sophie Chausson, Jean-Michel Rueff, Marie Bernadette Lepetit, Olivier Perez, Richard Retoux, Charles Simon, Loïc Le Pluart et Paul-Alain Jaffrès, Eur. J. Inorg. Chem. 2012, 2193 (2012), "Copper(II) n-alkylphosphonates used as nanofiller : single crystal, powder structure studies and influence of the alkyl chain length on the magnetic properties."
2. Marie-Bernadette Lepetit, Bernard Mercey et Charles Simon, Phys. Rev. Letters 108, 087202 (2012), "Understanding interface effects in perovskites thin films."
3. Julien Soret et Marie-Bernadette Lepetit, Phys. Rev B 85, 165145 (2012), "Electronic structure of the $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ compound from ab initio local interactions."

18. 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 2012 : 5 673

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

Nombre : 1

Liste :

1. Magnetic properties of Exchange-spring DyFe₂/YFe₂ Superlattices by Monte Carlo Simulations
P.E. Berche, S. Djedai, E. Talbot, MRS Online Proceedings Library, 1471 (2012), mrs12-1471-yy02-04 doi: 10.1557/opl.2012.930.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 1

Liste :

1. Magnetic Properties of Exchange-spring DyFe₂/YFe₂ Superlattices by Monte Carlo Simulations
P.E. Berche, S. Djedai, Material Research Society – Spring Meeting, San Francisco (09/13-04-2012).

19. Projet : 2008005**Intitulé : Etude du processus de grégation 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 2012 : 536 175

Publications de rang A

Nombre : 4

Liste :

1. Detailed insight into the hydrogen bonding interactions in acetone–methanol mixtures. A molecular dynamics simulation and Voronoi polyhedra analysis study, A. Idrissi, K. Polok, W. Gadomski, I. Vyalov, A. Agapov, M. Kiselev, M. Barj, P. Jedlovsky, Phys. Chem. Chem. Phys., Année : 2012, Volume : 14, Pages : 5979 – 5987.
2. 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.
3. Heterogeneity of the local structure in Sub- and supercritical ammonia: a voronoi polyhedra analysis
A. Idrissi, I. Vyalov, M. Kiselev, M.V. Fedorov, P. Jedlovsky, J. Phys. Chem. B, Année : 2011, Volume : 115, Pages : 9646 – 9652.
4. Assessment of the potential models of acetone/CO₂ and ethanol/CO₂ mixtures by computer simulation and thermodynamic integration in liquid and supercritical states, A. Idrissi, I. Vyalov, M. Kiselev, P. Jedlovsky, Phys. Chem. Chem. Phys., Année : 2011, Volume : 13, Pages : 16272 – 16281

Thèse d'Ivan Vyalov soutenue le 9/12/2011

Titre : Simulation de dynamique moléculaire de la dissolution de la cellulose dans les fluides supercritiques et les mélanges cosolvants/fluides supercritiques.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 12

Liste :

1. Dissolution of nanocrystal polymorphs of cellulose using supercritical fluids: Molecular dynamics analysis. A. Idrissi, M. Kiselev, and I. Vyalov. Kinetic and mechanisms of crystallization, 25-28 September, Ivanovo, Russia (2012)
2. Towards screening of polymorphism at supercritical parameters of states. M. Kiselev, I. Khodov, M. Nikiforov, R. Oparin, A. Frolov, A. Agapov and A. Idrissi. Kinetic and mechanisms of crystallization, 25-28 September, Ivanovo, Russia (2012)

3. Solvation of conformationally flexible molecules : Experiment and computer simulations. M. Kiselev , R. Oparin, A. Frolov, and A. Idrissi 11th Journées de Chimie Théorique et Computationnelle, 18-20 November, Oran, Algérie (2012)
4. Solvation of 3-hydroxyflavon in organic solvents: Study using ab initio molecular dynamics, Ari. P. Seitsonen, A. Mezzetti, M. Barj and A. Idrissi, 11th Journées de Chimie Théorique et Computationnelle , 18-20 November, Oran, Algérie (2012)
5. Detailed insight to the locale structure in supercritical fluids : A molecular dynamics Simulation, A. Idrissi , M. Kiselev, 11th Journées de Chimie Théorique et Computationnelle, 18-20 Novembre, Oran, Algérie (2012)
6. The conformation manifolds of drug-like molecules as studied in combination of experimental and computational techniques, M. Kiselev, I. Khodov, M. Nikiforov, R. Oparin, A. Frolov, A. Agapov and A. Idrissi, 30th EMLG/JMLG Annual Meeting : Molecular association in Fluid Phase and Fluid interfaces, 5-9 Septembre, Eger, Hungary (2012)
7. Solvation of flavonoids in organic solvents : Study using ab initio molecular dynamics, Ari. P. Seitsonen, A. Mezzetti, M. Barj and A. Idrissi, 30th EMLG/JMLG Annual Meeting : Molecular association in Fluid Phase and Fluid interfaces, 5-9 Septembre, Eger, Hungary (2012)
8. Modelling solvation of nanocrystal polymorph of cellulose in supercritical CO₂ and its mixtures with ethanol and acetone, Vyalov I., Idrissi A., Ekimova M., Kiselev M., "Supercritical fluids (SCF): fundamentals, technologies, innovations", 4 - 7 July 2011, Listvyanka, lake Baykal.
9. Assessment of the potential models of acetone/CO₂ and ethanol mixtures by computer simulation and thermodynamic integration, Idrissi A., Vyalov I., Kiselev M., Jedlovsky P. "Supercritical fluids (SCF): fundamentals, technologies, innovations", 4 - 7 July 2011, Listvyanka, lake Baykal.
10. Modelling solvation cellobiose in supercritical CO₂ and its mixtures with ethanol and acetone. Vyalov I., Idrissi A., Kiselev M., 29th EMLG/JMLG Annual Meeting : New outlook on molecular liquids from short scale to long scale dynamics, 11-15 Septembre, Warsaw, Poland (2011)
11. A simulation study of the optical Kerr effect in methanol acetone mixtures, K. Polok, W. Gadomski, A. Idrissi, 29th EMLG/JMLG Annual Meeting : New outlook on molecular liquids from short scale to long scale dynamics, 11-15 Septembre, Warsaw, Poland (2011)
12. Solvation in aqueous solution, A. Idrissi, Symposium on Structural Systems Biology, Faculty of Science, University of South Bohemia in Ceske Buejovce, Czech Republic, November 29th-December 2nd, 2011.

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 3

Liste :

1. The paracetamol particles formation by Rapid expansion of a supercritical solution : A molecular dynamics analysis. A. Agapov., T. Tassaing, Idrissi A. "Première Journées Supercritiques JSC2012", 14-16 mars 2012, Albi, France.
2. Investigation of the local structure in sub and supercritical water: A molecular dynamics analysis L. Fatima., T. Tassaing, Idrissi A., "Première Journées Supercritiques JSC2012", 14 - 16 /03 2012, Albi, France.
3. Dissolution of nanocrystal polymorphs of cellulose in supercritical mixture of CO₂ and Co-solvent: A molecular dynamics analysis, Vyalov I., Idrissi A., Kiselev M., "Première Journées Supercritiques JSC2012" 14 - 16 mars 2012, Albi, France.

20. 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 2012 : 782 563

Publications de rang A

Nombre : 6

Liste :

1. R.A. Rego, Y. D'Angelo, G. Joulin, On nonlinear model equations for the response of premixed flames to acoustic like accelerations, accepted for publication in Combustion Theory & Modelling, july 2012. doi : 10.1080/13647830.2012.721900
2. M. Sjostrand-Cuif, Y. D'Angelo & E. Albin, No-slip Wall Acoustic Boundary Condition treatment in the Incompressible Limit, submitted to Computers and Fluids, august 2012.
3. E. Albin, H. Nawroth, S. Göke, Y. D'Angelo, C.O Paschereit, Experimental investigation of burning velocities of ultra-wet methane-air-steam mixtures, Fuel Processing Technology, august 2012, <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuproc.2012.06.027>
4. E. Albin & Y. D'Angelo, Assessment of the Evolution Equation Modelling approach for three dimensional expanding wrinkled premixed flames, Combustion & Flame, Volume 159, Issue 5, May 2012, Pages 1932–1948, <http://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2011.12.019>
5. J. Dombard, B. Leveugle, L. Selle, J. Reveillon, T. Poinot & Y. D'Angelo, Modelling heat transfer in diluted two-phase flows using the Mesoscopic Eulerian Formalism, International Journal of Heat and Mass Transfer, Volume 55, Issues 5–6, February 2012, Pages 1486–1495, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.10.050>
6. E. Albin, Y. D'Angelo & L. Vervisch, Flow streamline based Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions for transverse and corner outflows, Computers & Fluids, Volume 51, Issue 1, 15 December 2011, Pages 115–126, <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2011.08.005>

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 5

Liste :

1. K. Truffin, B. Leveugle, G. Bruneaux, Y. D'Angelo & J. Réveillon, Modelling flame/wall interaction effect on thermal transfer in turbulent flows, Proceedings of the 7th International Symposium on Turbulence, Heat & Mass Transfer, Palermo, september 2012. Submitted to Flow, Turbulence & Combustion, june 2012.
2. C. Gruselle, Y. D'Angelo, V. Moureau, Numerical simulation of turbulent stratified flame propagation in a closed vessel, Proceedings of the 7th International Symposium on Turbulence, Heat & Mass Transfer, Palermo, september 2012. Submitted to Flow, Turbulence & Combustion. june 2012.
3. C. Gruselle, V. Moureau, G. Lartigue, Y. D'Angelo & F. Ravet, Numerical simulation of the propagation of a stratified turbulent flame in a closed vessel, Proc of LES4ICE, Ruel-Malmaison, France, november 2012. Submitted to Oil & Gas Science and Technology, may 2012.
4. E. Albin, S. Göke, CO Paschereit, Y. D'Angelo, Laminar burning velocity of hydrogen- methane-air-steam mixtures. Proceedings of the 11th International Conference on Combustion and Energy Utilization (ICCEU), Coimbra, Portugal, may 2012.
5. C. Gruselle, V. Moureau, Y. D'Angelo "Numerical simulation of turbulent stratified flame propagation in a closed vessel, THMT 2012, Palerme.

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 1

Liste :

1. C. Gruselle, Y. D'Angelo, V. Moureau, "Etude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration, CRCT 2012, Toulouse.

21. Projet : 2009002**Intitulé : Région lis tion des ch ngements clim tiques**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Thierry CASTEL

Laboratoire : CRC - UMR 5210 (Dijon)

Heures.CPU produites en 2012 : 27 787

Publications de rang A

Nombre : 1 (publiée) 1 (soumise)

Liste :

1. Xu, Y., Castel, T., Richard, Y., Cuccia, C. and Bois, B., 2012. Burgundy Regional Climate Change and its Potential Impact on Grapevines, Clim. Dyn., October 2012, Volume 39, [Issue 7-8](#), pp 1613-1626
2. Marteau R., Castel T., Richard Y., and Klein G., Does WRF model is relevant to high-resolution rainfall downscaling over Burgundy ?, Clim. Dyn. Submitted

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 3

Liste :

1. Cédric CUCCIA, Benjamin BOIS, Yves RICHARD, Amber PARKER, Yiwen XU and Thierry CASTEL, How climate change will impact terroir potential in the Burgundy vineyards, XI International Congress Terroir, Dijon France, 25-29 June 2012, p31-34.
2. RICHARD , Pascal ROUCOU, Julien CRETAT, Thierry CASTEL and Benjamin POHL, MODÈLES DE CLIMATS RÉGIONAUX : POTENTIELS ET LIMITES, [AIC 2012 : 25ème colloque de l'Association Internationale de Climatologie](#), 5-8 sept. 2012 Grenoble (France), p667-672.
3. Boulard, D. and Castel. T., Projecting the Regional Climate Change for East-Central France: potential impacts on Burgundy's Beech forests, INTERNATIONAL CONFERENCE Tackling climate change: the contribution of forest scientific knowledge, 21 - 24 May, 2012, Tours (France).

22. Projet : 2009005**Intitulé : Modélis tion des propriétés optiques des o jets 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 2012 : 10 462

Publications de rang A

Nombre : 2

Liste :

1. K.F. Ren, C. Rozé and T. Girasole. Scattering and transversal divergence of an ellipsoidal particle by using Vectorial Complex Ray Model. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 113(18), 2419-2423, 2012.

2. K.F. Ren, C. Rozé and T. Girasole. Scattering and transversal divergence of an ellipsoidal particle by using Vectorial Complex Ray Model. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 113(18), 2419-2423, 2012, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jqsrt.2012.04.015>

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 1

Liste :

1. C. Rozé, T. Girasole, Y.J. Yuan and K.F. Ren. Application du modèle de Monte Carlo - Tracé de Rayons d'ondes à l'imagerie des sprays. 13ème Congrès Francophone de Techniques Laser, CFTL 2012, Rouen, 18-21 Septembre 2012.

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Yann ROUX

Laboratoire : K-EPSILON (Sophia Antipolis)

Heures.CPU produites en 2012 : 30 568

Thèse CIFRE

Thèse de doctorat de Mathieu Durand, soutenue le 30 Octobre 2012

«Interaction fluide-structure souple et légère, application aux voiliers», Ecole Centrale de Nantes

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

Nombre : 1

Liste :

1. Augier B., Bot P., Hauville F., Durand M., Experimental Validation of Unsteady Models for Fluid Structure Interaction : Application to Yacht Sails and Rigs, Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics, 2012, Vol. 101, pp. 53-66, DOI 10.1016/j.jweia.2011.11.006

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

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

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : LRPMN (Damigny)

Heures.CPU produites en 2012 : 247 248

Publications de rang A

Nombre : 1

Liste :

1. Effect of doping on screw threading dislocations in AlN and their role as conductive nanowires, J. Kioseoglou, E. Kalesaki, I. Belabbas, J. Chen, G. Nouet, Ph. Komninou, and Th. Karakostas, Phys.stat.sol. (c) 9, 484-487 (2012).

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 1

Liste :

1. J. Kioseoglou, E. Kalesaki, I. Belabbas, J. Chen, G. Nouet, Ph. Komninou, Th. Karakostas, Role of Screw Threading Dislocations as Conductive One-Dimensional Nanostructures in AlN, International conference on Extended Defects in Semiconductors (EDS2012). Thessaloniki, Greece, 24-29 June 2012.

25. Projet : 2010006**Intitulé : Coupl ge déch nge d ns les icouches ferrom gnétique/ ntiferrom gnétique**

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

Porteur : Denis LEDUE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2012 : 971

Publications de rang A

Nombre : 2

Liste :

1. "Monte Carlo investigation of the interfacial roughness and temperature effects in coupled ferromagnetic/antiferromagnetic bilayers"
A. MAITRE, D. LEDUE, R. PATTE
J. Magn. Magn. Mater. 324, 403 (2012)
2. "Temperature effect in polycrystalline exchange-biased bilayers : A Monte Carlo study"
A. MAITRE, D. LEDUE, F. BARBE, R. PATTE
J. Appl. Phys. 111, 07D105 (2012)

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 2

Liste :

1. « Dipolar interaction effect on the magnetization switching of ferromagnetic nanocluster assemblies »
D. BRINIS, D. LEDUE, A. LAGOON, R. PATTE
International Workshop on Magnetic Materials and Nanomaterials (MMN'2012), 4-6/09/2012, Boumerdes, Algérie (conférence invitée)
2. "Exchange biased bilayers : numerical investigation of the temperature and microstructure effects"
D. LEDUE, A. MAITRE, F. BARBE, R. PATTE
Workshop on surface/interface effects in nanomagnets, 25-26/10/2012, Porto

26. Projet : 2010010**Intitulé : Topologie qu ntique**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites en 2012 : 36 060

Publications de rang A

Nombre : 2 dont 1 soumise

Liste :

1. Condensed descriptors for reactivity: A methodological study, Chemical Physics Letters, Volume 527, 27 Février 2012, Pages 67-72, François Zielinski, Vincent Tognetti, Laurent Joubert.
2. A theoretical study on the gas-phase protonation of pyridine and phosphinine derivatives
Journal of Molecular Modeling, soumise (2012), François Zielinski, Vincent Tognetti, Laurent Joubert.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 2

Liste :

1. Summer Talks in Santiago III : Recent Developments in Quantum Chemistry, 9-13 Janvier 2012, Santiago, Chili. Laurent Joubert, Vincent Tognetti et François Zielinski, « Condensed conceptual DFT descriptors for reactivity ». (comm. orale)
2. Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC 2012). 2-7 Septembre 2012, Pavie, Italie. Laurent Joubert, Vincent Tognetti et François Zielinski. « Condensed descriptors for reactivity: a methodological study » (poster).

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 1

Liste :

1. 13ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones
1-5 Juillet 2012, Marseille, France.
Laurent Joubert, Vincent Tognetti et François Zielinski.
« Descripteurs condensés de réactivité : une étude méthodologique » (comm. orale).

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Catherine FRESSIGNE

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites en 2012 : 9 013

Publications de rang A

Nombre : 2

Liste :

1. "Influence of the acetylenic substituent on the intramolecular carbolithiation of alkynes"
Anne-Lise Girard, Rudy Lhermet, Catherine Fressigné, Muriel Durandetti, Jacques Maddaluno.
Eur. J. Org. Chem. 2012, 2895-2905
cover picture : DOI : 10.1002/ejoc.201290036
2. "Influence of the acetylenic substituent on the intramolecular carbolithiation of alkynes: a DFT theoretical study"
Fressigné, C.; Lhermet, R.; Girard, A.-L.; Durandetti, M.; Maddaluno, J.
J. Org. Chem., soumis pour publication.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 2

Liste :

1. "Heterocyclisation by intramolecular anti-carbolithiation of chloroalkynes"
Muriel Durandetti, Rudy Lhermet, Catherine Fressigné, Jacques Maddaluno.
Communication par poster présentée par M. Durandetti à l'ICCOS 2012 (du 15 au 20 septembre 2012 à Moscou, Russie).
2. « Hétérocyclisation par carbométallation intramoléculaire d'alcynes »
Journées de Chimie Organique de la Société Chimique de Tunisie
Hammamet (Tunisie), 12-14 septembre 2012

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Pierre-Michel GUILCHER

Laboratoire : Hydrocéan (Nantes)

Heures.CPU produites en 2012 : 170 113

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

Nombre : 1

Liste :

1. HPC 2012 – La Recherche – Les supercalculateurs relèvent le défi. Supplément novembre 2012.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 5

Liste :

1. P.M. Guilcher, L. Brosset, N. Couty, D. Le Touzé, Simulations of breaking wave impacts on a rigid wall at two different scales with a two phase fluid compressible SPH model, Proceedings of the 22nd (2012) International Offshore and Polar Engineering Conference (ISOPE-2012), Rhodes, Greece, June 17–22
2. M. De Lefte, P.-M. Guilcher, J. Candelier, D. Le Touzé, G. Oger, N. Grenier: SPH for naval applications, 2nd International Conference on Violent Flows (VF-2012), Nantes, France, 25th-27th september, 2012.
3. D. Le Touzé, D. A. Barcarolo, M. Kehuel, N. Quinlan, L. Lobovsky, M. Basa, J.-C. Marongiu, F. Leboeuf, J. Caro, A. Colagrossi, S. Marrone, M. de Lefte, P.-M. Guilcher, Investigation of SPH variants for violent flows simulations within the NextMuSE initiative, 2nd International Conference on Violent Flows (VF-2012), Nantes, France, 25th-27th september, 2012
4. D. Guibert, M. de Lefte, G. Oger, J.-G. Piccinalli, Efficient parallelisation of 3D SPH schemes, 7th International SPHERIC Workshop, 28-30 May 2012, Prato, Italy.
5. D. Le Touzé, D. A. Barcarolo, M. Kehuel, N. Quinlan, L. Lobovsky, M. Basa, J.-C. Marongiu, F. Leboeuf, J. Caro, A. Colagrossi, S. Marrone, M. de Lefte, P.-M. Guilcher, SPH benchmarking: a comparison of SPH variants on selected test cases within the NextMuSE initiative, 7th SPHERIC Workshop, 28-30 May 2012, Prato, Italy.

29. Projet : 2011003**Intitulé : Approche théorique de nouveaux fluorophores pour les sciences de la vie**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites en 2012 : 64 725

Publications de rang A

Nombre : 1

Liste :

1. Electronic Excitations in Epicocconone Analogues: TDDFT Methodological Assessment Guided by Experiment
Journal of Physical Chemistry A, Volume 116 (2012), Pages 8634-8643.
Olga A. Syzgantseva, Vincent Tognetti, Laurent Joubert, Agathe Boulangé, Philippe A. Peixoto, Stéphane Leleu et Xavier Franck.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 1

Liste :

1. Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC 2012).
2-7 Septembre 2012, Pavie, Italie.
Olga A. Syzgantseva, Vincent Tognetti, Laurent Joubert, Agathe Boulangé et Xavier Franck.
« Simulation of Absorption and Emission UV/VIS Spectra of Novel Organic Fluorophores » (poster).

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 1

Liste :

1. 13ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones
1-5 Juillet 2012, Marseille, France.
Olga A. Syzgantseva, Vincent Tognetti, Laurent Joubert, Agathe Boulangé et Xavier Franck.
« Simulation de spectres d'absorption et d'émission UV/VIS pour de nouveaux fluorophores organiques » (poster).

30. 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 2012 : 90 731

Publications de rang A : en cours de soumission au Journal of Molecular Modeling

Nombre : 1

Liste :

1. DFT Study of the Al₂Cl₆-catalyzed Friedel-Crafts Acylation of Phenyl Aromatic Compounds
Sigismund Teunis Alexander George Melissen^{1,2}, Vincent Tognetti¹, Georges Dupas¹, Julien Jouanneau², Guillaume Lé², Laurent Joubert*¹
¹IRCOF, COBRA, CNRS UMR 6014, and FR 3038, University and INSA of Rouen, 76821 Mont St. Aignan Cedex, France
²Arkema CERDATO laboratories, Route du Rilsan, 27470 Serquigny, France

Abstract

The reaction pathways of several Friedel-Crafts acylations involving phenyl aromatic compounds were studied using Density Functional Theory. The reactions are related to the Friedel-Crafts polycondensation of Poly Aryl Ether Ketones.

In particular, the acylation of benzene with benzoyl chloride to form benzophenone and variations to this reaction were investigated. The acylation of benzene by one molecule of terephthaloyl chloride and isophthaloyl chloride as well as the acylations of the m-, o-, and p- positions of diphenyl ether with one molecule of benzoyl chloride were studied. Adding an additional acid chloride group to the electrophiles appears to have little influence on the reaction pathway. Upon changing the nucleophile to diphenyl ether, the differences in reactivity follow the trends predicted on the basis of the o-, p-directing effects of the ether group. The deprotonation step that restores aromaticity varies widely per reaction.

31. 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 2012 : 1 425

Publications de rang A

Nombre : 4

Liste :

1. Coupled structural and magnetic properties of ferric fluoride nanostructures: part II, a Monte-Carlo Heisenberg study B.Fongang, I.Labayé, J.-M.Greeneche, S.Zekeng, F.Calvayrac J. Magn. Magn. Mater. 324(2012)3646–3651
2. An ab initio molecular dynamics study of ionic conductivity in hexagonal lithium lanthanum titanate oxide La_{0.5}Li_{0.5}TiO₃ B. Sitamtze Youmbi · Serge Zékeng Samuel Domngang · Florent Calvayrac Alain Bulou Ionics (2012) 18:371–377
3. The Journal of Physical Chemistry Manuscript ID: jp-2012-099126 Title: "Lattice Dynamics of β -SnWO₄ : Experimental and ab-initio Calculations" Wojcik, Justyna; Calvayrac, Florent; Goutenoire, Francois; Mhadhbi, Noureddine; Corbel, Gwenaël; Lacorre, Philippe; Bulou, Alain, accepté
4. Infrared, polarized Raman and ab initio calculations of the vibrational spectra of [N(C₃H₇)₄]₂Cu₂Cl₆ crystals Abderrazek Oueslati Alain Bulou, Florent Calvayrac, Karim Adil, Mohamed Gargouri, Faouzi Hlel <http://dx.doi.org/10.1016/j.vibspec.2012.10.002> Vibrational Spectroscopy Volume 64, January 2013, Pages 10–20

Un article soumis :

1. Ligand effects on the electronic structure and magnetism of magnetite surfaces K. Brymora, F. Calvayrac (Submitted on 8 May 2012) arXiv:1205.1842

32. Projet : 2011012

Intitulé : Interaction Onde M dienne dans des nanostructures composites de type isolant/semiconducteur/terre rare ou isolant/métal. Applications aux guides d'ondes amplificateurs et à 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 2012 : 41 707

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 2

Liste :

1. META'12, the 3rd International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics
2. EMRS European Materials Research Society (EMRS Warsaw)

33. Projet : 2012001

Intitulé : Calcul des propriétés mécaniques par homogénéisation stochastique des matrices renforcées par des NTC (Nanotubes de Carbone) dans le cadre de l'élasticité tridimensionnelle dans le cadre d'une approche par décomposition de domaine

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Philippe KARAMIAN

Laboratoire : LMNO (Caen)

Heures.CPU produites en 2012 : 126 372

Publications de rang A

Nombre : 1

Liste :

1. An efficient stochastic and double-scale model to evaluate the effective elastic properties of 2D overlapping random fibre composites, W. Leclerc and P. Karamian, Computational Materials Science, 2012.

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

Nombre : 1

Liste :

1. Numerical evaluation of the effective elastic properties of 2D overlapping random fibre composites, Technische Mechanik, 32:358 - 368, 2012.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 5

Liste :

1. **Turin ICNMMCS** : the International Conference on Mechanics of Nano, Micro and Macro Composite Structures. Department of Mechanical and Aerospace Engineering, Italy, June 18-20, 2012.
2. **DD21 INRIA RENNES** : 21st International Conference on Domain Decomposition Methods. INRIA Rennes-Bretagne-Atlantique, June 25-29, 2012.
3. **Graz ESMC** : European Mechanics Society. 8th European Solid Mechanics Conference. Graz, Austria, July 9-13, 2012.
4. **Pekin, ICCE** : 20th Annual International Conference on Composites or Nano Engineering. Beijing, China, July 22-28, 2012.
5. **Vienne ECCOMAS** : 6th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and engineering (ECCOMAS 2012), Vienna, Austria, September, 10-14, 2012.

34. Projet : 2012003

Intitulé : Simulation Monte Carlo de la croissance de nano colonnes dans le système Ge-Mn – comparaison à l'expérience à l'échelle atomique

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

Porteur : Cristelle PAREIGE

Laboratoire : GPM UMR 6634 CNRS - Université de Rouen

Heures.CPU produites en 2012 : 800

Thèse en cours

«Origine du ferromagnétisme dans les semi-conducteurs magnétiques : influence de la microstructure et de la distribution des dopants», Isabelle Mouton, octobre 2011-2014.

35. Projet : 2012006**Intitulé : Simulation haute-fidélités de l'écoulement et de la combustion en géométrie complexe**

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

Porteur : Vincent MOUREAU

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

Heures.CPU produites en 2012 : 8 452

Publications de rang A

Nombre : 6

Liste :

1. MALANDAIN, M., MAHEU, N., & MOUREAU, V., (2012) Optimization of the deflated Conjugate Gradient algorithm for the solving of elliptic equations on massively parallel machines. Journal of Computational Physics, in press.
2. BARRE, D., KRAUSHAAR, M., STAFFELBACH, G., MOUREAU, V. & GICQUEL, L., (2012) Compressible and low-Mach number LES of a swirl experimental burner, Comptes Rendus Mécanique, in press.
3. NGUYEN, P. D., MOUREAU, V., & VERVISCH, L., (2012) A massively parallel solution strategy for efficient thermal radiation simulation. Journal of Physics: Conference Series, Eurotherm 95, Nancy, France.
4. MOUREAU, V., DOMINGO, P. & VERVISCH, L. (2011) From large-eddy simulation to direct numerical simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-pdf modelling. Comb. and Flame 158, 1340–1357.
5. MOUREAU, V., DOMINGO, P. & VERVISCH, L. (2011) Design of a massively parallel cfd code for complex geometries. Comptes Rendus Mécanique 339 (2-3), 141– 148.
6. LODIER, G., VERVISCH, L., MOUREAU, V. & DOMINGO, P. (2011) Composition-space premixed flamelet solution with differential diffusion for in situ flamelet-generated manifolds. Comb. and Flame .

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

Nombre : 3

Liste :

1. BOILEAU, M., SCHMITT, T., VEYNANTE, D. & MOUREAU, V. (2012) Analysis of dynamic models for turbulent combustion. CTR Summer Program. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
2. MAHEU, N., MOUREAU, V., DOMINGO, P., DUCHAINE, F. & BALARAC, G., (2012) Large-eddy simulations of flow and heat transfer around a low-mach turbine blade. CTR Summer Program. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.
3. POINSOT, T., STAFFELBACH, G., DOMBARD, J., MOUREAU, V., BALAKRISHNAN, R. & BODOC, V. (2012) Quantification of uncertainties in LES of swirled flows in gas turbine injection systems. CTR Summer Program. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 6

Liste :

1. Moureau, V., and Lartigue, G., « SUCCESS: a joint initiative on LES of complex flows in realistic geometries and the promotion of super-computing », keynote lecture at the LES4ICE conférence, IFP-EN, Rueil-Malmaison, France.
2. Gruselle, C., D'Angelo, Y., and Moureau, V., "Numerical simulation of turbulent stratified flame propagation in a closed vessel", 2012. Turbulence, Heat and Mass Transfer 7, Palermo, Italy.
3. Malandain, M., Maheu, N., and Moureau, V., "Optimization of the Deflated Conjugate Gradients algorithm applied to the massively parallel LES of heat transfer in gas turbines", 2012. Turbulence, Heat and Mass Transfer 7, Palermo, Italy.

4. Nguyen, P. D., Moureau, V., and Vervisch, L., "A massively parallel solution strategy for efficient thermal radiation simulation", 2012. Journal of Physics: Conference Series, Eurotherm 95, Nancy, France.
5. Maheu, N., Moureau, V., and Domingo, P., "High fidelity simulation of heat transfer between a turbulent flow and a wall", 2012. ERCOFTAC ETMM9, Thessaloniki, Greece
6. Pecquery, F., Moureau, V., Lartigue, G., Vervisch, L., and Roux, A., "Development of a numerical model to predict emissions of nitric oxides in turbulent flames", 2012. ERCOFTAC ETMM9, Thessaloniki, Greece

36. Projet : 2012008**Intitulé : Modélis tion des joints de gr ins sous irr di tion**

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

Porteur : Helena ZAPOLSKY

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites en 2012 : 158 799

Communication dans des congrès internationaux

Nombre : 1

Liste :

1. Communication orale à la conférence MRS (Materials Research Society) Fall Meeting, Boston, 29 Novembre 2012.

Communication dans des congrès nationaux

Nombre : 1

Liste :

1. Communication par affiche à la «Rencontre Science et Innovation 2012 de l'Institut Carnot ESP», Saint Etienne du Rouvray

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

Publications de rang A

Nombre : 7

Liste :

1. A Hybrid Mechanism in Chiral Discrimination Induced by Crystallization of Supramolecular Compounds Y. Amharar, A. Grandeury, M. Sanselme, S. Petit, G. Coquerel, J. Phys. Chem. B, 2012, 116 (20), pp 6027–6040
2. Structural investigation on sodium-2-keto-l-gulonate-monohydrate, S. Dette, M. Sanselme, T. Stelzer, L. Renou, M.J. Jones, N. Couvrat, G. Coquerel, J. Ulrich, J. Mol. Struct., 2012, 1020, 121-126
3. Incidence of crystal growth conditions on the formation of macroscopic liquid inclusions in Ciclopirox crystals, A. Waldschmidt, V. Dupray, B. Berton, N. Couvrat, S. Petit, G. Coquerel, J. Cryst. Growth, 2012, 342, 72-79
4. Spotting a conglomerate is just halfway to achieving a preparative resolution by Preferential Crystallization, S. Gonella, J. Mahieux, M. Sanselme, G. Coquerel, Org. Proc. Res. Dev., 2012, 16 (2), 286-293
5. Design and Scalable Synthesis of New Chiral Selectors. Part 2: Chiral Ionic Liquids Derived from Diaminocyclohexane and Histidine, V. Zgonnik, S. Gonella, M.-R. Mazières, F. Guillen, G. Coquerel, N. Saffon, J.-C. Plaquevent, Org. Proc. Res. Dev., 2012, 16 (2), 277–285
6. Crystal structure of a hybrid salt-cocrystal and its resolution by Preferential Crystallization: ((±)trans-N,N'-dibenzyl-diaminocyclohexane)(2,3-dichlorophenylacetic acid)₄, J. Mahieux, S. Gonella, M. Sanselme, G. Coquerel, CrystEngComm., 2012, 14, 103-111
7. Characterization of the transition between the monohydrate and the anhydrous citric acid, A. Lafontaine, M. Sanselme, Y. Cartigny, P. Cardinael, G. Coquerel, J. Therm. Anal. Cal., 2012, online nov. 2012, DOI 10.1007/s10973-012-2798-0

Communication dans des congrès internationaux

Nombre : 10

Liste :

1. About the formation of fluid inclusions inside organic crystals: How vacuoles give indirect proofs of different crystal growth episodes, N. Couvrat, A. Waldschmidt, S. Petit, G. Coquerel, 1st Asian Crystallization Technology Symposium, Seoul (Corée), Mai 2012, Abstract book, FA-03, p. 5
2. Role of released water molecules during the dehydration of a chiral hydantoin derivative, S. Petit, Y. Amharar, Y. Cartigny, M. Sanselme, G. Coquerel, PhandTA 12 (International Conference on Pharmacy and Applied Physical Chemistry), Graz (Autriche), Mai 2012 (abst. Book p. 87)
3. Complex interactions in the binary system between enantiomers of Diprophylline, C. Brandel, J. Rollinger, Y. Cartigny, U.J. Griesser, S. Petit, G. Coquerel, PhandTA 12 (International Conference on Pharmacy and Applied Physical Chemistry), Graz (Autriche), Mai 2012 (abst. Book p. 39)
4. About the formation of fluid inclusions inside organic crystals, S. Petit, A. Waldschmidt, V. Dupray, B. Berton, G. Coquerel, PhandTA 12 (International Conference on Pharmacy and Applied Physical Chemistry), Graz (Autriche), Mai 2012 (abst. Book p. 67)

5. Co-crystals and other crystalline molecular complexes: a journey through the solid state chemistry of Brivaracetam, L. Quéré, S. Rome, F. De Smet, S. Le Meur, L. Aerts, J. Wouters, N. Couvrat, G. Coquerel CGOM-10 (Crystal Growth of Organic Materials), Limerick (Irlande), Juin 2012, Abstract book p.73-74
6. Access to single crystals of (\pm)-Modafinil Form IV by crystallization in gels; structural and energetic comparisons between Forms I, III and IV, J. Mahieux, M. Sanselme, G. Coquerel CGOM-10 (Crystal Growth of Organic Materials), Limerick (Irlande), Juin 2012, Abstract book p.131-133
7. Dilemma on the centrosymmetry or non centrosymmetry of 3,5-dinitrobenzoic acid crystals, F. Simon, S. Clevers, V. Agasse-Peulon, F. Taulelle*, M. Sanselme, N. Couvrat, Y. Cartigny, V. Dupray, G. Coquerel, CGOM-10 (Crystal Growth of Organic Materials), Limerick (Irlande), Juin 2012, Abstract book p.96-97
8. Crystal structure of a hybrid salt-cocystal and its resolution by preferential crystallization, J. Mahieux, S. Gonella, M. Sanselme, G. Coquerel, CGOM-10 (Crystal Growth of Organic Materials), Limerick (Irlande), Juin 2012, Abstract book p.183
9. Fluid inclusions inside organic crystals: case study of 12H, N. Couvrat, A. Waldschmidt, S. Petit, G. Coquerel, CGOM-10 (Crystal Growth of Organic Materials), Limerick (Irlande), Juin 2012, Abstract book p. 170
10. Access to non solvated phases with structural filiation with the parent solvates, G. Coquerel, B. Fours, Y. Cartigny, Hanbat International Workshop on Industrial and Pharmaceutical Crystallization, Daejeon (Corée), Septembre 2012, Abstract book p. 50-51

Communication dans des congrès nationaux

Nombre : 5

Liste :

1. Subambient solid-solid phase transformations in Ciclopirox crystals, C. Brandel, Y. Cartigny, S. Petit, G. Coquerel, XXXVIII èmes JEEP, Rouen, Mars 2012, Abstract book, p. 125-126
2. Characterization of the transition between the monohydrate and the anhydrous citric acid, A. Lafontaine, M. Sanselme, Y. Cartigny, P. Cardinael, G. Coquerel, XXXVIII èmes JEEP, Rouen, Mars 2012, Abstract book, p. 69-70
3. Finding similarities in the solid phases of the family of N,N'-Bis-benzylidene-1,2-diaminocyclohexane derivatives, S. Gonella, M. Sanselme, G. Coquerel, XXXVIII èmes JEEP, Rouen, Mars 2012, Abstract book, p. 139-140
4. On the origin of SHG activity of 3,5-Dinitrobenzoic acid, F. Simon, S. Clevers, M. Sanselme, N. Couvrat, Y. Cartigny, V. Dupray, G. Coquerel, XXXVIII èmes JEEP, Rouen, Mars 2012, Abstract book, p. 121-122
5. Investigations in an unusual binary phase diagram between enantiomers: the case of Diprophylline C. Brandel, Y. Cartigny, S. Petit, G. Coquerel, XXXVIII èmes JEEP, Rouen, Mars 2012, Abstract book, p. 51-52

2. RNMM : Plateforme PISSARO

Intitulé : PI teforme Instrument le en Sciences Sép r tives et An lytiques 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

Nombre : 31

Liste :

1. MARECK, A., LAMOUR, R., SCHAUMANN, A., CHAN, P., DRIOUIC, A., PELLOUX, J. and P; LEROUGE. Analysis of LuPME3, a pectin methylesterase from *linum usitatissimum* revealed a variability in PME proteolytic maturation. *Plant Signaling & Behaviour* 2012, 7: 1-4
2. Mechkarska, M., King, J.D., Coquet, L.M., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H., Takada, K., and J.M. Conlon. Host-defense peptides from skin secretions of the tetraploid frogs *Xenopus petersii* and *Xenopus pygmaeus*, and the octoploid frog *Xenopus lenduensis* (Pipida). *Peptides*, sous presse
3. MARECK, A., LAMOUR, R., SCHAUMANN, A., CHAN, P., DRIOUIC, A., PELLOUX, J. and P; LEROUGE. Analysis of LuPME3, a pectin methylesterase from *linum usitatissimum* revealed a variability in PME proteolytic maturation. *Plant Signaling & Behaviour* 2012, 7: 1-4
4. KING, J.D., Mechkarska, M., Coquet, L.M., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H., Takada, K. and J.M. Conlon. Host-defense peptides from skin secretions of the tetraploid frogs *Xenopus petersii* and *Xenopus pygmaeus*, and the octoploid frog *Xenopus lenduensis* (Pipida). *Peptides*, 2012, 33: 35-43.
5. Cebo C, Rebours E, Henry C, Makhzami S, Cosette P, Martin P. Identification of major milk fat globule membrane proteins from pony mare milk highlights the molecular diversity of lactadherin across species. *J Dairy Sci.* 2012, 95 : 1085-1098
6. Thebault, P., Niedermayer, S., Landis, S., Chaix, N., Guenoun, P., Daillant, J., Man, X.K., Andelman, D., and H. Orland. Tailoring nano-structures using copolymer nanoimprint lithography *Adv.Mater.*, 2012, 24: 1952-1955.
7. ZANINA, N., HADDAD, S., OTHMANE, A., JOUENNE, T., VAUDRY, D., SOUIRI, M. and L. MORA. Endothelial cell adhesion on polyelectrolyte multilayer films functionalised with fibronectin and collagen. *Chem. Papers*, 2012, 66: 532-542.
8. HADJI SFAXI, EZZINE A, COQUET L, COSETTE P, JOUENNE T and M.N. MARZOUKI.. Combined Proteomic and Molecular Approaches for Cloning and Characterization of Copper-Zinc Superoxide dismutase (Cu, Zn-SOD2) from Garlic (*Allium sativum*). *Mol. Biotechnol.*, sous presse.
9. GLINEL, K., THEBAULT, P., HUMBLLOT, V., PRADIER C. and T. JOUENNE. Antibacterial surfaces developed from bio-inspired approaches. *Acta Biomateriala*, 2012, 8 : 1670-1684.

10. SNOUSSI, S., EL MAY, A., COQUET, L., CHAN, P., JOUENNE T., LANDOULSI, A and E. DE. Adaptations of salmonella enterica Hadar under static magnetic field : effects on outer membrane protein patterns. *Proteome Sci.*, sous presse.
11. Cebo C, Rebours E, Henry C, Makhzami S, Cosette P and P. Martin.. Identification of major milk fat globule membrane proteins from pony mare milk highlights the molecular diversity of lactadherin across species. *J Dairy Sci.* 2012, 95 : 1085-1098
12. Catel-Ferreira, M., Rony Nehme, R., Molle, V., Aranda, J., Bouffartigues, E., Chevalier, S., Bou, G., JOUENNE, T. and E. DE. Deciphering the function of the outer membrane protein OprD-homologue of *Acinetobacter baumannii*, *Antimicrob. Agents Chemother.*, sous presse
13. DJERIBI, R., WARDA, B., JOUENNE T. and B. MENAA, B. Characterization of bacterial biofilms formed on urinary catheters. *Amer. J. Infect. Control.* 2012, sous presse
14. Ben Slimene, I., Tabbene, O., Djebali, N., Cosette, P., Schmitter, J.M., Jouenne, T., Urdaci, M.C., and F. Limam. Putative use of a *Bacillus subtilis* L194 strain in the biocontrol of *Phoma medicaginis* in *Medicago truncatula* seedlings. *Res. Microbiol.*, sous presse
15. Mechkarska, M., Prajeep, M., Coquet, L., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H., King, J.D. and J. M. Conlon. The hymenochirins: a family of host-defense peptides from the Congo dwarf clawed frog *Hymenochirus boettgeri* (Pipidae). *Peptides*, sous presse.
16. CONLON, J.M., MECHKARSKA, M., PRAJEEP, M., SONNEVEND, M., COQUET, L., LEPRINCE, J., JOUENNE, T., VAUDRY, H. and J.D. KING. Host-defense peptides in skin secretions of the tetraploid frog *Silurana epittropicalis* with potent activity against methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* (MRSA). *Peptides*, 2012, 37:113-119.
17. Tnani H, López I, Jouenne T and C.M. Vicent. Quantitative subproteomic analysis of germinating related changes in the scutellum oil bodies of *Zea mays*. *Plant.Sci.*, 2012, sous presse.
18. LECAMP, L., MTIMET, I., KEBIR, N., BUREL, F. and T. JOUENNE. Green synthesis process of a polyurethane-silver (PU-Ag) nanocomposite having biocide surfaces. *Polym. J.*, 2012, sous presse.
19. ZANINA, N., MORA, L., OTHMANE, A., BENARD, M., DUNCAN, A., JOUENNE, T., VAUDRY, D. and M. SOURI. Differences in cancer cell attachment, migration on collagen and fibronectin coated surfaces. *Biotechnol. Bioprocess Eng.*, sous presse.
20. SOURI, M., GAMMOUDI, I., MORA, L., BEN OUADA, L., JOUENNE, T., FAFFREZIC-RENAULT, N., DEJOURS, C., OTHMANE, A ; and A ; DUNCAN. A novel 3-D nano-assembly bacteria based biosensor for enhanced detection of heavy metal pollutants. *J. Environ. Sci. Eng.* sous presse.
21. GUENIN E., HARDOUIN J., LALATONNE Y., MOTTE L. Bivalent alkyne bisphosphonate as clickable and solid anchor to elaborate multinational iron oxide nanopart euthanasie microwave enhancement. *J. Nanopart. Research* (2012) accepted (DOI: 10.1007/s11051-012-0965-7)
22. CONLON, J.M., REINERT, L.K., MECHKARSKA, M., PRAJEEP, M., MEETANI, M., COQUET, L., JOUENNE, T., HAYES, M.P. and L. ROLLINS-SMITH. Evaluation of the skin peptide defenses of the Oregon spotted frog *Rana pretiosa* against infection by the chytrid fungus *Batrachochytrium dendrobatidis*. *Dev. Comp. Immunol*
23. MOUSSOUS, S., SELATNIA, A., MERATI, A; and G.A. JUNTER. Batch cadmium (II) biosorption by an industrial residue of macrofungal biomass (*Clitopilus scyphoides*). *Chem. Eng. J.*, sous presse.
24. TABBENE, O., GHARBI, D., KARKOUCH, I., ELKAHOU, S, Al feddy, M.N., COSETTE, P., JOUENNE, T. and F. LIMAM. Antioxidative and DNA protective effects of bacillomycin D-like lipopeptides produced by B38 strain" *Appl. Biochem. Biotechnol.*, sous presse.
25. PORCH, M.W., COQUET, L., OSENBERG, M.J., STAPLES, M.C., VARASCHIN, RK., JOUENNE, T. and D. SAVAGE. Effects of moderate drinking during pregnancy on placental protein. *Alcohol. Clin. Exp. Res.*, 2012, 36 (SI): 41-41A
26. Elias S, Delestre C, Ory S, Marais S, Courel M, Vazquez-Martinez R, Bernard S, Coquet L, Malagon MM, Driouich A, Chan P, Gasman S, Anouar Y and M. Montero-Hadjadje Chromogranin a induces the biogenesis of granules with calcium- and actin-dependent dynamics and exocytosis in constitutively secreting cells. *Endocrinology.* 2012 153: 4444-56.

27. Michaux C, Martini C, Shioya K, Ahmed Lecheheb S, Budin-Verneuil A, Cosette P, Sanguinetti M, Hartke A, Verneuil N a and J.C. Giard CspR is a cold-shock RNA-binding protein involved in the long-term survival and the virulence of *Enterococcus faecalis*. *J. Bacteriol* (2012), sous presse.
28. FRAGNETTO, G., S. ALEXANDRE, J.M. VALLETON, F. RONDELEZ Competition for space between a protein and lipid monolayers. *Colloid and Surfaces B : Biointerfaces*, accepté
29. DAKHLAOUI-DKHIL, S., COQUET, L., COSETTE, P., ELKAHOUI, S., CHAN TCHI SONG, P., VAUDRY, D., SAHLI HANNACHI, A., TRIFI, N., LIMAM, F. and T. JOUENNE. The Date Palm (*Phoenix dactylifera* L.) leaf proteome: identification of a gender biomarker to screen male parents. *Plant Omics*, sous presse.
30. BERTRAND, J., GOICHON, A, DECHELOTTE, P and M. COEFFIER. Regulation of intestinal protein metabolism by amino acids. *Amino Acids*, 2012, sous presse.
31. GHALI, W., VAUDRY, D., JOUENNE, T. and M.N. MARZOUKI. Assessments of cyto-protective, antiproliferative and antioxidant potential of medicinal plant *Jatropha poodagrica*. *Indust Crops Prod.* sous presse.

Contrats de recherche

Nombre : 5

Liste :

1. Programme FEDER Interreg IVA. PERENE « Peptide Research Network of Excellence »
2. Contrat de Recherche avec l'Association "Vaincre la Mucoviscidose" . Protéines antibiotiques du Manchot royal, naturellement actives en milieu salé, comme source d'inspiration d'une nouvelle gamme d'antibiotiques ciblés sur les infections à *Pseudomonas* et *Staphylocoques* en milieu salé. Laboratoire associé , CBM, UMR (Orléans) , porteur du projet : C. Landon
3. Contrat de Recherche avec l'Association "Vaincre la Mucoviscidose" «Effets de molécules hormonales produites par les poumons sur la virulence de la bactérie *Pseudomonas aeruginosa* et recherche d'antagonistes chimiques favorisant l'élimination de ces bactéries
4. Contrat de Recherche avec l'Association "Vaincre la Mucoviscidose";: Caractérisation fonctionnelle d'un nouveau système bac impliqué dans la formation de biofilm et la production de rhamnolipides chez *P. aeruginosa*
5. Programme de Coopération DGRS-CNRS- Tempus (Tunisie) : Caractérisation de nouveaux peptides et polypeptides bioactifs extraits à partir de plantes ou microorganismes Laboratoire partenaire : Laboratoire des Substances Bioactives, Centre de Biotechnologie de Borj Cedria Hammam-Lif.

3. RNMM : CERMN**Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médic ment de Norm ndie**

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

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

Publications

Nombre : 11

Liste :

1. Perato S.; Voisin-Chiret A.S.; Sopkova-de Oliveira Santos J.; Sebban M.; Legay R.; Oulyadi H.; Rault S. Synthesis of new linear poly(phenylpyridyl) chains. *Tetrahedron*, 2012, 68, 1910-1917.
2. Sopkova-de Oliveira Santos, J., Voisin-Chiret, A. S.; Burzicki, G., Sebaoun, L.; Sebban, M., Lohier, J.-F., Legay, R., Oulyadi, H.; Bureau, R. and Rault, S. Structural characterizations of oligopyridyl foldamers, α -helix mimetics. *J. Chem. Inf. Mod.*, 2012, 52, 429-439.
3. Chosson E., Santoro F., Rochais C., Sopkova-de Oliveira Santos J., Legay R., Thoret S., Cresteil T., Sinicropi M. S. Besson T. and Dallemagne P. Synthesis of novel 7-oxo and 7-hydroxy trifluoroalcolchicinoids with cytotoxic effect. *Bioorg. Med. Chem.*, 2012, 20(8), 2614-2623.
4. Dulin F., Halm-Lemeille M.-P., Lozano S., Lepailleur A., Sopkova-de Oliviera Santos J., Rault S., Bureau R. Interpretation of Honeybees contact toxicity associated to Acetylcholinesterase Inhibitors. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 2012, 79, 13-21.
5. Voisin-Chiret A. S., Burzicki G., Perato S., De Giorgi M., Sopková-de Oliveira Santos J., Rault S. Aromatic garlands, as new foldamers, to mimic protein secondary structure. *Tetrahedron*, 2012, 68, 4381-4389.
6. Lecoutey C., Rochais C., Genest D., Butt-Gueulle S., Ballandonne C., Corvaisier S., Dulin F., Lepailleur A., Sopkova-de Oliveira Santos J. and Dallemagne P. Synthesis of dual AChE/5-HT4 receptor multi-target directed ligands. *Med. Chem. Commun.*, 2012, 3, 627-634.
7. Lohou E., Sopkova-de Oliveira Santos J., Schumann-Bard P., Boulouard M., Stiebing S., Rault S. and Collot V. New hypotheses for the binding mode of 4- and 7-substituted indazoles in the active site of neuronal nitric oxide synthase. *Bioorg. Med. Chem.*, 2012, accepted.
8. Dubost E., Dumas N., Fossey C., Magnelli, R., Butt S., Ballandonne C., Caignard, D., Dulin F., Sopkova-de Oliveira Santos J., Millet P., Charnay Y., Rault S., Cailly, T., Fabis F. Synthesis and Structure-Affinity Relationships of Selective High-Affinity 5-HT4 Receptor Antagonists: Application to the Design of New Potential Single Photon Emission Computed Tomography (SPECT) Tracers. *J. Med. Chem.*, 2012, accepted.
9. Experimental characterization of an interaction between 26RFa and its receptor. Leprince, J.; Neveu, C.; Dulin, F.; Lefranc, B.; Santos, J. S. D.; Galas, L.; Calbrix, C.; Chuquet, J.; Vaudry, D.; Vaudry, H.; Bureau, R., *J. Pept. Sci.* 2012, 18, S104-S105.
10. Cheikh N., Villemin D., Bar N., Lohier J.-F., Choukchou-Braham N., Mostefa-Kara B., Sopkova J. A serendipitous conversion of enamino lactone nitriles with primary amines: a new synthesis of substituted 2-aminopyridine derivatives. *Tetrahedron*, 2012, accepted.
11. Villemin D., Cheikh N., Liao L., Bar N., Lohier J.-F., Sopkova J., Choukchou-Braham N., Mostefa-Kara B. Cedric. Two versatile routes towards Cerpegin and analogues: applications of a one pot reaction to new analogues of Cerpegin. *Tetrahedron*, 2012, 68, 4906-4918.

Communications dans des congrès internationaux

Nombre : 9

Liste :

1. Farcy E, Serpentine A, Lebel JL, Bureau R and Halm MP. Ecotoxicity of 14 serotonergic pharmaceuticals in the crustacean *Daphnia magna*, the microalgae *Pseudokirchneriella subcapitata* and the marine gastropod *Haliotis tuberculata*. *Setac Europe*, Berlin, 22 mai 2012.

- Lepailleur, A.; Freret, T.; Dulin, F.; Lemaître, S.; Boulouard, M.; Lesnard, A.; Rault, S.; Bureau, R. Towards new ligands with pro-cognitive properties. Virtual screening and polypharmacology. 3rd Strasbourg Summer School on Chemoinformatics, Strasbourg, 25-29 Juin 2012.
- Poezevara, G.; Cuissart, B.; Crémilleux, B.; Lepailleur, A.; Bureau, R. Emerging Patterns as structural alerts for computational toxicology. 3rd Strasbourg Summer School on Chemoinformatics, Strasbourg, 25-29 Juin 2012.
- Dulin, F.; Halm-Lemeille, M.P.; Lozano, S.; Lepailleur, A.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Rault, S.; Bureau, R. New insights into the mode of action of AChE inhibitors pesticides in honeybees: molecular modeling studies. 3rd Strasbourg Summer School on Chemoinformatics, Strasbourg, 25-29 Juin 2012.
- Jade Fogha, Serge Perato, Anne Sophie Voisin-Chiret, Sylvain Rault, Ronan Bureau and Jana Sopkova-de Oliveira Santos . Analysis of mcl-1 and bh3-only proteins: A model for drugs discovery. 3rd Strasbourg Summer School on Chemoinformatics, Strasbourg, 25-29 Juin 2012.
- Lepailleur, A.; Poezevara, G.; Cuissart, B.; Crémilleux, B.; Bureau, R. Towards automated detection of structural alerts for predictive ecotoxicology 19th EuroQSAR, Vienne, 26-30 Août 2012.
- Dulin, F.; Halm-Lemeille, M.P.; Lozano, S.; Lepailleur, A.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Rault, S.; Bureau, R. In silico highlights of varroacide compounds (AChE inhibitors) to protect the honeybee health. 19th EuroQSAR, Vienne, 26-30 Août 2012.
- Crémilleux, B.; Cuissart, B.; Bureau, R.; Lepailleur, A.; Plantevit, M.; Poezevara, G.; Raïssi, C.; Soulet, A. Discovering patterns (sets) in chemoinformatics. 3rd Spring Workshop on Mining and Learning, Bad Neuenahr (Allemagne), 18-20 Avril 2012.
- R. Bureau. Pharmacophores vs emerging fragments. Analysis of polypharmacological and toxicological properties related to chemical derivatives. Computer-Aided Drug Design and QSAR, Chicago, 29-30 octobre 2012.

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 5

Liste :

- Jade Fogha, Serge Perato, Anne Sophie Voisin-Chiret, Sylvain Rault, Ronan Bureau and Jana Sopkova-de Oliveira Santos . Mcl-1 inhibitors design. Journée des Jeunes Chercheurs (RICT), Paris, 2-3 Février 2012.
- Dulin, F.; Halm-Lemeille, M.P.; Lepailleur, A.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Rault, S.; Bureau, R. Vers la mise en évidence in silico de nouveaux composés anti-varroa et de moindre toxicité vis-à-vis des abeilles : les inhibiteurs d'acétylcholinestérase. 3ème Journée Scientifique Apicole, Nantes (France), 7 Juin 2012
- Jade Fogha, Serge Perato, Anne Sophie Voisin-Chiret, Sylvain Rault, Ronan Bureau and Jana Sopkova-de Oliveira Santos . Discovery of selective inhibitors for mcl1. Journée de l'école doctorale, Rouen, 23 Mars 2012.
- Poezevara, G.; Crémilleux, B.; Cuissart, B.; Lepailleur, A.; Bureau, R. Motifs émergents comme structure d'alerte en écotoxicologie. Colloque 2012 de la Société Française d'Ecotoxicologie Fondamentale et Appliquée (SEFA), Lyon, 4-5 Juillet 2012.
- R. Bureau. Validation of in silico and in vitro test methods for the toxicological and ecotoxicological evaluations of substances and preparation. Sustainable chemistry conference, ANR, 18-19 septembre 2012.

Programmes de recherche

- Projet ANR pharm@ecotox, (2011 – 2015). 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).
- Projet européen à financement FEAGA : Mise en évidence in silico de nouveaux composés anti varroa et de moindre toxicité sur abeille.
- Projet européen à financement INTERREG : Programme ISCE Chem

4. Projet régional Emergence (Innotox2, 2009-2012) : collaborations GREYC UMR 6072 et UMRM100 (UCBN).
5. Projet régional Emergence (2009-2012) : Nouveaux ligands hybrides inhibiteurs d'acétylcholinestérase et agonistes des récepteurs 5-HT₄, d'intérêt thérapeutique dans la maladie d'Alzheimer.
6. Collaboration régionale GMPc, Centre Cyceron
7. Projet régional Emergence (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.

4. RNMM : UMR 6014 COBRA

Intitulé : Equipe Groupe Matériologiques

Responsable : Pr. G. Dupas

Laboratoire : Groupe Matériaux organiques, IRCOF-INSA de Rouen

Bâtiment IRCOF, Université de Rouen - 1, rue Thomas Becket - 76 821 MONT-SAINT-AIGNAN

Publications

Nombre : 1 en 2012 (3 à paraître en 2013 et 1 article soumis)

Liste :

1. Diels-Alder reactions of fluorinated ketendithioacetals with electron-rich 1,3-dienes: a new access to polysubstituted aromatic sulfides, Jean-Philippe Bouillon, Sergiy Mykhaylychenko, Sigismund Melissen, Agathe Martinez, Dominique Harakat, Yuriy G. Shermolovich. *Tetrahedron*, 2012, 68, 8663-8669.
2. Push-Triazole-Pull fluorophores incorporating pyrimidine moiety: structure-photophysical properties relationships. Anne-Sophie Cornec, Christine Baudequin, Catherine Fiol-Petit, Nelly Plé, Georges Dupas and Yvan Ramondenc, *Eur J. Org. Chem*, 2013, sous presse.
3. Ligand control for orthogonal direct C-H bond arylation through nCMD and CMD in oxa(thia)zole-4-carboxylate series: evidence for nCMD mechanism pathway. Laure Théveau, Georges Dupas, Olivier Querolle, Lieven Meerpoel and Christophe Hoarau, *Tetrahedron*, 2013, sous presse.
4. Hetero-Diels Alder reactions of perfluoroalkyl thioamides with electron-rich 1,3-dienes: synthesis of new 2-aminosubstituted-3,6-dihydro-2H-thiopyrans and related compounds. Oleksandr S. Kanishchev, Morgane Sanselme, Jean-Philippe Bouillon. *Tetrahedron*, 2013, 69, 1322-1336.
5. Decarboxylative Cross-coupling of Azine N-oxides with Aryl Halides, Cédric Spitz, Johan Lefevre, Georges Dupas, Corinne Fruit, Christophe Hoarau (soumis pour publication).

5. RNMM : UMR 6014 COBRA

Intitulé : Equipe Analyse et Modélisation

Responsables : OULYADI Hassan - SEGALAS-MILAZZO Isabelle

Laboratoire : Equipe «Analyse et Modélisation»

Bâtiment IRCOF, Université de Rouen - 1, rue Thomas Becket - 76 821 MONT-SAINT-AIGNAN

Publications

Nombre : 2

Liste :

1. F. Maire, G. Coadou, L. Cravello, C.M. Lange, Traveling Wave Ion Mobility Mass Spectrometry Study of Low Generation Polyamidoamine Dendrimers., *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* (2012) Online: 21 Dec 2012. DOI: 10.1007/s13361-012-0527-3

- O. Stephany, S. Tisse, G. Coadou, J.P. Bouillon, V. Peulon-Agasse & P. Cardinael, Influence of amino acid moiety accessibility on the chiral recognition of cyclodextrin-amino acid mixed selectors in enantioselective gas chromatography. *J. Chromatogr. A.* (2012) 1270, 254-61.

Communications dans des congrès internationaux : communications orales

Nombre : 2

Liste :

- A. Marotte, L. Guilhaudis, Ganesan, C. Neveu, B. Lefranc, J. Leprince, H. Vaudry & I. Ségalas-Milazzo, Synthesis and characterization of new analogues of 26RFa, ANORCQ XI, Caen (France), 15-17 avril 2012.
- J. De Sa Oliveira, V. Tognetti, L. Guilhaudis, A. Marotte, L. Joubert & I. Ségalas-Milazzo, Determination of the bioactive conformation of 26RFa(20-26) by molecular modelling under NMR restraints and quantum semi-empirical mechanic approaches, IS:CE-chem 4th Summer School, Merville-Franceville (France), 17-19 avril 2012.

Communications dans des congrès internationaux : communications par affiches

Nombre : 7

Liste :

- M. Catel-Ferreira, S. Marti, G. Coadou, T. Jouenne, J. Vila & E. Dé, Involvement of the outer membrane protein OmpW in colistin resistance of *Acinetobacter baumannii*. European Congress of Clinical Microbiology and Infectious Diseases (ECCMID), London (Royaume-Uni), 31 mars-3 avril 2012
- A. Marotte, L. Guilhaudis, Ganesan, C. Neveu, B. Lefranc, J. Leprince, H. Vaudry & I. Ségalas-Milazzo, Synthesis and characterization of new analogues of 26RFa. ANORCQ XI, Caen (France) 15-17 avril 2012.
- E.-D. Leriche, F. Maire, G. Coadou, M. Grossel, C. Lange, C. Afonso & C. Loutelier-Bourhis, Investigation of dendriplexes by ion mobility mass spectrometry. 60th ASMS Conference, Vancouver (Canada), 20-24 mai 2012.
- M. Désir, G. Coadou, M. Sebban & H. Oulyadi, Investigating Inhibitors of Acetylcholinesterase by NMR and Molecular Modelling. GERM 2012, Saint Hilaire (France), 29 mai-1er juin 2012.
- L. Guilhaudis, A. Marotte, I. Buchet, Ganesan, C. Neveu, B. Lefranc, N. Chartrel, J. Leprince, H. Vaudry & I. Ségalas-Milazzo, Investigation of the bioactive conformation of 26RFa, an orexigenic neuropeptide. EUROMAR Magnetic Resonance Conference, Dublin (Irlande), 29 juin-5 juillet 2012.
- M. Désir, G. Coadou, M. Sebban & H. Oulyadi, Investigating Inhibitors of Acetylcholinesterase by NMR and Molecular Modelling. XXVth International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems, Lyon (France), 19-24 août 2012.
- A. Marotte, L. Guilhaudis, Ganesan, C. Neveu, B. Lefranc, J. Leprince, H. Vaudry, I. Ségalas-Milazzo, Investigating the structural determinants of neuropeptide 26RFa required for the activation of receptor GPR103. 30th European Peptide Symposium, Athènes (Grèce), 31 août - 5 septembre 2012.

Communications dans des congrès nationaux

Nombre : 1

Liste :

- A. Marotte, L. Guilhaudis, C. Neveu, J. Leprince, H. Vaudry, Ganesan & I. Ségalas-Milazzo, Rational conception of new ligands of GPR103, a G protein-coupled receptor and target of 26RFa. Journées Jeunes Chercheurs "chimie thérapeutique" 2012, Romainville, 2-3 février 2012