



Normandie Université

## Pôle Régional de Modélisation Numérique

### Références des publications des laboratoires utilisateurs pour l'année 2014

Référence du document : RA-PUBLIS-2014 - Révision 02 - Date de création : 12/01/2015

Validation : 26/02/2015 (HP)

Documents référencés : N/A

**Résumé** : Liste des publications des laboratoires utilisateurs du PRMN (service de calcul intensif) pour l'année 2014.

**Révisions** :

- 01 : version initiale (BC-MSD)
- 02 : version finale (MSC)

**Accessibilité**

ComUE Normandie Université : **OUI**

EXTÉRIEURS : **OUI**

RESTREINT : **NON**

**Table des matières**

Introduction	6
Projets scientifiques expertisés	7
Projet : 1998007	7
Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	
Projet : 1998022	7
Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles	
Projet : 1998053	8
Intitulé : Etude des interactions moléculaires par une approche conjointe de mécanique moléculaire polarisable et de chimie quantique	
Projet : 2002003	9
Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	
Intitulé : Simulation numérique de l'interaction entre la lumière et un objet de forme complexe	
Projet : 2003008	11
Intitulé : Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	
Projet : 2003013	11
Intitulé : Développements et applications des méthodes particulières	
Projet : 2004004	13
Intitulé : Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium de 3-aminopyrrolidines chirales.	
Projet : 2005003	13
Intitulé : Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins".	
Projet : 2005004	14
Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands	
Projet : 2005010	16
Intitulé : Etude par modélisation moléculaire d'analogues du KRN7000 en association avec la protéine hôte human_CD1d, et reconnaissance par le récepteur TCR	
Projet : 2005013	17
Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.	
Projet : 2005014	17
Intitulé : Étude des cinétiques des transformations de phases dans les alliages modèles des aciers	
Projet : 2006003	18
Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.	
Projet : 2006007	19
Intitulé : Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc	
Projet : 2006011	19
Intitulé : Simulation d'écoulements liquide-gaz : DNS et LES	
Projet : 2006013	20

Intitulé : Étude du mécanisme de réactions catalysées par les complexes des métaux de transition et du groupe principal.	
Projet : 2007001	20
Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement	
Projet : 2007013	21
Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés	
Projet : 2008005	21
Intitulé : Etude du processus d'agrégation dans les solutions aqueuses : Analyse par simulation de dynamique moléculaire classique et quantique	
Projet : 2008013	22
Intitulé : Simulations d'écoulements fluides réactifs - Interactions flamme/paroi, combustion petite échelle, combustion stratifiée	
Projet : 2008018	23
Intitulé : Benchmark de modèles d'incendie	
Projet : 2009007	23
Intitulé : Propriétés structurales et électroniques des Interfaces AlN/GaN	
Projet : 2010006	23
Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique	
Projet : 2010010	24
Intitulé : Topologie quantique	
Projet : 2011001	25
Intitulé : Etude théorique du mécanisme d'une réaction de carbométallation intramoléculaire	
Projet : 2011005	25
Intitulé : Etude sur modèles chimiques de réactions de Friedel-Crafts appliquée à la synthèse de polyaryléthercétones	
Projet : 2011007	25
Intitulé : Modélisation de systèmes nanostructurés : nanoparticules magnétiques, conducteurs ioniques	
Projet : 2011008	26
Intitulé : Etude ab-initio du processus de bio-minéralisation du carbonate de calcium	
Projet : 2011012	26
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	26
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	27
Intitulé : Simulation Monte Carlo de la croissance de nano colonne dans le système GeMn - Comparaison à l'expérience à l'échelle atomique.	
Projet : 2012004	27
Intitulé : Modélisation de systèmes biologiques complexes, des métalloprotéines	

Projet : 2012006	27
Intitulé : Simulation hautes-fidélités de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe	
Projet : 2012007	28
Intitulé : Propriétés de multicouches Co-Pt	
Projet : 2012008	29
Intitulé : Modélisation des joints de grains sous irradiation	
Projet : 2012013	29
Intitulé : Simulation de nano-objets et reconstruction tridimensionnelle	
Projet : 2012016	29
Intitulé : Classification de molécules	
Projet : 2013004	30
Intitulé : Diffusion et piégeage de l'hydrogène dans le nickel par calculs ab initio	
Projet : 2013005	30
Intitulé : Agrégats d'acide phosphorique pour l'étalonnage en spectrométrie de masse couplée à la mobilité ionique	
Projet : 2013006	31
Intitulé : Imagerie mathématique et analyse numérique	
Projet : 2013008	31
Intitulé : Etude par simulations numériques de la transition de phase austénite-ferrite : application aux Pipelines	
Projet : 2013009	32
Intitulé : Simulation de séparation en masse de haute résolution avec un plasma d'ions dans un piège de Penning	
Projet : 2013013	32
Intitulé : Mésochallenge 2013	
Projet : 2013015	32
Intitulé : Cinétique chimique détaillée des plasmas froids.	
Projet : 2013019	33
Intitulé : Modélisation de la pollution atmosphérique : couplage des échelles locales et régionales - modèles SIRANE 2.0 et CHIMERE.	
Projet : 2014002	33
Intitulé : Amélioration des propriétés mécaniques, thermiques et électriques des matériaux composites renforcés par des inclusions rigides métallisés et thermiquement conducteurs par le biais de la simulation numérique et technique homogénéisation multi-échelles.	
Projet : 2014003	33
Intitulé : Etude de mécanisme de diffusion à l'interface dans les semi-conducteurs III-V.	
Projet : 2014004	33
Intitulé : Ecoulements diphasique sur une paroi rugueuse. Etude numérique. Estimation de la longueur de Navier et application à la réduction de frottement.	
Projet : 2014005	34
Intitulé : Validation et évaluation d'un nouveau solveur explicite cartésien pseudo-compressible à raffinement adaptatif (AMR) massivement parallèle. Application à la simulation d'une hydrolienne.	

Projet : 2014006	34
Intitulé : Modèle Conceptuel Modulaire	
Projet : 2014007	35
Intitulé : Conduction électrique le long des dislocations dans les nano-fils de matériaux nitrures-III.	
Projet : 2014009	35
Intitulé : Développement d'un endoscope UV pour la visualisation in-situ de fronts de flamme.	
Projet : 2014010	35
Intitulé : Matériaux composites hybrides par intégration de plis lin dans des structures stratifiés carbone.	
Projet : 2014011	35
Intitulé : Simulations de la turbulence de Couette-Taylor en présence de Gradient de température radial.	
Projet : 2014012	36
Intitulé : Transition laminaire-turbulent dans un tube de section circulaire avec un élargissement.	
Projet : 2014014	36
Intitulé : Experiments on Minimum Absent Words in complete genome sequences	
Projet : 2014015	36
Intitulé : Cinétique de transformation de phase dans les superalliages à base Ni et Co	
Projet : 2014016	37
Intitulé : Étude des thioglycosyltransférases UGT74B1 et UGT74C1 d'Arabidopsis Thaliana par modélisation moléculaire et spectroscopie RMN.	
<a href="#">Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire</a>	38
RNMM : SMS EA 3233	38
Intitulé : Sciences et Méthodes Séparatives	
RNMM : Plateforme PISSARO	40
Intitulé : Utilisation de l'outil MASCOT pour l'identification des protéines	
RNMM : CERMN	41
Intitulé : Centre d'Études et de Recherche sur le Médicament de Normandie	
RNMM : UMR 6014 COBRA	44
Intitulé : Laboratoire de chimie organique et analytique	

## A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIHAN pour l'année 2014. 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 PRMN. 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/PRMN 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 membres du projet.

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

## B. Projets scientifiques expertisés

### 1. Projet : 1998007

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

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Jean-Guy CAPUTO

Laboratoire : LMI - Laboratoire de Mathématiques de l'INSA de Rouen

Heures.CPU 2014 : 1 899

#### Publications de rang A

1. J.-G. Caputo et D. Dutykh, Nonlinear waves in networks: a simple approach using the sine-Gordon equation, *Phys. Rev. E*, 2014, 90, 022912.
2. A. Aceves and J.-G. Caputo, Mode dynamics in nonuniform waveguide arrays: a Graph Laplacian approach, *J. Opt.*, 2014, 16, 035202.
3. J.-G. Caputo, G. Cruz-Pacheco and P. Panayotaros, Bistable reaction-diffusion on a network", *Accepted à J. Phys. A*, Décembre 2014

#### Communications dans des congrès internationaux

1. J.-G. Caputo, Wave propagation in nonlinear networks, in minisymposium Complex networks and dynamics, In *International Conference on Computational Science and Its Applications, ICCSA 2014*, Université du Havre
2. J.-G. Caputo, Reaction-diffusion front crossing a local defect, In *Conference Nonlinear Phenomena in Biology*, Munich, Mars 2014, (présentation invitée)
3. J.-G. Caputo, organisation d'un mini-symposium "Model reduction", Society for Industrial and Applied Mathematics, *SIAM Conference on Nonlinear Waves and Coherent Structures*, Cambridge Aout 2014

#### Communications dans des congrès nationaux

1. KNIPPEL Arnaud, Noeuds mous d'un graphe, *ROADEF - 15ème congrès annuel de la Société française de recherche opérationnelle et d'aide à la décision*, Feb 2014, Bordeaux, France

### 2. Projet : 1998022

**Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

Laboratoire : LMFN - CORIA (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 3 782 016

#### Publications de rang A

1. Shadloo, M.S., Hadjadj, A. Chaudhuri, A. On the onset of post-shock flow instabilities over concave surfaces. *Physics of Fluids*, 26, 076101 (2014).
2. Sow, A., Chinnayya, A., Hadjadj, A. Mean structure of one-dimensional unstable detonations with friction, *Journal of Fluids Mechanics*, 743 : 503-533 (2014).
3. Bensayah, K., Hadjadj, A. Bounif, A. Heat Transfer in Turbulent Boundary Layers of Conical and Bell Shaped Rocket Nozzles with Complex Wall Temperature, *Numerical Heat Transfer, Part A : Applications*. 66(3): 289-314 (2014).

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Kotov, D.V., Yee, H., Hadjadj, A., Sjogreen, B., Wray, A. High-order numerical methods and subgrid filtering in LES of turbulence with shocks. *21st International Shock Interaction Symposium*, Riga, Latvia, 3-8 August 2014.
2. Kotov, D.V., Yee, H., Hadjadj, A., Sjogreen, B., Wray, A. High-order Numerical methods for LES of turbulent flows with discontinuities. *8th International Conference on Computational Fluid Dynamics (ICCFD8)*, Chengdu, Sichuan, China, July 14-18, 2014.
3. Taguelmimt, N., Danaila, L., Hadjadj, A. Effects of viscosity variations in temporal mixing layer. *XXI Fluid Mechanics Conference*, Krakow, Poland, 15-18 June 2014.
4. Goerges-Picot, A., Hadjadj, A., Herpe, J. Influence of downstream unsteadiness on flow pattern in separated nozzle flows. *50th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference*, Ohio (USA), 28 - 30 July 2014.

**Thèses soutenues en 2014 sur le projet**

- Alexandre GEORGES-PICOT. Développement de modèles physiques et numériques pour la simulation aux grandes échelles dans écoulements dans les tuyères supersoniques. Thèse de doctorat, INSA de Rouen (08/12/2014).
- Aliou SOW. Modélisation numérique des détonations gazeuses en milieu confiné. Thèse de doctorat, Université de Rouen (09/12/2014).

**Thèses en cours sur le projet**

- Nourredine TAGUELMIMT. Effets de viscosité variable dans les couches de mélange turbulentes (thèse en cours, soutenance prévue en 2015).
- Arthur PIQUET. DNS et LES des tuyères supersoniques (thèse en cours, soutenance prévue en 2016).
- Vineet SONI. Développement d'algorithmes multi-résolution pour les écoulements avec ondes de choc (thèse en cours, soutenance prévue en 2016).

**Stages de Master en 2014 sur le projet**

- Guillaume SAHUT. Simulation de l'injection supersonique d'hélium en bord de plasma de fusion thermonucléaire. Stage Master EFE, Université de Rouen (30/06/2014).

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Projet ANR MAPIE (2013-2107) en partenariat avec Ecole Centrale Paris (Anne-Sophie MOURONVAL) et Université de Nantes (Guy MOEBS).

**3. Projet : 1998053****Intitulé : Etude des interactions moléculaires par une approche conjointe de mécanique moléculaire polarisable et de chimie quantique**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Nohad GRESH

Laboratoire de Chimie et Biochimie Pharmacologiques et Toxicologiques, UMR 8601 CNRS, UFR Biomédicale (PARIS)

Heures.CPU 2014 : 101 047

**Publications de rang A**

1. N. Gresh, K. El Hage, D. Perahia, J-P. Piquemal, C. Berthomieu, D. Berthomieu. J., Polarizable Molecular Mechanics studies of Cu(I)/Zn(II) Superoxide Dismutase. Bimetallic binding site and structured waters. *Comput Chem.* 2014, 35, 1096-1106 (2014). DOI: 10.1002/jcc.23274.
2. K. El Hage, J.-P. Piquemal, Z. Hobaika, R. G. Maroun, N. Gresh, Substituent-Modulated Affinities of Halobenzene Derivatives to the HIV-1 Integrase Recognition Site. Analyses of the Interaction Energies by Parallel Quantum Chemical and Polarizable Molecular Mechanics. *J. Phys. Chem. A* 2014, 118, 9772-9782. DOI: 10.1021/jp5079899.



3. R. Chaudret, N. Gresh, C. Narth, L. Lagardere, T. A. Darden, G. A. Cisneros, J.-P. Piquemal, S/G-1: An Ab Initio Force-field Blending Frozen Hermite Gaussian Densities and Distributed Multipoles. Proof of Concept and First Applications to Metal Cations. *J. Phys. Chem. A*. 2014, 118, 7598-7612. DOI: 10.1021/jp5051657
4. M. Devereux, N. Gresh, J.-P. Piquemal and M. Meuwly, A Supervised Fitting Approach to Force Field Parametrization with Application to the SIBFA Polarizable Force Field, *J. Comput. Chem.*, 2014, 35, 1577-1591 (COVER) DOI: 10.1002/jcc.23661
5. E. Goldwaser, B. de Courcy, R. Slimane, J.-P. Piquemal, N. Gresh, Conformational analysis of a polyconjugated protein-binding ligand by joint ab initio quantum chemistry and polarizable molecular mechanics. Addressing the issues of anisotropy, conjugation, polarization, and multipole transferability. *J. Mol. Modeling*, 2014, sous presse, DOI: 10.1007/s00894-014-2472-5.
6. Liu, W.-Q., Megale, V., Borriello, L., Leforban, B., Montes, M., Goldwaser, E., Gresh, N., Piquemal, J.-P., Hadj-Slimane, R., Hermine, O., Garbay, C., Raynaud, F., Lepelletier, Y., Demange, L., Synthesis and structure-activity relationship of non-peptidic antagonists of neuropilin-1 receptor. *Bioorg. Med. Chem. Letts*. 2014, 24, 4254-54259.
7. K. El Hage, J.-P. Piquemal, Z. Hobaika, R. G. Maroun, N. Gresh, Could the 'Janus-like' properties of the halobenzene CX bond (X=Cl, Br) be leveraged to enhance molecular recognition? *J. Comput. Chem*, sous presse. DOI: 10.1002/Jcc.23786.
8. T. Dudev, M. Devereux, M. Meuwly, C. Lim, J.-P. Piquemal, N. Gresh. Quantum-chemistry based calibration of the alkali metal cation series (Li+– Cs+) for large-scale polarizable molecular mechanics/dynamics simulations. *J. Comput. Chem.* (2015) Accepted.

#### Communications dans des congrès internationaux

1. Further progress in the developments of an anisotropic, molecular mechanics/dynamics potential. Applications to ligand-protein complexes and extensions to nucleic acids. In *Modeling and Design of Molecular Materials 2014*, Kudowa Zdroj, 29 juin-3 juillet, Pologne.

#### Thèses soutenues en 2014 sur le projet

- Modélisation de complexes d'inhibiteurs avec des protéines cibles. Applications à l'intégrase du VIH-1 et à la kinase CDK5. Thèse de Mlle Krystel El Hage, en cotutelle avec l'Université Saint-Joseph de Beyrouth et soutenue à Beyrouth le 28 Novembre 2014.

#### Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Mlle Lea El Khoury, en cotutelle avec l'Université Saint-Joseph de Beyrouth.

#### Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Jean-Philip Piquemal, Laboratoire de Chimie Théorique (LCT). Développements et applications de la méthode SIBFA de mécanique/dynamique moléculaires polarisables.
- Todor Dudev (Académie des Sciences de Taiwan; Professeur à l'Université de Sofia depuis 2013). Calibration dans SIBFA des cations alcalins Li+, Na+, K+, Rb+ et Cs+. Applications à la modélisation des canaux ioniques et de complexes supramoléculaires.
- Laurent Salmon. Laboratoire de Chimie Bioorganique et Bioinorganique, ICMMO, Université Paris-Sud. Modélisation de complexes d'inhibiteurs synthétisés au LCBO avec un métalloenzyme à Zinc, la phosphomannosidase. Tests biochimiques.

#### 4. Projet : 2002003

**Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses**

**Intitulé : Simulation numérique de l'interaction entre la lumière et un objet de forme complexe**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Claude ROZE

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 102 205

**Publications de rang A**

1. J. Yon, F. Liu, A. Bescond, C. Caumont-Prim, C. Rozé, F. X. Ouf, et al., Effects of multiple scattering on radiative properties of soot fractal aggregates, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, vol. 133, pp. 374-381, 2014.
2. M. Yang, K. F. Ren\*, Y Wu and X. Sheng, Computation of stress on the surface of a soft homogeneous arbitrarily shaped particle, *Phys. Rev. E*, 89, 043310, 2014

**Communications dans des congrès internationaux**

1. J. Yon, D. Hebert, A. Bescond, C. Rozé, A. Coppalle, and F. Liu, Role played by multiple scattering on the absorption and scattering properties of soot fractal aggregates, in *10th Intern. Conf. on Laser-light and Interactions with Particles (LIP 2014)*, Marseille, 2014.
2. J. Yon and F. Liu, Influence of the internal multiple scattering on the absorption and scattering properties of soot fractal aggregates, in *International Workshop and Meeting on Laser Induced Incandescence*, Cen, Sweden, 2014.
3. K. F. Ren\*, C. Rozé, Y Yuan, Vectorial Complex Ray Model – From Geometrical Optics to Ray Theory of Wave, *10th Intern. Conf. on Laser-light and Interactions with Particles (LIP 2014)*, Aug. 25-29th, 2014, Marseille (France) 2014
4. K. F. Ren, ABSphere - Software for calculation of all physical properties of any shaped beam by spherical particle, *10th Intern. Conf. on Laser-light and Interactions with Particles (LIP 2014)*, Aug. 25-29th, 2014, Marseille (France) 2014
5. Y. Wu, M. Yang, K. F. Ren\* and X. Sheng, Numerical computation of the scattering properties of a large arbitrarily shaped particle by BY MLFMA and VCRM, *10th Intern. Conf. on Laser-light and Interactions with Particles (LIP 2014)*, Marseille (France), Aug. 25-29th, 2014

**Thèses soutenues en 2014 sur le projet**

- Minglin YANG, Computation of light scattering, radiation force, torque and stress of large non-spherical particles with Multilevel Fast Multipole Algorithm and Vectorial Complex Ray Model, Manuscript, 9 December 2014

**Thèses en cours sur le projet**

- Alexandre Bescond (débutée le 1/10/2012 fin prévue en 2015), encadrée par C. Rozé et J. Yon : Développement de moyens de métrologie optique in-situ dédiés à la caractérisation des grandeurs microphysique des particules de suie en phase gaz.
- Zelong MA (débutée le 1/10/2014 fin prévue en 2017), encadrée par K. F. Ren et C. Rozé : Extension du modèle de Tracé de Rayons Vectoriels Complexes et application à la caractérisation d'une particule non-sphérique

**Stages de Master en 2014 sur le projet**

- Zelong MA (1/3/2014-31/08/2014), encadrée par K. F. Ren et C. Rozé : Validation Expérimentale du Modèle de Tracé de Rayons Vectoriels Complexes
- Mohammed GOUMINE (1/3/2014-31/08/2014), encadrée par K. F. Ren et C. Rozé : Simulation d'image d'un jet atomisé par le Modèle de Tracé de Rayons Complexes

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Collaboration avec le NRC, laboratoire Canadien et en particulier avec F. Liu sur les propriétés radiatives des particules de suie.
- Collaboration avec 2 laboratoires français : UMR 7343 CNRS/Aix-Marseille Université et CRPP CNRA/ Bordeaux et une université chinoise : Beijing Institute Technology sur le calcul de l'interaction de la lumière avec des grosses particules non-sphériques.

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

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

Porteur : Alain BERLEMONT

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY )

Heures.CPU 2014 : 1 023 239

**Publications de rang A**

1. W. Aniszewski , T. Menard , M. Marek, Volume of Fluid (VOF) type advection methods in two-phase flow: a comparative study. *Computers & Fluids*. Vol 97, 52-73, 2014

**Communications dans des congrès internationaux**

1. S. Vincent , L. Osmar, J.-P. Caltagirone, J.-L. Estivalezes, S. Zaleski, Y. Ling, T. Menard, A. Berlemont, W. Aniszewski, F. Auguste J. Magnaudet, Interface tracking methods applied to phase separation *ICNMMF 2014*, Darmstadt Germany June 2014
2. S. Vincent , L. Osmar, J.-P. Caltagirone, J.-L. Estivalezes, S. Zaleski, Y. Ling, T. Menard, A. Berlemont, W. Aniszewski, F. Auguste J. Magnaudet, Interface tracking methods applied to phase separation *FEDSM2014*, Chicago, USA, August 3-7, 2014
3. G. Vaudor, A. Berlemont, T Ménard, M. Doring A Consistent mass and momentum flux computation using Rudman type technique with a CLSVOF solver, *FEDSM2014*, Chicago, USA, August 3-7, 2014

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse de Geoffroy Vaudor (soutenance début 2015).
- Thèse de V. Thanh Trung

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Grégory PINON

Laboratoire : LOMC UMR 6294 CNRS - Univ. Le Havre

Heures.CPU 2014 : 310 338

**Publications de rang A**

1. Paul Mycek, Grégory Pinon, Grégory Germain, and Elie Rivoalen. Formulation and analysis of a diffusion velocity particle model for transport-dispersion equations. *Computational and Applied Mathematics*, vol : 1– 27, 2014.
2. Paul Mycek, Benoît Gaurier, Grégory Germain, Grégory Pinon, and Elie Rivoalen. Experimental study of the turbulence intensity effects on marine current turbines behaviour. part I : One single turbine. *Renewable Energy*, 66(0) :729 – 746, 2014.
3. Paul Mycek, Benoît Gaurier, Grégory Germain, Grégory Pinon, and Elie Rivoalen. Experimental study of the turbulence intensity effects on marine current turbines behaviour. part II : Two interacting turbines. *Renewable Energy*, 68(0) :876 – 892, 2014.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. A. Rivier, A.C. Bennis, V. Magar, G. Pinon, and M. Gross. Regional numerical modelling of offshore wind turbines impact on hydrodynamics and sediment transport. In *Proceedings of 1st International Conference on Renewable Energies Offshore (RENEW 2014)*, November 2014. Lisbon, Portugal.
2. I. García-Hermosa, J. Brossard, Z. Cohen, G. Perret, G. Pinon, N. Abcha, A. C. Bennis, A. Ezersky, D. Mouazé, A. Rivier, G. Iglesias, J. Miles, C. Rogan, D. Simmonds, M. Gross, and V. Magar. Experimental

- characterisation of wave induced flow fields due to an offshore wind farm mast. In *Proceedings of 1st International Conference on Renewable Energies Offshore (RENEW 2014)*, November 2014. Lisbon, Portugal.
3. X. Z. Lu, J-M. Cherfils, G. Pinon, E. Rivoalen, and J. Brossard. SPH Numerical computations of wave impact onto a vertical wall. In *9th international SPHERIC workshop*, June 2014. Paris, France.
  4. C. Rogan, A. C. Bennis, M. Hermosa, G. Iglesias, V. Magar, J. Miles, G. Perret, G. Pinon, A. Rivier, and D. Simmonds. Physical and numerical modelling of hydrodynamics and sediment transport at monopile foundations. In *Partnership for Research in Marine Renewable Energy (PRIMaRE) 1st Annual Conference*, June 2014. Plymouth, UK.

#### Communications dans des congrès nationaux

1. C. Carlier, G. Pinon, P. Mycek, B. Gaurrier, G. Germain, and E. Rivoalen. Caractérisation expérimentale et numérique d'hydroliennes : étude de deux hydroliennes en interaction. In *14èmes Journées de l'Hydrodynamique*, Novembre 2014. Val de Reuil, France.
2. A. Rivier, A.C. Bennis, V. Magar, G. Pinon, and M. Gross. Modélisation numérique régionale de l'impact des éoliennes offshore sur l'hydrodynamique et le transport sédimentaire. In *14èmes Journées de l'Hydrodynamique*, Novembre 2014. Val de Reuil, France.
3. I. García-Hermosa, J. Brossard, Z. Cohen, G. Perret, N. Abcha, A. C. Bennis, A. Ezersky, M. Gross, G. Iglesias, V. Magar, J. Miles, D. Mouazé, G. Pinon, A. Rivier, C. Rogan, and D. Simmonds. Experimental characterisation of wave induced flow fields due to an offshore wind farm mast. In *14èmes Journées de l'Hydrodynamique*, Novembre 2014. Val de Reuil, France.
4. X. Z. Lu, J.M. Cherfils, G. Pinon, E. Rivoalen, and J. Brossard. Modélisation par la méthode sph de l'impact de la houle sur une paroi verticale. In *XIIIèmes Journées Nationales Génie Côtier Génie Civil*, Juillet 2014. Dunkerque, France.

#### Thèses en cours sur le projet

- Débutée Janv. 2014 : Clément Carlier, Simulation du comportement d'hydroliennes dans des conditions de fonctionnement réaliste, Thèse co-financée Région Haute Normandie / IFREMER.
- Débutée Nov. 2012 : Xuezhou Lu, Simulations numériques de l'action de la houle sur des ouvrages marins de récupération d'énergie dans des conditions hydrodynamiques sévères, Thèse financée par une bourse régionale Région Haute Normandie.

#### Stages de Master en 2014 sur le projet

- Stage de Lei Cao, oct. 2014 - fév. 2015 : Simulation numérique de l'écoulement autour d'une plaque plane dans la houle. Stage de 4ème année UTC / Shanghai.

#### Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- **Projet de recherche collaborative avec IFREMER.** Action lancée en 2008 dans le cadre d'une thèse en co-encadrement IFREMER et Université du Havre, poursuivie par un programme de recherche sur la modélisation numérique des performances d'une hydrolienne ainsi que du sillage de celle-ci, puis actuellement par la modélisation d'interaction d'hydroliennes dans un parc. Environ 10 personnes impliquées dans le projet, une thèse initiée en janvier 2014, une délégation IFREMER à 50% pour l'année 2014-2015 (G. Pinon).
- **Projet national EMACOP, Budget 4,7 million Euros.** Le projet national EMACOP (Energies MARine COtières et Portuaires) en collaboration avec EDF, le CETMEF, l'ECN, l'ENPC, l'UPPA entre autres. Objectif du projet : apporter une meilleure compréhension des phénomènes physiques et mécaniques liés à l'implantation de systèmes de récupération d'énergie marine sur les structures portuaires et côtières (digues, etc.). Contribution LOMC (G. Pinon) : responsable scientifique sur la partie modélisation numérique. Travaux sur la survivabilité des récupérateurs et des digues lors de phénomènes extrêmes (très forte houle, tempête, etc.) ; approche par la méthode SPH.
- **Projet européen INTERREG 4A : OFELIA, Budget de 1 million Euros,** Le projet OFELIA (Offshore Foundation Environmental Impact Assessment) est porté par l'université de Plymouth (UK) en partenariat avec l'Université de Caen Basse Normandie (Anne-Claire Bennis) et l'Université du Havre (Grégory Pinon, Aurélie Rivier, post-doctorante). Objectif du projet : étudier l'évaluation en terme d'impact

environnemental des parcs éoliens offshore ; risques d'affouillement en pied de fondation offshore et modifications hydrodynamiques associées. Contribution : modélisation numérique des sillages de fondation d'éolienne offshore. Modèle numérique : MARS 3D.

**7. Projet : 2004004**

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Jacques MADDALUNO

Laboratoire : IRCOF (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2014 : 37 929

voir projet 2011001

**8. Projet : 2005003**

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

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Denis LEDUE

Laboratoire : GPM UMR CNRS 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 1 060

**Publications de rang A**

1. Effects of dimensionality and spatial distribution on the magnetic relaxation of interacting ferromagnetic nanoclusters: a Monte Carlo study" D. Brinis, A. Laggoun, D. Ledue, R. Patte, *Journal of Applied Physics* 115, 173906 (2014)
2. Magnetization switching of interacting ferromagnetic nanocluster assemblies, D. Brinis, D. Ledue, A. Laggoun, R. Patte, *Physics Procedia* 54, 75 (2014)

**Communications dans des congrès internationaux**

1. D. Brinis, D. Ledue, A. Laggoun, R. Patte, Magnetization reversal investigated by Monte Carlo simulation in interacting nanoclusters, In *Conférence internationale sur les Matériaux magnétiques et leurs applications (MagGMA 2014)*, Université de Pondicherry, Inde, 15-17/09/2014)

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse de D. Brinis, en co-tutelle avec l'Université de Boumerdes, Algérie

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- H. Kachkachi, Responsable du groupe « Systèmes de Spins à l'Echelle Nanométrique (S2N) », Laboratoire PROMES - CNRS UP8521, Université de Perpignan Via Domitia (UPVD)
- Laggoun, Co-directeur de thèse, Unité de Recherche MPE, Université de 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 - Université de Caen Basse-Normandie (CAEN)

Heures.CPU 2014 : 420 114

**Brevet**

- Poulain L., Voisin-Chiret A. S., Sopkova- de Oliveira Santos J., Bureau R., Burzicki G., De Giorgi M., Perato S., Fogha J., Rault S., Juin Ph., Gautier F. Mcl-1 modulating compounds for cancer treatment. EP14305309.8. 2014.

**Publications de rang A**

1. Neveu C., Dulin F., Lefranc B., Galas L., Calbrix C.; Bureau R.; Rault S.; Chuquet J.; Boutin J., Guilhaudis L.; Ségalas-Milazzo I., Vaudry D., Vaudry H., Sopkova-de Oliveira Santos J., Leprince J. Molecular basis of agonist docking in a human GPR103 homology model by site-directed mutagenesis and structure-activity relationship studies. *British Journal of Pharmacology* (accepted).
2. Rezg R., Mornagui B., Sopkova-de Oliveira Santos J., Dulin F., El-Fazaa S., Ben El-haj N., Bureau R. & Gharbi N. Protective effects of caffeic acid against hypothalamic neuropeptides alterations induced by malathion in rat. *Environ Sci Pollut Res*.
3. Gloaguen, Voisin-Chiret, Sopkova-de Oliveira, Fogha, Gautier, De Giorgi, Burzicki, Perato, Pétigny-Lechartier, Simonin-Le Jeune, Brotin, Goux, N'Diaye, Lambert, Louis, Juin, Bureau, Rault, Poulain J. *Med. Chem. Révisions* soumises, 2014.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. C. Jamous Delépée, A. Lepailleur, J. Sopkova-de Oliveira Santos, R. Bureau. Drawing a parallel between the antagonist pharmacophore model of UT and the agonist docking studies. *The XXII Conference of the Groupement des Pharmacochimistes de l'Arc Atlantique (GP2A)*, Août 2014, Nantes, France (communication orale).
2. J. Leprince, F. Dulin, C. Neveu, L. Galas, B. Lefranc, J. Chuquet, D. Vaudry, R. Bureau, J. Sopkova-de Oliveira Santos, Hubert Vaudry. Agonist docking in a GPR103 homology model: site-directed mutagenesis and structure-activity relationship studies. *Frontiers of Chemical Biology : Investigating Life with Chemistry, ITMO BMSV*, Paris, France, June 6th 2014.  
C. Jamous Delépée, J. Sopkova-de Oliveira Santos, F. Dulin, A. Lepailleur, E. Haensele, L. Banting, D. Whitley, T. Clark, and R. Bureau. Nonpeptide ligands of Arginine Vasopressin receptor (V2R) : Docking study and conformational analysis. *Chemoinformatics Strasbourg Summer School*, Strasbourg, France, 23-27 June 2014.
3. A. Lepailleur, C. Jamous Delépée, J. Sopkova-de Oliveira Santos, I. Milazzo, H. Castel, F. Dulin, E. Haensele, L. Banting, D. Whitley, T. Clark, J. Essex and R. Bureau. Peptide and non-peptide ligands of the Urotensin Receptor. Conformational analysis and definition of pharmacophores. *Chemoinformatics Strasbourg Summer School*, Strasbourg, France, 23- 27 June 2014.
4. J. Leprince, F. Dulin, C. Neveu, L. Galas, B. Lefranc, J. Chuquet, D. Vaudry, R. Bureau, J. Sopkova-de Oliveira Santos, H. Vaudry. Docking of 26RFa(19-26) in a GPR103 homology model and experimental validation by site-directed mutagenesis and structure-activity relationship studies. *50th International Conference on Medicinal Chemistry – Interfacing Chemical Biology and Drug Discovery, RICT 2014*, July 2-4 2014, Rouen, France.
5. Fogha J., Voisin-Chiret A.-S, Burzicki G., De Giorgi M., Perato S., Bureau R., Gloaguen C., Juin P., Poulain L., Rault S., Sopkova-de Oliveira Santos J. Discovery of Oligopyridyl Scaffolds as potent Mcl-1 Inhibitors. *50th International Conference on Medicinal Chemistry – Interfacing Chemical Biology and Drug Discovery, RICT 2014*, July 2-4 2014, Rouen, France.
6. J. Sopkova-de Oliveira Santos, C. Jamous Delépée, F. Dulin, A. Lepailleur, E. Haensele, T. Clark, R. Bureau. Molecular Modeling Study of the Vasopressin/ Vasopressin Receptor V2 Complex. *50th International*

*Conference on Medicinal Chemistry – Interfacing Chemical Biology and Drug Discovery, RICT 2014, July 2-4 2014, Rouen, France.*

### **Communications dans des congrès nationaux**

1. Fogha J., Voisin-Chiret A.-S., Burzicki G., De Giorgi M., Perato S., Bureau R., Gloaguen C., Juin P., Poulain L., Rault S., Sopkova-de Oliveira Santos J. An in silico approach for Mcl-1 inhibitors discovery. *Journées de l'Ecole Doctorale*, 10-11 avril 2014, Havre, France (communication orale).
2. Fogha J., Voisin-Chiret A.-S., Burzicki G., De Giorgi M., Perato S., Bureau R., Gloaguen C., Juin P., Poulain L., Rault S., Sopkova-de Oliveira Santos J. Discovery of Oligopyridyl Scaffolds as potent Mcl-1 Inhibitors. *Journées des Jeunes Chercheurs*, 24-25 mars 2014, Montpellier, France (communication orale).

### **Thèses soutenues en 2014 sur le projet**

- Jade Fogha Ngwemeta : Les interactions Protéines-Protéines comme sources de conception de nouveaux médicaments anti-cancéreux (soutenance 21.10.2014)

### **Thèses en cours sur le projet**

- Karima Alim : Etudes moléculaires du système 26RFa-GPR103 par une approche pharmacochimique. (co-encadrement, financement de la Région Haute-Normandie au titre des grands réseaux de Recherches CBS)
- Clémence Riva: Mise en évidence de nouveaux composés anti-varroas (50% région Basse-Normandie, 50% VetoPharma) (co-direction)

### **Stages de Master en 2014 sur le projet**

- Abdenour Braka (stage M2). Conception de nouveaux ligands multi-cibles par modélisation moléculaire : application à la maladie d'Alzheimer.

### **Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

Projet Régional Basse Normandie Emergence - porteur A. S. Voisin-Chiret

- CERMN (Prof S. Rault, Dr AS Voisin-Chiret, Dr M. Di Giorgi)
- BioTICLA Unit, Centre François Baclesse, EA4656, Caen (Dr L. Poulain)
- UMR 892 Inserm - 6299 CNRS Nantes (Dr P. Juin, Dr F. Gautier)

Projet Canceropôle Nord Ouest- porteur A. S. Voisin-Chiret

- UMR 6014 CNRS, Rouen (Prof H. Oulyadi, Dr M. Seban)
- CERMN (Prof S. Rault, Dr AS Voisin-Chiret, Dr M. Di Giorgi)
- BioTICLA Unit, Centre François Baclesse, EA4656, Caen (Dr L. Poulain)
- UMR 892 Inserm - 6299 CNRS Nantes (Dr P. Juin, Dr F. Gautier)
- UPMC-CNRS-ENS, Université Paris 6 (Dr. L. Carlier)

Projet Interegg PeReNE – porteur D. Vaudry

- Unité INSERM U413, Rouen (Dr H. Vaudry, Dr J. Leprince)
- Unité INSERM U413, Rouen (Dr H. Castel)
- UMR 6014 CNRS, Rouen (Prof I. Ségalas-Milazzo, Dr L. Guilhaudis)
- Université de Portsmouth (Prof T. Clark)
- Université de Southampton (Prof J. W. Essex)

ANR Jeunes Chercheurs MALAD – porteur C. Rochais

- CERMN (Prof P. Dallemagne, Dr C. Rochais, Dr D. Karila)
- GMPc, Université de Caen Basse-Normandie (Prof M. Boulouard)

**10. Projet : 2005010****Intitulé : Etude par modélisation moléculaire d'analogues du KRN7000 en association avec la protéine hôte human CD1d, et reconnaissance par le récepteur TCR**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Eric HENON

Laboratoire : ICMR – UMR CNRS 7312 (REIMS)

Heures.CPU 2014 : 4 707

**Publications de rang A**

1. Xavier Laurent, Nicolas Renault, Amaury Farce, Philippe Chavatte, and Eric Hénon\*, Relationships between Th1 or Th2 iNKT cell activity and structures of CD1d-antigen complexes: Meta-analysis of CD1d-glycolipids dynamics simulations, *PLOS Computational Biology* 10 (2014), e1003902
2. Xavier Laurent, Benjamin Bertin, Nicolas Renault, Amaury Farce, Silvia Specca, Ophélie Milhomme, Régis Millet, Pierre Desreumaux, Eric Hénon, and Philippe Chavatte\*, Switching Invariant Natural Killer T (iNKT) Cell Response from Anticancerous to Anti-Inflammatory Effect: Molecular Bases, *Journal of Medicinal Chemistry* 57 (2014), 548
3. Chantal Barberot, Jean-Charles Boisson, Stéphane Gérard, Hassan Khartabil, Eddy Thiriout, Gérald Monard, and Eric Hénon \*, AlgoGen: a tool coupling a linear scaling-quantum method with a genetic algorithm for exploring non-covalent interactions, *Comp. Theor. Chem.* 1028 (2014), 7-18
4. Julie Langeron, Alodie Blondel, Stéphanie Sayens, Eric Hénon, Michel Couderchet, and Emmanuel Guillon\*, Molecular properties affecting the adsorption coefficient of pesticides from various chemical families, *Environmental Science and Pollution Research* 21 (2014), 9727
5. Claire Coiffier, Chantal Barberot, Jean-Marc Nuzillard, Peter Goekjian, Eric Hénon \* and Arnaud Haudrechy, A Ring Dihedral Principal Component Analysis of furanose conformation, *Carbohydrate Chemistry - Chemical and Biological Approaches* 40 (2014), 378-400

**Communications dans des congrès internationaux**

1. S. Canneaux, F. Bohr et E. Hénon, Kisthelp : un programme pour la prédiction de propriétés thermodynamiques et le calcul de constantes de vitesse à partir de résultats de chimie quantique, *14ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones*, Paris, France, 30 juin – 4 juillet 2014, <http://rctf2014.sciencesconf.org/42971>
2. Peter Goekjian, Arnaud Haudrechy and Eric Hénon, Ring dihedral Principal Component Analysis of furanose conformation, *14ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones*, Paris, France, 30 juin – 4 juillet 2014, <http://rctf2014.sciencesconf.org/42972>

**Communications dans des congrès nationaux**

1. X. Laurent, N. Renault, A. Farce, P. Chavatte, et E. Hénon, Conception d'activateurs du système immunitaire: méta-analyse de simulations de complexes CD1d-glycolipides, *Journée MésoChallenges*, Paris, France, 8 octobre 2014
2. X. Laurent, N. Renault, A. Farce, P. Chavatte, et E. Hénon, Conception d'activateurs du système immunitaire: méta-analyse de simulations, *journee scientifique du centre de calcul de Champagne-Ardenne*, Reims, France, 12 Juin 2014, [https://romeo.univ-reims.fr/news/180/Journee\\_ROMEO\\_le\\_12\\_juin\\_2014](https://romeo.univ-reims.fr/news/180/Journee_ROMEO_le_12_juin_2014)

**Stages de Master en 2014 sur le projet**

- Abdenour Braka (stage M2). Conception de nouveaux ligands multi-cibles par modélisation moléculaire : application à la maladie d'Alzheimer.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Institut de Chimie Pharmaceutique Albert Lespagnol (ICPAL), Lille, Collaborateurs : P. Chavatte, R. Millet



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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Isabelle CHATAIGNER

Laboratoire : UMR CNRS 6014 COBRA (MONT-SAINT-AIGNAN )

Heures.CPU 2014 : 20 155

**Publications de rang A**

1. Andreini, M.; De Paolis, M.; Chataigner, I. *Cat Commun.* 2014, DOI : 10.1016/j.catcom.2014.07.042

**Communications dans des congrès internationaux**

1. 09/14 : JCO Tunisien, 12-14 septembre 2014, Hammamet (Tunisie), «Reactivity of electron-poor arenes towards ylides and electron-rich alkenes (Communication orale)
2. 09/14 : FJS 2014 – 14-17 septembre 2014, Lyon (France), « Reactivity of Electron-poor Arenes Towards Ylides and Electron-rich Alkenes” (Communication par affiche).

**Thèses soutenues en 2014 sur le projet**

- Hoai Thu Pham, Université de Caen, soutenance le 17/12/14 « New Approaches To Functionalized Dihydropyridines And Application In Cycloaddition »

**Thèses en cours sur le projet**

- Maxime Beuvin, Université de Rouen, soutenance prévue le 30/01/15 « Dérivés benzéniques comme composants à deux électrons en cycloadditions : nouveaux processus désaromatisants.
- Karine Pasturaud, Université de Rouen, 2ème année de thèse

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Programme de collaboration avec Jean-Luc Renaud (LCMT, UMR CNRS 6507, Caen). Etude de réactions de cycloadditions impliquant des dihydropyridines.  
Co-direction de la thèse de Hoai Thu Pham
- Programme de collaboration avec Hélène Gérard (LCT, UMR CNRS 7616, UPMC) Etude théorique DFT.
- Programme de collaboration avec Cyrille Kouklovsky (ICMMO, UMR 8182, Université de Paris-Sud, Orsay). Etude de réactions nitrosocycloadditions

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

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

Porteur : Cristelle PAREIGE

Laboratoire : GPM UMR 6634 CNRS (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 73

**Publications de rang A**

1. J. Emo, C. Pareige, S. Saillet, C. Domain, P. Pareige, "Kinetic of secondary phase precipitation during spinodal decomposition in duplex stainless steels: a kinetic Monte Carlo model - comparison to atom probe experiments", *J. Nucl. Mater.* 451 (2014) 361-365

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Cristelle Pareige, Jonathan Emo, Sébastien Saillet, Christophe Domain, Philippe Pareige, Nano-scale study of phase separation in ferrite of long term thermally aged Mo-bearing duplex stainless steels – Atom probe tomography and Monte Carlo simulation, *Fontevraud 8, Contribution of Materials Investigations and Operating Experience to LWRs' Safety, Performance and Reliability*, France, Avignon – 2014, September

**Thèses soutenues en 2014 sur le projet**

- "Etude expérimentale et par simulation Monte Carlo des transformations de phase dans la ferrite des aciers austéno-ferritiques et de leurs alliages modèles" – J. Emo. Soutenue le 17 décembre 2014

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- EDF R&D Département Matériaux et Mécanique des Composants, Avenue des Renardières - Ecuelles, F-77250 Moret sur Loing, France. Chercheurs : C. Domain, S. Saillet

**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 2014 : 2 584 136

**Publications de rang A**

1. G. Lodato, P. Castonguay, A. Jameson (2014) Structural wall-modeled {LES} using a high-order spectral difference scheme for unstructured meshes, *Flow, Turbulence and Combustion*, 2014, 92:579-606.
2. A. Jameson et G. Lodato (2014), A note on the numerical dissipation from high-order discontinuous finite element schemes, *Computers & Fluids*, vol. 98.
3. B. Farcy, A. Abou-Taouk, L. Vervisch, P. Domingo, N. Perret, (2014), Two approaches of chemistry downsizing for simulating Selective Non Catalytic Reduction DeNOx Process}, *Fuel*, 118: 291-299,
4. S. Nambully, P. Domingo, V. Moureau, L. Vervisch (2014), Part I: Filtered Laminar Flame PDF model for turbulent premixed flames: Differential diffusion modeling in LES of premixed flames}, *Combust. Flame*, 161(7): 1756-1774.
5. S. Nambully, P. Domingo, V. Moureau, L. Vervisch (2014), Part II: Filtered laminar flame PDF model for turbulent stratified flames, *Combust. Flame*, 161(7): 1775-1791.
6. G. Ribert, L. Vervisch, P. Domingo, Y.-S. Niu (2014) Hybrid transported-tabulated strategy to downsize detailed chemistry for numerical simulation of premixed flames, *Flow Turbulence and Combustion*, 92(1/2): 175-200.
7. B. Denet, L. Biamino, G. Lodato, L. Vervisch, P. Clavin (2014) Model equation for the dynamics of wrinkled shock waves. Comparison with DNS and experiments. *Combust. Sci. Tech.*, in press.
8. L. Cifuentes, C. Dopazo, J. Martin, P. Domingo, L. Vervisch (2014) Local volumetric dilatation rate and scalar geometries in a premixed methane-air turbulent jet flame. *Proc. Combust. Inst.*, in press.
9. P. Domingo, L. Vervisch (2014) Large Eddy Simulation of premixed turbulent combustion using approximate deconvolution and explicit flame filtering. *Proc. Combust. Inst.*, in press.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. G. Ribert, L. Bouharaoua, P. Domingo, Large eddy simulation of a supersonic burner. *52nd AIAA ASM Conference*, National Harbor, Maryland (USA), 2014, AIAA-2014-0311.
2. B. Farcy, P. Domingo, L. Vervisch, Analysis of NOx treatment by ammonia in a turbulent flow. *10th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements*, Marbella, Spain, 17-19 September 2014.
3. P. Domingo, L. Vervisch, Approximate deconvolution and explicit filtering for LES of a premixed turbulent jet-flame, *10th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements*, Marbella, Spain, 17-19 September 2014.
4. P. Domingo, L. Vervisch, Deconvolution and explicit filtering for LES of a premixed turbulent jet-flame, *SPEIC 2014, Toward Sustainable Combustion*, Lisbonne, 19-21 octobre 2014.

**Thèses soutenues en 2014 sur le projet**

- Xavier Petit, Etude de l'interaction cinétique chimique/turbulence dans une flamme cryotechnique LOx/CH<sub>4</sub>, soutenue en avril
- Lisa Bouheraoua, Simulation aux grandes échelles et modélisation de la combustion supersoniques, soutenue en décembre

**Thèses en cours sur le projet**

- Eurielle Bossenec encadrants L. Vervisch / G. Lodato
- Damien Midou encadrants L. Vervisch / P. Domingo
- Nicolas Jaouen encadrants P. Domingo/L. Vervisch
- Benjamin Farcy encadrants L. Vervisch / P. Domingo
- Bastien Duboc encadrants P. Domingo/G. Ribert
- Umut Ulven encadrant G. Ribert

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

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

Porteur : Helena ZAPOLSKY

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 44 917

**Communications dans des congrès internationaux**

1. H. Zapolsky, M. Lavrskyi, R. Patte, F. Danoix & A.G. Khachaturyan, Modeling of carbon diffusion in Fe-C martensite, in *143th annual meeting of The Minerals, Metals and Materials Society TMS2014*, San Diego, 2014.
2. H. Zapolsky, M. Lavrskyi, R. Patte, A.G. Khachaturyan, Linking phase field crystal and phase field models, *1st Internatioanal Workshop on Software solutions for Integrated Computational Materials Engineering ICME*, Rodluc, 2014-12-01
3. H.Zapolsky, Kinetic of Pattern Formation : from mesoscopic to microscopic approach, AIM, Madrid, 2014.
4. H. Zapolsky, M. Certain, M. Lavrskyi & A.G. Khachaturyan, Atomic scale modeling of austenite-martensite transformation, *Third International Symposium on Phase-field Method PFM-2014*, August 26-29, 2014, State College, Pennsylvania.

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

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

Porteur : François-Xavier DEMOULIN

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY )

Heures.CPU 2014 : 348 892

**Communications dans des congrès internationaux**

1. N. Hecht, F.X Demoulin and J. Reveillon, Towards general purpose LES model of injection and Atomization, in *26th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems ILASS 2014* Breme
2. N. Lu, J. Reveillon, Y. Meslem, and F.X. Demoulin, Modelling Cavitation and Flash Atomization, in *ASME 4th Joint US-European Engineering Division Summer Meeting*. 2014: Chicago, Illinois.
3. N. Lu, F.X. Demoulin, J. Reveillon, and J. Chesnel, Large Eddy Simulation of Cavitation and Atomization in Injector Flows using OpenFOAM in *26th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems ILASS 2014* 2014: Bremen, Germany

**16. Projet : 2006013****Intitulé : Étude du mécanisme de réactions catalysées par les complexes des métaux de transition et du groupe principal.**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Vincent GANDON

Laboratoire : ICMO, UMR CNRS 8182, Université Paris-Sud, bâtiment 420, 91405 Orsay cedex

Heures.CPU 2014 : 24 217

**Publications de rang A**

1. Lalli, C.; Dumoulin, A.; Lebée, C.; Drouet, F.; Guérineau, V.; Touboul, D. ; Gandon, V.; Zhu, J.; Masson, G., Chiral Calcium-BINOL Phosphate Catalyzed Diastereo- and Enantioselective Synthesis of syn-1,2-Disubstituted 1,2-Diamines: Scope and Mechanistic Studies. *Chem. Eur. J.* 2014, 20, DOI: 10.1002/chem.201405286.
2. Hentz, A.; Retailleau, P.; Gandon, V.; Cariou, K.; Dodd, R. H, Transition Metal-Free Tunable Chemoselective N-Functionalization of Indoles with Ynamides. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2014, 53, 8333.
3. Bour, C.; Monot, J.; Tang, S.; Guillot, R.; Farjon, J.; Gandon, V. Structure, Stability, and Catalytic Activity of the Fluorine-Bridged Complexes  $\text{IPr}^*\text{GaCl}_2(\mu\text{-F})\text{EFn-1}$  [EFn- =  $\text{SbF}_6^-$ ,  $\text{PF}_6^-$ ,  $\text{BF}_4^-$ ]. *Organometallics*, 2014, 33, 594
4. Bouladakis-Arapinis, M.; Gandon, V.; Prost, E.; Micouin, L.; Lecourt, T., Electronic Effects in Carbene-Mediated C-H Bond Functionalization: An Experimental and Theoretical Study. *Adv. Synth. Catal.* 2014, 356, 2493.

**17. Projet : 2007001****Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Florent LOUIS

Laboratoire : PC2A - UMR CNRS 8522 Université de Lille 1 (VILLENEUVE D'ASCQ)

Heures.CPU 2014 : 31 209

**Publications de rang A**

1. SUDOLSKA M., LOUIS F., CERNUSAK I. Reactivity of  $\text{CH}_3$  with OH Radicals: X-Abstraction Reaction Pathways (X = H, I), Atmospheric Chemistry, and Nuclear Safety, *Journal of Physical Chemistry A*, Volume 118, 9512-9520, 2014

**Communications dans des congrès internationaux**

1. LOUIS F., FORTIN C., ŠKOVIERA J., CANTREL L., ČERNUSÁK I., A theoretical study of the microhydration processes of nitrogen iodine oxides: Implications for atmospheric chemistry and nuclear safety, In *Central European Symposium on Theoretical Chemistry*, 21-25 septembre 2014, Nagybörzsöny (Hongrie)
2. MIRADJI F., LOUIS F., VALLET V., SOUVI S., CANTREL L. Thermochemistry of gaseous ruthenium compounds in case of severe accident in a nuclear pressurized water reactor, In *14ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones*, 30 juin - 4 juillet 2014, Paris
3. ALLOUTI F., LOUIS F., CANTREL L., Etude théorique de la chimie du cadmium dans le circuit primaire d'un réacteur nucléaire à eau pressurisée, In *14ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones*, 30 juin - 4 juillet 2014, Paris
4. ŠULKOVÁ K., CANTREL L., LOUIS F., A theoretical study of the kinetics of gas-phase elementary reactions containing caesium species of nuclear safety interest, In *Central European Symposium on Theoretical Chemistry*, 21-24 Septembre 2014, Nagybörzsöny (Hongrie)

**Thèses en cours sur le projet**

- Etude théorique de la formation de clusters CsxHy. Jan Skoviera (2012-2015, thèse co-tutelle, France/Slovaquie).
- Etude du comportement du ruthénium lors de son transport dans le circuit primaire. Faoulat Miradji (2013–2016, bourse IRSN).

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Université Comenius de Bratislava : groupe du professeur ČERNUSÁK.

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

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

Porteur : Sébastien PETIT

Laboratoire : CRISMAT - UMR 6508 CNRS ENSICAEN UCBN (CAEN)

Heures.CPU 2014 : 97 601

**Publications de rang A**

1. K. Singh, Ch. Simon, E. Cannuccia, M.-B. Lepetit, B. Corraze, E. Janod et L. Cario, Orbital ordering driven multiferroicity and magnetoelectric coupling in GeV4S8, *Phys. Rev. Letters*, 113, 137602 (2014)
2. A. Markovits et M.-B. Lepetit, *L'actualité chimique* 382-383, 29 (2014)

**Thèses en cours sur le projet**

- Aysegül Begüm KOCAK, thèse en cotutelle Université de Grenoble et Université de Liège (Belgique).

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

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

Porteur : Abdenacer IDRISSE

Laboratoire : LASIR UMR CNRS 8516 - Université de Lille 1 (VILLENEUVE D'ASCQ)

Heures.CPU 2014 : 16 425

**Publications de rang A**

1. Rodolphe Vuilleumier, Ari Paavo Seitsonen, Nicolas Sator and Bertrand Guillot, Structure, equation of state and transport properties of molten calcium carbonate (CaCO<sub>3</sub>) by atomistic simulations, *Geochimica et Cosmochimica Acta* 141, 547-566 (2014); <http://dx.doi.org/10.1016/j.gca.2014.06.037>
2. A. Idrissi, B. Marekha, M. Barj, P. Jedlovsky, Thermodynamics of mixing water with dimethyl sulfoxide, as seen from computer simulations, *J Phys Chem B* 118 (2014) 8724 - 8733
3. Abdenacer Idrissi, B. Marekha, M. Kiselev and Pál Jedlovsky, The local environment of the molecules in water-DMAS mixtures, as seen from computer simulations and Voronoi polyhedra, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2015) 17, 3470-3481

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Polymorph control using supercritical CO<sub>2</sub>: the case of paracetamol the International Scientific Conference : *Kinetics and Mechanisms of Crystallization. Crystallisation as a mode of matter self-organization*, 24-27 June 2014 Ivanovo, Russia

**Thèses en cours sur le projet**

- Bogdan Marekha : Microscopic Structure and Dynamics in Mixtures of Imidazolium-Based Ionic Liquids with Polar Aprotic Solvents : NMR, Raman Spectroscopy and Molecular Modeling.

**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 2014 : 1 801 238

**Publications de rang A**

1. M. Sjostrand-Cuif & Y. D'Angelo, DNS Analysis of a cubic meso-scale combustion chamber : I. Cold flow topology & dynamics. Accepté à *European Journal of Mechanics - B/Fluids*.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. P . Bénard, V . Moureau, G. Lartigue, Y . D'Angelo, In *35th International Symposium on Combustion*, San Francisco, 2014.
2. P. Bénard, V. Moureau, G. Lartigue, Y. D'Angelo, In *10th International ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, ETMM* Marbella Septembre 2014
3. P . Bénard, V . Moureau, G. Lartigue, Y . D'Angelo, In *19th Australasian Fluid Mechanics Conference (AFMC)*, 2014

**Communications dans des congrès nationaux**

- P. Benard CRCT Paris, Ecole Centrale, Mars 2014 Thèses soutenues en 2014 sur le projet
- C Gruselle, Etude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration. Rôle de la stratification et des EGR, soutenance le 22 Janvier 2014

**Thèses en cours sur le projet**

- P. Benard, Etude numérique d'une chambre de combustion centimétrique, soutenance prévue en juin 2015

**Stages de Master en 2014 sur le projet**

- V. Srinavavongs, Combustion turbulente : une approche par EEM pour la LES, soutenance juillet 2014
- L. Boulet , LES/DNS vs EEM pour une flamme laminaire, application à la modélisation de sous-maille pour la combustion turbulente, soutenance en Septembre 2014
- Y. Dufresne, mise en place du couplage d'un solveur fluide et d'un solveur thermique, soutenance Septembre 2014.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- LIED Paris (UMR CNRS) - Ch. Goupil

**21. Projet : 2008018****Intitulé : Benchmark de modèles d'incendie**

Famille Thématique : Mécanique des fluides

Porteur : Alexis COPPALLE

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

Heures.CPU 2014 : 34 117

**Communications dans des congrès nationaux**

1. A. Coppalle, Study of the smoke evacuation in a compartment, controlled by the natural ventilation induced by a fire source, *Journée d'information et de découverte de FireFOAM: Un outil pour la modélisation de la dynamique des incendies*, Paris, le Mercredi 16 Avril 2014, INERIS, PARIS

**Stages de Master en 2014 sur le projet**

- Alexandra COROI, Modélisation de la dynamique d'une flamme et d'un incendie dans un local ventilé naturellement et mécaniquement, stage INSA-EP4: (10/06/2014 – 26/09/2014)

**22. 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 2014 : 929 597

Voir projet 2014007

**23. Projet : 2010006****Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique**

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

Porteur : Denis LEDUE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 7 229

**Publications de rang A**

1. D. Ledue, A. Maitre, F. Barbe, L. Lechevallier, Temperature dependence of the exchange bias properties of ferromagnetic / antiferromagnetic polycrystalline bilayers, *J. Magn. Magn. Mater.* 372, 134 (2014)
2. G. Lhoutellier, D. Ledue, R. Patte, F. Barbe, B. Dieny, V. Baltz, Bimodal distribution of blocking temperature for exchange-bias ferromagnetic/antiferromagnetic bilayers: a granular Monte Carlo study with less stable magnetic regions spread over the interface, *Journal of Physics D: Applied Physics* (accepté)

**Communications dans des congrès nationaux**

1. G. Lhoutellier, D. Ledue, R. Patte, F. Barbe, B. Dieny, V. Baltz, Distributions bimodales de température de blocage de bicouches ferromagnétique / antiferromagnétique: simulations Monte Carlo de l'influence de la microstructure et des interfaces, In *XVI Colloque Louis Néel 2014*, Autrans, France (24-26/09/2014)

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse débutée en septembre 2012 (G. Lhoutellier)

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- V. Baltz, SPINTEC, Université Grenoble-Alpes/CNRS/INAC-CEA, 38000 Grenoble, France

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT

Laboratoire : IRCOF (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2014 : 16 726

**Publications de rang A**

1. L.-A. Jouanno, V. Di Mascio, V. Tognetti, L. Joubert, C. Sabot, P.-Y. Renard, Metal-Free Decarboxylative Hetero-Diels–Alder Synthesis of 3-Hydroxypyridines: A Rapid Access to N-Fused Bicyclic Hydroxypiperidine Scaffolds, *J. Org. Chem.* 79 (2014) 1303.
2. O. A. Syzgantseva, V. Tognetti, A. Boulangé, P. A. Peixoto, S. Leleu, X. Franck, L. Joubert, Evaluating Charge Transfer in Epicocconone Analogues: Toward a Targeted Design of Fluorophores, *J. Phys. Chem. A* 118 (2014) 757.
3. H. Lavanant, V. Tognetti, C. Afonso, Traveling Wave Ion Mobility Mass Spectrometry and Ab Initio Calculations of Phosphoric Acid Clusters, *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 25 (2014) 572.
4. V. Tognetti, L. Joubert, Density functional theory and Bader's atoms-in-molecules theory: towards a vivid dialogue, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 16 (2014) 14539.
5. F. Guégan, P. Mignon, V. Tognetti, L. Joubert, C. Morell, Dual descriptor and molecular electrostatic potential: complementary tools for the study of the coordination chemistry of ambiphilic ligands, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 16 (2014) 15558.
6. Tognetti, A. Boulangé, P. A. Peixoto, X. Franck, L. Joubert, A theoretical study on diastereoselective oxidative dearomatization by iodoxybenzoic acid, *J. Mol. Model.* 20 (2014) 2342.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Par V. Tognetti : Toward a unified theoretical approach for inter- and intramolecular halogen bonds, In *1st International Symposium on Halogen Bonding (ISXB-1)*, Porto Cesareo, Italie (18-22/06/2014)
2. Par L. Joubert : Measuring the sigma hole. In *1st International Symposium on Halogen Bonding (ISXB-1)*, Porto Cesareo, Italie (18-22/06/2014),

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Par V. Tognetti : L'alliance DFT - DFT conceptuelle - QTAIM : un outil de choix pour l'étude des réactions chimiques, In *14<sup>èmes</sup> Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones*, Paris, France (30/06-4/07/2014),

**Thèses en cours sur le projet**

- L. Patrikeev : Développement d'un code de calcul pour l'analyse topologique de la densité électronique (2011-2014)
- M. Yahia-Ouahmed : Développement de nouveaux descripteurs atomiques et moléculaires pour la caractérisation des liaisons « faibles » (2013-2016)



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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Catherine FRESSIGNE

Laboratoire : IRCOF (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2014 : 22 699

**Publications de rang A**

1. Rudy Lhermet, Maha Ahmad, Catherine Fressigné, Bernard Silvi, Muriel Durandetti, Jacques Maddaluno, Carbolithiation of Chloro-Substituted Alkynes: A New Access to Vinyl Carbenoids, *Chem. Eur. J.* 2014, 20, 10249 – 10254

**26. 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 (SAINT ETIENNE DU ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 9 859

**Publications de rang A**

1. D. Xiang, J. Noel, H. Shao, G. Dupas, N. Merbouh, H.-Z. Hu, ., Unique Intramolecular Electronic Communications in Mono-ferrocenylpyrimidine Derivatives: Correlation between Redox Properties and Structural Nature, *Electrochim. Acta* (2014), <http://dx.doi.org/10.1016/j.electacta.2014.10.146> *In press*
2. MELISSEN S.T.A.G., TOGNETTI V., DUPAS G., JOUANNEAU J, LÊ G., JOUBERT L., A DFT Study of the Formation of Xanthidrol Motifs during Electrophilic Poly Aryl Ether Ketone Synthesis", *J. Mol. Model.* - To be published.

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

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

Porteur : Florent CALVAYRAC

Laboratoire : IMMM UMR 6283 (LE MANS )

Heures.CPU 2014 : 1 582

**Publications de rang A**

1. Karoui, K.; Ben Bechir, M.; Ben Rhaiem, A.; Bulou, A.; Calvayrac, F.; Guidara, K., Theoretical Studies of Vibrational Spectra of  $[N(CH_3)_4]_2ZnCl_{4-y}Br_y$  Compounds with  $y = 0, 2$  and 4. *Phase Transitions* 2014, 1–16.
2. Wang, J.; Gao, C.-Z.; Calvayrac, F.; Zhang, F.-S. Collision Dynamics of Proton with Formaldehyde: Fragmentation and Ionization. *The Journal of Chemical Physics* 2014, 140, 124306.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. *Polyol Mediated Synthesis* Paris juin 2014 : une communication F. Calvayrac, une B. Sitamtze
2. *Progress in Numerical Implementations of TDDFT*, Le Mans, Septembre 2014, F. Calvayrac
3. *CUTE European Workshop*, Pékin, Nov.2014 F. Calvayrac

**Communications dans des congrès nationaux**

1. *Journées J3N* Lyon Novembre 2014 F.Calvayrac

**Thèses en cours sur le projet**

• Jules Berlin NDEKENGNE, cotutelle avec le Cameroun, Modélisation de nanoparticules core/shell

**Stages de Master en 2014 sur le projet**

• B.Tala, « ONIOM Multiscale Method » avec F.Calvayrac mars-juin 2014

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- ITODYS Paris 7 (S.Ammar, F.Mammeri, F.Chau) : ANR Obnarem
- ENS Cachan Satie (F.Malazeyrat) : ANR Obnarem
- UPS Toulouse III (E.Suraud M.Dinh) ANR PWTELEMAN
- UNiv.Erlangen (PG Reinhard) ANR PWTELEMAN

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

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

Porteur : Bessem BEN DOUDOU

Laboratoire : LRPMN (DAMIGNY)

Heures.CPU 2014 : 140 733

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

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Christian DUFOUR

Laboratoire : CIMAP - UMR 6252 (CAEN)

Heures.CPU 2014 : 21 110

**30. Projet : 2012001****Intitulé : Calcul des propriétés mécaniques par homogénéisation stochastique des matrices renforcées par des NTC (Nano Tube de Carbone) dans le cadre de l'élasticité tridimensionnelle dans le cadre d'une approche par décomposition de domaine.**

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Philippe KARAMIAN

Laboratoire : LMNO (CAEN)

Heures.CPU 2014 : 196

**31. Projet : 2012003****Intitulé : Simulation Monte Carlo de la croissance de nano colonne dans le système GeMn - Comparaison à l'expérience à l'échelle atomique.**

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

Porteur : Cristelle PAREIGE

Laboratoire : GPM UMR CNRS 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 1145

**Publications de rang A**

1. I. Mouton, E. Talbot, C. Pareige, R. Lardé, D. Blavette, The early stages of formation of self-organized nanocolumns in thin films, *Journal of Applied Physics*, 115, 053515 (2014).

**Thèses soutenues en 2014 sur le projet**

- Isabelle Mouton, Etude expérimentale et modélisation de la nanostructure de couches minces magnétiques Ge-Mn (oct. 2011 - déc. 2014)

**32. Projet : 2012004****Intitulé : Modélisation de systèmes biologiques complexes, des metalloprotéines**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Dorothee BERTHOMIEU

Laboratoire : Institut Charles Gerhardt de Montpellier (MONTPELLIER)

Heures.CPU 2014 : 36 053

**Publications de rang A**

1. Nohad Gresh, \*Krystal El Hage, David Perahia, Jean-Philip Piquemal, Catherine Berthomieu and Dorothee Berthomieu, Polarizable Molecular Mechanics Studies of Cu(I)/Zn(II) Superoxide Dismutase: Bimetallic Binding Site and Structured Waters, *Journal of Computational Chemistry* 2014, 35, 2096–2106

**33. Projet : 2012006****Intitulé : Simulation hautes-fidélités de la turbulence 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 2014 : 639 110

**Publications de rang A**

1. Mercier, R., Auzillon, P., Moureau, V., Darabiha, N., Gicquel, O., Veynante, D. & Fiorina, B. (2014) Les modeling of the impact of heat losses and differential diffusion on a turbulent stratified flame. *Flow, Turb. Comb.*, 93 (2), 349–381.
2. Mercier, R., Moureau, V., Veynante, D. & Fiorina, B. (2014) Les of turbulent combustion: on the consistency between flame and flow filter scales. *Proc. Combust. Inst.*, in press.
3. Nambully, S., Domingo, P., Moureau, V. & Vervisch, L. (2014) A filtered-laminar-flame pdf sub-grid scale closure for les of premixed turbulent flames: Part ii: Application to a stratified bluff-body burner. *Comb. and Flame*, 161 (7), 1775-1791.
4. Nambully, S., Domingo, P., Moureau, V. & Vervisch, L. (2014) A filtered-laminar-flame pdf sub-grid scale closure for les of premixed turbulent flames. part i: Formalism and application to a bluff-body burner with differential diffusion. *Comb. and Flame*, 161 (7), 1756-1774.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Guedot, L., Lartigue, G. & Moureau, V. (2014) Numerical study of spray/precessing vortex core interaction in realistic swirling flows. *ERCOFTAC ETMM10*. Marbella, Spain.
2. Mercier, R., Moureau, V., Veynante, D. & Fiorina, B. (2014) Les of turbulent combustion : on the consistency between flame and flow filter scales. *Proc. Combust. Inst.*. San Francisco, CA, USA.
3. Moureau, V. & Lartigue, G. (2014) Investigation of partially premixed combustion in a swirl burner with highly-resolved large-eddy simulation. *ERCOFTAC ETMM10*. Marbella, Spain.

**Thèses soutenues en 2014 sur le projet**

- C. Gruselle, Modeling of stratified and diluted combustion in piston engines, CIFRE Renault. Defended the 22nd of January, 2014. PhD director: Prof Yves d'Angelo. Co-advisor: Dr. Vincent Moureau

**Thèses en cours sur le projet**

- Lola Guédot, Modeling and optimization of multi-point injection systems, LEMCOTEC European Project.
- Thomas Roger, Semi-implicit time integration of the Navier-Stokes equations, SNECMA Research Project CN2020
- Adrien Jean, Primary atomization modeling in realistic aeronautical injectors, CIFRE TURBOMECA / CRT SAFRAN
- Lancelot Boulet, Conjugate heat transfer modeling of casing fire tests, TURBOMECA
- Hakim Larabi, Auto-adaptive simulation of spray flames, Normandy Region Funding
- Nicolas Legrand, Modélisation et méthodes numériques pour la simulation aux grandes échelles multi-niveaux des écoulements turbulents dans des géométries complexes, SAFRAN Research Project ELCI

**34. Projet : 2012007****Intitulé : Propriétés de multicouches Co-Pt**

Famille Thématique : Physique des Matériaux

Porteur : Pierre-Emmanuel BERCHE

Laboratoire : GPM UMR CNRS 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 2 207

En lien avec le projet précédent : projet n° 2008001 - Étude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe<sub>2</sub>/YFe<sub>2</sub>

**Publications de rang A**

1. A Monte Carlo study of magnetization reversal in DyFe<sub>2</sub>/YFe<sub>2</sub> exchange-coupled superlattices, S. Djedai, E. Talbot, P.E. Berche, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 368, 29-35 (2014).

**Thèses en cours sur le projet**

- Thèse de Saoussen Djedai, soutenance prévue en 2015 à l'université de Constantine en Algérie (soutenance autorisée par le conseil scientifique).

**35. Projet : 2012008****Intitulé : Modélisation des joints de grains sous irradiation**

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

Porteur : Helena ZAPOLSKY

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 82 888

**Publications de rang A**

1. O. Kapikranian, H. Zapolsky, C. Domain, R. Patte, C. Pareige, B. Radiguet, and P. Pareige, Atomic structure of grain boundaries in iron modeled using the atomic density function, *Phys. Rev. B*, 89, 014111 (2014)

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Atomic density function modeling of atomic structure of grain boundaries (oral), O. Kapikranian, H. Zapolsky, C. Domain, R. Patte, C. Pareige, B. Radiguet, and P. Pareige, *AMS-14 : 1st International Conference on Ageing of Materials and Structures*, Delft 26 – 28 May 2014, The Netherlands

**36. Projet : 2012013****Intitulé : Simulation de nano-objets et reconstruction tridimensionnelle**

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

Porteur : Williams LEFEBVRE

Laboratoire : GPM UMR CNRS 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 45 005

**Publications de rang A**

1. Xiaohui Wei, Rulong Zhou, Williams Lefebvre, Kai He, Damien Le Roy, Ralph Skomski, Xingzhong Li, Jeffrey E. Shield, Matthew J. Kramer, Shuang Chen, Xiao Cheng Zeng and David J. Sellmyer, Structural and Magnetic Evolution of Bimetallic MnAu Clusters Driven by Asymmetric Atomic Migration, *Nano Letters*, 14 (3) (2014) pp 1362–1368 DOI: 10.1021/nl404412w

**37. Projet : 2012016****Intitulé : Classification de molécules**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Luc BRUN

Laboratoire : GREYC CNRS UMR 6072 (CAEN )

Heures.CPU 2014 : 296 159

**Publications de rang A**

1. P.-A. Grenier, L. Brun et D. Villemin, Incorporating molecule's stereoisomerism within the machine learning framework., Structural, Syntactic, and Statistical Pattern Recognition, *Joint IAPR International Workshop S +SSPR Joensuu*, Finland, August 20-22, 2014, Proceedings.
2. B. Gaüzère , S. Bougleux , K.Riesen et L. Brun., Approximate Graph Edit Distance Guided by Bipartite Matching of Bags of Walks. *Structural, Syntactic, and Statistical Pattern Recognition, Joint IAPR International Workshop S+SSPR Joensuu*, Finland, August 20-22, 2014, Proceedings.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. B. Gaüzère, L. Brun et D. Villemin, Graph kernel encoding substituents' relative positioning. In *Proceedings of ICPR 2014, 22nd International Conference on Pattern Recognition*, Stockholm, August 2014.

2. P.-A. Grenier, L. Brun et D. Villemin, A Graph Kernel incorporating molecule's stereoisomerism information. In *Proceedings of ICPR 2014, 22nd International Conference on Pattern Recognition*, Stockholm, August 2014.

**Communications dans des congrès nationaux**

1. B. Gaüzère, L. Brun et D. Villemin. Représentation des cycles d'une molécule sous forme d'hypergraphe. 19ème congrès national sur la Reconnaissance de Formes et l'Intelligence Artificielle RFIA'14, Rouen, 30 juin-4juillet 2014.
2. Un noyau sur graphe prenant en compte la stéréoisométrie des molécules. P.-A. Grenier, L. Brun et D. Villemin. 19ème congrès national sur la Reconnaissance de Formes et l'Intelligence Artificielle RFIA'14, Rouen, 30 juin-4juillet 2014.

**Thèses en cours sur le projet**

- Métrique dans les espaces structuraux : une application aux conformations 3D de molécules. Pierre Anthony Grenier.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Travail commun GREYC, LCMT et collaborations ponctuelles avec l'Université de Salerno.

**38. Projet : 2013004****Intitulé : Diffusion et piégeage de l'hydrogène dans le nickel par calculs ab initio**

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

Porteur : Arnaud METSUE

Laboratoire : Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement UMR CNRS 7356

Université de La Rochelle (La Rochelle)

Heures.CPU 2014 : 8 969

**Publications de rang A**

1. Arnaud Metsue, Abdelali Oudriss, Jamaa Bouhattate and Xavier Feaugas, Contribution of the entropy on the thermodynamic equilibrium of vacancies in nickel *Start CrossMark Snippet v1.3 End CrossMark Snippet*, *J. Chem. Phys.*, 2014, 140, 104705 ; <http://dx.doi.org/10.1063/1.4867543>
2. Arnaud Metsue, Abdelali Oudriss & Xavier Feaugas, Displacement field induced by a vacancy in nickel and some implications for the solubility of hydrogen, *Philosophical Magazine*, 2014, 94:34, 3978-3991, DOI: 10.1080/14786435.2014.975769

**39. Projet : 2013005****Intitulé : Agrégats d'acide phosphorique pour l'étalonnage en spectrométrie de masse couplée à la mobilité ionique**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Hélène LAVANANT

Laboratoire : COBRA UMR CNRS 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2014 : 11 986

**Publications de rang A**

1. Lavanant, H.; Tognetti, V.; Afonso, C., Traveling Wave Ion Mobility Mass Spectrometry and Ab Initio Calculations of Phosphoric Acid Clusters. *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 2014, 25, 572-580, DOI: 10.1007/s13361-013-0818-3

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Helene Lavanant, Vincent Tognetti, Carlos Afonso, Traveling wave ion mobility of phosphoric acid clusters: comparison of positive and negative cluster ions for collision cross section calibration, In

*Spectrométrie de masse et analyse protéomique (SMAP) 2014*, Lyon 30 juin -2 juillet 2014, (Communication par affiche).

**40. Projet : 2013006****Intitulé : Imagerie mathématique et analyse numérique**

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Carole LE GUYADER

Laboratoire : Laboratoire de Mathématiques de l'INSA de Rouen (Saint Etienne du Rouvray )

Heures.CPU 2014 : 181

**Publications de rang A**

1. R. Derfoul and C. Le Guyader. A constrained registration problem based on Ciarlet-Geymonat stored energy. *Proc. SPIE 9034, Medical Imaging 2014: Image Processing*, 90343Q (21 March 2014).
2. S. Ozeré and C. Le Guyader. Topology preservation for image- registration-related deformation fields. Accepted in *Communications in Mathematical Sciences*, July 2014.
3. H. Schaeffer, N. Duggan, C. Le Guyader and L. Vese. Topology preserving active contours. *Communications in Mathematical Sciences*, 12(7): 1329–1342, 2014.
4. S. Ozeré and C. Le Guyader. A joint segmentation-registration framework based on weighted total variation and nonlinear elasticity principles. *IEEE International Conference on Image Processing*, October 2014.
5. D. Brazey, C. Gout. An algorithm for automatic people tracking from depth map sequences, *IEEE 5th European Workshop on Visual Information Processing (EUVIP) 2014*, to appear.

**Communications dans des congrès internationaux**

1. T. Roy, D. Apprato, P. Alexandre, N. Forcadel, C. Gout, B. Jobard, C. Le Guyader, A. Zakharova, Wind velocity field approximation from sparse data: modelling and visualization on real dataset, *Curves and Surfaces*, Paris, 2014.
2. V. Salnikov, A. Zakharova & C. Le Guyader, A Three-Dimensional Registration Model Based on the Polyconvex Envelope of a Saint Venant-Kirchhoff Type Stored Energy, *Curves and Surfaces*, Paris, 2014.
3. S. Ozeré, Image Registration using Weighted Total Variation and Non-Linear Elastic Regularization, *SIAM conference on Imaging Science*, Hong Kong (mai 2014)
4. S. Ozeré, Image Registration using Weighted Total Variation and Non-Linear Elastic Regularization, *Curves and Surfaces*, ENSAM Paris (juin 2014).
5. S. Ozeré, A joint Segmentation-Registration framework based on Weighted Total Variation and Nonlinear Elasticity Principle, *IEEE International Conference on Image Processing (ICIP)*, Paris, France 2014.

**41. Projet : 2013008****Intitulé : Etude par simulations numériques de la transition de phase austénite-ferrite : application aux Pipelines**

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

Porteur : Helena ZAPOLSKY

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 288

**42. Projet : 2013009**

**Intitulé : Simulation de séparation en masse de haute résolution avec un plasma d'ions dans un piège de Penning**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Pierre DUPRE

Laboratoire : CSNSM (ORSAY Campus)

Heures.CPU 2014 : 2 954

**43. Projet : 2013013**

**Intitulé : Mésochallenge 2013**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

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

Heures.CPU 2014 : 13 132

Voir projet n° 1998022

**44. Projet : 2013015**

**Intitulé : Cinétique chimique détaillée des plasmas froids.**

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

Porteur : Arnaud BULTEL

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY )

Heures.CPU 2014 : 7 857

**Communications dans des congrès internationaux**

1. B. Pérès, V. Morel, A. Bultel, A. Benyagoub, I. Monnet, E. Gardès, G. Godard, C. Gobin, C. Jouen, A. Hideur, I. Schneider and Z. Mezei (2014), Experimental characterization of the excitation state of picosecond laser-induced Tungsten plasmas, *J. Phys.: Conf. Series* 550 012047, 1-7
2. V. Morel and A. Bultel (2014), Achievement of local thermodynamic equilibrium for ns laser-induced plasmas on aluminium sample at different wavelengths, *J. Phys.: Conf. Series* 550 012048, 1-7
3. A. Bultel, I.F. Schneider, D. Benredjem and P. Monier-Garbet (2014), Collisional-radiative modeling of the transient excitation of a carbon atoms beam crossing a tokamak plasma edge, *J. Phys.: Conf. Series* 511 012045, 1-7

**Stages de Master en 2014 sur le projet**

- Numerical Simulation Of The Injection Of A Supersonic Helium Jet In A Thermonuclear Fusion Plasma Edge G. Sahut CORIA, Master Thesis 2014

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Projet LabEx PICOLIBS - Picosecond Laser-Induced Breakdown Spectroscopy, CORIA (Rouen) - LOMC (Le Havre) - CIMAP (Caen), B. Pérès, V. Morel, A. Bultel, A. Benyagoub, I. Monnet, E. Gardès, G. Godard, C. Gobin, C. Jouen, A. Hideur, I. Schneider and Z. Mezei



**45. Projet : 2013019**

**Intitulé : Modélisation de la pollution atmosphérique : couplage des échelles locales et régionales - modèles SIRANE 2.0 et CHIMERE.**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Lionel SOULHAC

Laboratoire : LMFA (ECULLY )

Heures.CPU 2014 : 6 044

**46. Projet : 2014002**

**Intitulé : Amélioration des propriétés mécaniques, thermiques et électriques des matériaux composites renforcés par des inclusions rigides métallisés et thermiquement conducteurs par le biais de la simulation numérique et technique homogénéisation multi-échelles.**

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Philippe KARAMIAN

Laboratoire : LMNO (CAEN)

Heures.CPU 2014 : 689 785

**47. Projet : 2014003**

**Intitulé : Etude de mécanisme de diffusion à l'interface dans les semi-conducteurs III-V.**

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

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : CIMAP (CAEN )

Heures.CPU 2014 : 153 411

Voir projet n° 2014007

**48. Projet : 2014004**

**Intitulé : Ecoulements diphasique sur une paroi rugueuse. Etude numérique. Estimation de la longueur de Navier et application à la réduction de frottement.**

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

Porteur : Adil RIDHA

Laboratoire : LMNO (CAEN)

Heures.CPU 2014 : 1 191

**49. Projet : 2014005**

**Intitulé : Validation et évaluation d'un nouveau solveur explicite cartésien pseudo-compressible à raffinement adaptatif (AMR) massivement parallèle. Application à la simulation d'une hydrolienne.**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : David LETOUZÉ

Laboratoire : LHEEA - École Centrale de Nantes (NANTES)

Heures.CPU 2014 : 493 487

**Thèses en cours sur le projet**

- Pierre Bigay, Développement d'un solveur faiblement compressible sur maillage cartésien pour les écoulements hydrodynamiques autour de corps.
- Baptiste Elie, Modélisation numérique de sillages lointains d'hydroliennes par une approche Volumes Finis faiblement compressible.

**50. Projet : 2014006**

**Intitulé : Modèle Conceptuel Modulaire**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Nicolas LECOQ

Laboratoire : UMR 6143 M2C Morphologie Continentale et Côtière, Université de Rouen

Heures.CPU 2014 : 10

**Communications dans des congrès internationaux**

1. N. Lecoq, H. Jourde, N. Mazzilli, B. Arfib, D. Bertin. KARSTMOD -- A generic modular reservoir model dedicated to spring discharge modeling and hydrodynamic analysis in karst. *5th International symposium on karst*, MALAGA 2014, 14 -- 16 October 2014, Malaga, Spain.
2. N. Lecoq, N. Mazzilli, H. Jourde, B. Arfib, D. Bertin. KARSTMOD -- A generic modular reservoir model dedicated to spring discharge modeling and hydrodynamic analysis in karst. *3rd International Conference Water-Climate'2014: SYNERGIES NORTH-SOUTH Water Resources & Climate Change in the Mediterranean Region*, October 21, 22 and 23, 2014 Hammamet, Tunisia.

**Communications dans des congrès nationaux**

1. N. Mazzilli, N. Lecoq, H. Jourde, B. Arfib, D. Bertin. KARSTMOD - A generic modular reservoir model dedicated to spring discharge modeling and hydrodynamic analysis in karst. *24<sup>ème</sup> Réunion des Sciences de la Terre*, 27-31 octobre 2014, Pau, France.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Naomi Mazzilli, Laboratoire EMMAH, UMS LSBB (FONTAINE DE VAUCLUSE- LSBB), UMR 1114 INRA-UAPV EMMAH, Environnement Méditerranéen et Modélisation des Agro-Hydrosystèmes, Université d'Avignon et des Pays de Vaucluse

**51. Projet : 2014007****Intitulé : Conduction électrique le long des dislocations dans les nano-fils de matériaux nitrures-III.**

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

Porteur : Bessem BEN DOUDOU

Laboratoire : CIMAP (site d'Alençon) - UMR 6252 UCBN ENSICAEN CNRS CEA (DAMIGNY)

Heures.CPU 2014 : 98 795

**Publications de rang A**

1. I. Belabbas, J. Chen and G. Nouet, Electronic structure and metallization effects at threading dislocation cores in GaN, *Computational Materials Science*, 90, 71 (2014).

**Communications dans des congrès internationaux**

1. I. Belabbas, J. Chen and G. Nouet, Electronic structure and metallization effects at threading dislocation in wurtzite GaN, *International Conference on extended defects in Semiconductors (EDS2014)*, Gottingen, Germany, 14th-19th June, 2014.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Equipe de cristallographie et simulation des matériaux, Laboratoire de physico-chimie des matériaux et catalyse, Université de Béjaia (Algérie)
- Equipe de Prof. Malcolm Heggie, Département de Chimie, Université du Surrey, Guildford (UK)

**52. Projet : 2014009****Intitulé : Développement d'un endoscope UV pour la visualisation in-situ de fronts de flamme.**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : David HONORE

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY )

Heures.CPU 2014 : 1 727

**53. Projet : 2014010****Intitulé : Matériaux composites hybrides par intégration de plis lin dans des structures stratifiés carbone.**

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

Porteur : Alexandre VIVET

Laboratoire : UMR6252 (DAMIGNY)

Heures.CPU 2014 : 1 538

**54. Projet : 2014011****Intitulé : Simulations de la turbulence de Couette-Taylor en présence de Gradient de température radial.**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Luminata DANAILA

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY )

Heures.CPU 2014 : 64 237

**Publications de rang A**

1. B. Martiez-Arias, J. Peixinho, O. Crumeyrolle & I. Mutabazi, Effect of the number of vortices on the torque scaling in Taylor-Couette flow, *J. Fluid Mech.* 748, 756-767 (2014). DOI:10.1017/jfm.2014.213

2. C.M. Gassa Feugaing, O. Crumeyrolle, K-S. Yang & I. Mutabazi, Destabilization of the Couette–Taylor flow by modulation of the inner cylinder rotation, *Eur. J. Mech. B/Fluids* 44, 82-87 (2014).

**55. Projet : 2014012****Intitulé : Transition laminaire-turbulent dans un tube de section circulaire avec un élargissement.**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Jorge PEIXINHO

Laboratoire : LOMC (LE HAVRE)

Heures.CPU 2014 : 236 423

**Communications dans des congrès internationaux**

1. K. Selvam and J. Peixinho, Localized turbulence in a divergent pipe flow, *Workshop Instabilities and Turbulence in Stratified Rotating Flows (ISTROF)*, Le Havre, France (2014)
2. J. Peixinho and K. Selvam, Laminar-turbulent transition in the flow through a gradual expansion in a circular pipe, *Euromech Colloquium (EC565), Subcritical transition to turbulence*, Cargèse, France (2014)
3. K. Selvam and J. Peixinho, Localized Turbulence in a Circular Pipe Flow with a Gradual Expansion, *3rd Nek5000 Users & Developers Meeting*, Conference Centre, Aristotle University of Thessaloniki, Thessaloniki, Greece (2014)

**Thèses en cours sur le projet**

- Kamal SELVAM, Laminar-turbulent transition in the flow through a gradual expansion in a circular pipe

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Ashley WILLIS, School of Mathematics and Statistics, University of Sheffield, UK
- Yuji TASAKA, Department of Mechanical Engineering, Hokkaido University, Japan

**56. Projet : 2014014****Intitulé : Experiments on Minimum Absent Words in complete genome sequences**

Famille Thématique : Bio Informatique

Porteur : Laurent MOUCHARD

Laboratoire : LITIS (SAINT ETIENNE DU ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 10

**57. Projet : 2014015****Intitulé : Cinétique de transformation de phase dans les superalliages à base Ni et Co**

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

Porteur : Thomas PHILIPPE

Laboratoire : GPM UMR CNRS 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2014 : 480

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Co-développement d'un code Monte Carlo avec le LEM (ONERA) - M. Fèvre.

**58. Projet : 2014016****Intitulé : Étude des thioglycosyltransférases UGT74B1 et UGT74C1 d'Arabidopsis Thaliana par modélisation moléculaire et spectroscopie RMN.**

Famille Thématique : 3. Biologie et santé

Porteur : Gaël COADOU

Laboratoire : COBRA UMR CNRS 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2014 : 242

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Marroun, S.; Coadou, G.; Jousset, G.; Lafite, P.; Daniellou, R.; Oulyadi, H., Structural and enzymatic probing of S-glycosyltransferases with a joint molecular modeling and NMR approach, *Joint international seminar on glycomics 13/5/2014*, France, mai 2014 (communication orale et affiche)
2. Marroun, S.; Coadou, G.; Jousset, G.; Lafite, P.; Daniellou, R.; Oulyadi, H., Understanding enzymatic S-C bonding, *Journée de l'école doctorale normande de chimie*, France, mai 2014, (communication par affiche)

**Thèses en cours sur le projet**

- Sami Marroun, Discovering original enzymatic means of C-S glycosidic bond formation, (Financement: MENRT)

**Stages de Master en 2014 sur le projet**

- Guillaume Jousset (stage de M2)

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Institut de Chimie Organique et Analytique – ICOA UMR CNRS 731, Prof. Daniellou & Dr Lafite

## C. 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**

1. C. Brandel, G. Gbabode, Y. Cartigny, C. Martin, G. Gouhier, S Petit, G. Coquerel, Crystal growth, structure, and polymorphic behavior of an ionic liquid: phthalate derivative of N-butyl,N-methylimidazolium hexafluorophosphate, *Chem. Mater.* 2014, 26, 4151-4162
2. K. Suwannasang, G. Coquerel, C. Rougeot, A.E. Flood, Mathematical Modelling of Chiral Symmetry Breaking towards Complete Deracemization due to Differences in Crystal Growth Kinetics, *Chem. Eng. Technol.*, 2014, 37 (8), 1329–1339
3. G. Gbabode, M. Dohr, C. Niebel, J.-Y. Balandier, C. Ruzié, P. Négrier, D. Mondieig, Y. H. Geerts, R. Resel, M. Sferrazza, X-ray structural investigation of nonsymmetrically and symmetrically alkylated [1]benzothieno[3,2-b]benzothiophene derivatives in bulk and thin films, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2014, 6, 13413-13421
4. S. Clevers, C. Rougeot, F. Simon, M. Sanselme, V Dupray, G. Coquerel, Detection of order-disorder transition in organic solids by using Temperature Resolved Second Harmonic Generation (TR-SHG), *J. Mol. Structure*, 2014, 1078, 61–67
5. R. J. Davey, G. Sadiq, C. C. S. Robin, G. Pritchard, G. Coquerel, C. Rougeot, Racemic compound versus conglomerate: concerning the crystal chemistry of the triazolylketone, 1-(4-chlorophenyl)-4,4-dimethyl-2-(1H-1,2,4-triazol-1-yl)pentan-3-one, *CrytEngComm*, 2014, 16, 4377-4381

#### **Communications dans des congrès internationaux**

1. Versatile crystallization behavior of a chiral API : Diprophylline, S. Petit, C. Brandel, J.M. Rollinger, U.J. Griesser, Y. Cartigny, G. Coquerel, *CECAM-USI Workshop: Molecular simulations of crystallization from solution*, Lugano (CH), Mai 2014, Abstract book, p. 14
2. Crystallization behavior of an ionic liquid as a function of kinetics: from oiling out to polymorphism S. Petit, C. Brandel, G. Gbabode, G. Gouhier, Y. Cartigny, G. Coquerel, *CECAM-USI Workshop: Molecular simulations of crystallization from solution*, Lugano (CH), Mai 2014, Abstract book, p. 20
3. Progress in understanding (predicting) the behaviors of molecular solvates upon desolvation, G. Coquerel, *CGOM-11 (Crystal Growth of Organic Molecules)*, Kyoto (Japan), June 2014, Abstract book, p. IL-CGOM-01
4. Access to several polymorphic forms of ( $\pm$ )-Modafinil by using various solvation-desolvation processes J. Mahieux, M. Sanselme, G. Coquerel, *CGOM-11 (Crystal Growth of Organic Molecules)*, Kyoto (Japan), June 2014, Abstract book, p. OC-CGOM-34
5. Incidence of Kinetic Parameters on the Crystallization Behavior and on Macrocrystalline Features of an Original Ionic Liquid, C. Brandel, Y. Cartigny, G. Gbabode, C. Martin, G. Gouhier, S. Petit, G. Coquerel, *CGOM-11 (Crystal Growth of Organic Molecules)*, Kyoto (Japan), June 2014, Abstract book, p. PC-08
6. Order-Disorder transitions: investigations in a series of triazole ketones, S. Clevers, C. Rougeot, M. Sanselme, V. Dupray, F. Taulelle, C. Martineau, F. Saïdi, J. Senker, R. Siegel, A. Esposito, A. Dhotel, L. Delbreilh, G. Coquerel, *CGOM-11 (Crystal Growth of Organic Molecules)*, Kyoto (Japan), June 2014, Abstract book, p. PC-21
7. Crystallization Behavior of Diprophylline from the Amorphous State, Q. Viel, C. Brandel, Y. Cartigny, E. Dargent, S. Petit, G. Coquerel, *CGOM-11 (Crystal Growth of Organic Molecules)*, Kyoto (Japan), June 2014, Abstract book, p. PC-40

8. About fluid inclusions and morphological transitions in organic and ionic crystals, S. Petit, C. Brandel, A. Waldschmidt, G. Gouhier, Y. Cartigny, G. Coquerel, *ISIC-19 (International Symposium on Industrial Crystallization)*, Toulouse, September 2014, Abstract book, p. 60-61,
9. Ability of Ammonium Perchlorate to form aligned inclusions in single crystals, E. Bobo, M. Sanselme, S. Petit, G. Coquerel, *BIWIC (International Workshop on Industrial Crystallization)*, Rouen, September 2014, Abstract book, p. 224-230
10. Access to several Polymorphs of ()-Modafinil by using various Dehydration Processes from a new Monohydrate, J. Mahieux, M. Sanselme, D. Martins, G. Coquerel, *BIWIC (International Workshop on Industrial Crystallization)*, Rouen, September 2014, Abstract book, p. 202-209

#### **Communications dans des congrès nationaux**

1. The Crystallization behavior of a Solid Solution between two enantiomers of the Active Pharmaceutical Ingredient: Diprophylline, C. Brandel, Y. Cartigny, S. Petit, G. Coquerel, *XXXX èmes JEEP (Joint European days on Equilibrium between Phases)*, Lyon, Mars 2014, Abstract book, p. 66
2. In situ monitoring of Fast Crystallization by means of X-Ray Diffraction, S. Clevers, V. Nachbaur, M. Sanselme, V. Dupray, P. Cardinael, G. Coquerel, J.M. Lebreton, *XXXX èmes JEEP (Joint European days on Equilibrium between Phases)*, Lyon, Mars 2014, Abstract book, p. 67
3. Polymorphism Characterization of an Organic Pi-conjugated Molecule for Applications in Organic Electronics, A. Blangenois, G. Gbabode, P. Négrier, D. Mondieg, G. Coquerel, *XXXX èmes JEEP (Joint European days on Equilibrium between Phases)*, Lyon, Mars 2014, Abstract book, p. 85
4. Crystallization Behavior of Diprophylline from the Amorphous State, Q. Viel, C. Brandel, Y. Cartigny, G. Coquerel, S. Petit, E. Dargent, *JCAT (Journées de Calorimétrie et d'Analyse Thermique)*, Rouen, Mai 2014, Abstract book, p. P4
5. Molecular mechanisms of subambient solid-solid phase transitions in Ciclopirox crystals, C. Brandel, Y. Cartigny, S. Petit, G. Coquerel, *JCAT (Journées de Calorimétrie et d'Analyse Thermique)*, Rouen, Mai 2014, Abstract book, p. P7
6. Crystallization and phase transitions of Biclotymol polymorphs, B. Schammé, L. Delbreilh, V. Dupray, G. Coquerel, *JCAT (Journées de Calorimétrie et d'Analyse Thermique)*, Rouen, Mai 2014, Abstract book, p. P2

#### **Thèses soutenues en 2014 sur le projet**

- Clément BRANDEL (2011 - 2014), Pureté structurale et transitions solide-solide de composés moléculaires, Directeur S. Petit
- Julien MAHIEUX (2011 - 2014), Résolution chirale de conglomerats par cristallisation préférentielle, Directeur G. Coquerel
- Simon CLEVERS (2011 - 2014), Développement de méthodes optiques in situ pour la caractérisation de solides organiques cristallisés, Directeur V. Dupray/J.-M. Le Breton

#### **Thèses en cours sur le projet**

- Mélanie MIGNOT (2013 - 2016), Elaboration de phases stationnaires originales pour la Chromatographie Liquide Haute Performance, Directeur P. Cardinaël
- Quentin VIEL (2013 - 2016), Relaxation of chiral molecules, Directeur S. Petit/E. Dargent
- Benjamin SCHAMME (2013 - 2016), Matériaux à ordre évolutif, Directeur V. Dupray/L. Delbreilh
- Emilie BOBO (2013 - 2016), Etude du mécanisme de formation des inclusions dans les cristaux organiques et inorganiques, Directeur G. Coquerel

## 2. RNMM : Plateforme PISSARO

### Intitulé : Utilisation de l'outil MASCOT pour l'identification des protéines

Responsable : Pascal COSETTE

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

### Laboratoires impliqués

Plateforme Instrumentale en Sciences Séparatives et Analytiques de Rouen

- 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 de rang A

1. Mechkarska M, Coquet L, Leprince J, Jouenne T, Vaudry H, Michalak K, Michalak P, Conlon JM. Host-defense peptides from skin secretions of the octoploid frogs *Xenopus vestitus* and *Xenopus wittei* (Pipidae): Insights into evolutionary relationships. *Comp Biochem Physiol Part D Genomics Proteomics*. 2014 Sep;11:20-8. doi: 10.1016/j.cbd.2014.07.002.
2. Conlon JM, Kolodziejek J, Mechkarska M, Coquet L, Leprince J, Jouenne T, Vaudry H, Nielsen PF, Nowotny N, King JD. Host defense peptides from *Lithobates forreri*, *Hylarana luctuosa*, and *Hylarana signata* (Ranidae): phylogenetic relationships inferred from primary structures of ranatuerin-2 and brevinin-2 peptides. *Comp Biochem Physiol Part D Genomics Proteomics*. 2014 Mar;9:49-57. doi: 10.1016/j.cbd.2014.01.002.
3. Costa O, Schneider P, Coquet L, Chan P, Penther D, Legrand E, Jouenne T, Vasse M, Vannier JP. Proteomic profile of pre - B2 lymphoblasts from children with acute lymphoblastic leukemia (ALL) in relation with the translocation (12; 21). *Clin Proteomics*. 2014 Aug 1;11(1):31. doi: 10.1186/1559-0275-11-31.
4. Chahed H, Ezzine A, Mlouka AB, Hardouin J, Jouenne T, Marzouki MN. Biochemical characterization, molecular cloning, and structural modeling of an interesting  $\beta$ -1,4-glucanase from *Sclerotinia sclerotiorum*. *Mol Biotechnol*. 2014 Apr;56(4):340-50. doi: 10.1007/s12033-013-9714-0.
5. Nait Chabane Y, Mlouka MB, Alexandre S, Nicol M, Marti S, Pestel-Caron M, Vila J, Jouenne T, Dé E. Virstatin inhibits biofilm formation and motility of *Acinetobacter baumannii*. *BMC Microbiol*. 2014 Mar 12;14:62. doi: 10.1186/1471-2180-14-62.
6. Ouidir T, Jarnier F, Cosette P, Jouenne T, Hardouin J. Potential of liquid-isoelectric-focusing protein fractionation to improve phosphoprotein characterization of *Pseudomonas aeruginosa* PA14. *Anal Bioanal Chem*. 2014 Oct;406(25):6297-309. doi: 10.1007/s00216-014-8045-8.
7. Peixoto PA, Boulange A, Ball M, Naudin B, Alle T, Cosette P, Karuso P, Franck X. Design and synthesis of epicocconone analogues with improved fluorescence properties. *J Am Chem Soc*. 2014 Oct 1. PubMed PMID: 25271695.
8. Ouidir T, Jarnier F, Cosette P, Jouenne T, Hardouin J. Extracellular Ser/Thr/Tyr phosphorylated proteins of *Pseudomonas aeruginosa* PA14 strain. *Proteomics*. 2014 Sep;14(17-18):2017-30. doi: 10.1002/pmic.201400190.
9. Khemiri A, Lecheheb SA, Chi Song PC, Jouenne T, Cosette P. Proteomic regulation during *Legionella pneumophila* biofilm development: decrease of virulence factors and enhancement of response to oxidative stress. *J Water Health*. 2014 Jun;12(2):242-53. doi: 10.2166/wh.2014.103.
10. Pournaras S, Poulou A, Dafopoulou K, Chabane YN, Kristo I, Makris D, Hardouin J, Cosette P, Tsakris A, Dé E. Growth retardation, reduced invasiveness, and impaired colistin-mediated cell death associated with



- colistin resistance development in *Acinetobacter baumannii*. *Antimicrob Agents Chemother.* 2014; 58(2): 828-32. doi: 10.1128/AAC.01439-13.
11. Cosette P, Jouenne T. Proteomic analysis. *Methods Mol Biol.* 2014;1149:205-12. doi: 10.1007/978-1-4939-0473-0\_17.
  12. Khemiri A, Carrière M, Bremond N, Ben Mlouka MA, Coquet L, Llorens I, Chapon V, Jouenne T, Cosette P, Berthomieu C. *Escherichia coli* response to uranyl exposure at low pH and associated protein regulations. *PLoS One.* 2014 Feb 26;9(2):e89863. doi: 10.1371/journal.pone.0089863.
  13. Seaborn T, Ravni A, Au R, Chow BK, Fournier A, Wurtz O, Vaudry H, Eiden LE, Vaudry D. Induction of serpinb1a by PACAP or NGF is required for PC12 cells survival after serum withdrawal. *J Neurochem.* 2014 Oct;131(1):21-32. doi: 10.1111/jnc.12780.
  14. Salzano S, Checconi P, Hanschmann EM, Lillig CH, Bowler LD, Chan P, Vaudry D, Mengozzi M, Coppo L, Sacre S, Atkuri KR, Sahaf B, Herzenberg LA, Herzenberg LA, Mullen L, Ghezzi P. Linkage of inflammation and oxidative stress via release of glutathionylated peroxiredoxin-2, which acts as a danger signal. *Proc Natl Acad Sci U S A.* 2014 Aug 19;111(33):12157-62. doi: 10.1073/pnas.1401712111.
  15. Bertrand J, Goichon A, Chan P, Azhar S, Leclaire S, Donnadiou N, Vaudry D, Cailleux AF, Déchelotte P, Coëffier M. Enteral glutamine infusion modulates ubiquitination of heat shock proteins, Grp-75 and Apg-2, in the human duodenal mucosa. *Amino Acids.* 2014 Apr;46(4):1059-67. doi: 10.1007/s00726-014-1670-x.

### 3. RNMM : CERMN

#### Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie

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

Laboratoire : CERMN, Université de Caen Basse-Normandie, Bd Becquerel, 14032 Caen, France  
UPRES EA4259, FR-CNRS 3038. Plateforme de Chémoinformatique

#### **Publications de rang A**

1. Minguez L., Farcy E., Ballandone C., Lepailleur A., Serpentine A., Lebel JM., Bureau R., Halm-Lemeille MP. Acute toxicity of 8 antidepressants : what is their mode of action ? *Chemosphere*, 2014, 108, 314-9
2. Lepailleur A., Bureau R., Halm-Lemeille M.P., Bouquet M., Pecquet R., Paris-Soubayrol C., Le Goff J., André V., Lecluse Y., Lebailly P., Maire M.A. and Vasseur P. Assessment of the genotoxic and carcinogenic potentials of 3-aminothiophene derivatives using in vitro and in silico methodologies. *J. Appl. Toxicol.*, 2014, 34, 775-86
3. C Neveu, F Dulin, B Lefranc, L Galas, C Calbrix, R Bureau, S Rault, J Chuquet, J A Boutin, L Guilhaudis, I Ségalas-Milazzo, D Vaudry, H Vaudry, J Sopkova-de Oliveira Santos, J Leprince. Molecular basis of agonist docking in a human GPR103 homology model by site-directed mutagenesis and structure-activity relationship studies. *Br. J. Pharmacol.*, 2014, 171, 4425-39
4. Lepailleur A, Freret T, Lemaître S, Boulouard M, Dauphin F, Hirschberger A, Dulin F, Lesnard A, Bureau R, Rault S. Dual Histamine H3R/Serotonin 5-HT4R Ligands with Antiamnesic Properties: Pharmacophore-Based Virtual Screening and Polypharmacology. *J. Chem. Inf. Model.*, 2014, 54, 1773-84
5. Halm-Lemeille MP, Abbaszadeh Fard E, Latire T, Ferard JF, Costil K, Lebel JM, Bureau R, Serpentine A. The effect of different polychlorinated biphenyls on two aquatic models, the green alga *Pseudokirchneriella subcapitata* and the haemocytes from the European abalone *Haliotis tuberculata*. *Chemosphere*, 2014, 110, 120-8
6. Jonathan Villain, Sylvain Lozano, Marie-Pierre Halm-Lemeille, Gilles Durrieu and Ronan Bureau. Quantile regression model for a diverse set of chemicals: application to acute toxicity for green algae. *J. Mol. Mod.* 2014, 20, 2508
7. Dulin F, Zatylny-Gaudin C, Ballandonne C, Guillet B, Bonafos R, Bureau R, Halm MP. Protecting honey bees: identification of a new varroacide by in silico, in vitro, and in vivo studies. *Parasitol. Res.*, 2014, 113, 4601-4610
8. Poulain L., Voisin-Chiret A. S., Sopkova- de Oliveira Santos J., Bureau R., Burzicki G., De Giorgi M., Perato S., Fogha J., Rault S., Juin Ph., Gautier F. Mcl-1 modulating compounds for cancer treatment. European Patent N° 14305309.8. 2014.

9. Raja Rezg, Bessem Mornagui, Jana Sopkova-de Oliveira Santos, Fabienne Dulin, Saloua El-Fazaa, Noomen Ben El-haj, Ronan Bureau and Najoua Gharbi. Protective effects of Caffeic acid against hypothalamic neuropeptides alterations induced by Malathion in rat. *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 2014, doi 10.1007/s11356-014-3824-5
10. Zouaoui Setifi, Fatima Setifi, Lahcen El Ammari, Malika El-Ghozzi, Jana Sopkova-de Oliveira Santos, Hocine Merazig and Christopher Glidewell. Poly[[chlorido(1,10-phenanthroline-κ2N,N')copper(II)]-μ3-1,1,3,3-tetracyano-2-ethoxypropenido-κ3N:N':N'']:coordination polymer sheets linked into bilayers by hydrogen bonds. *Acta Cryst.*, 2014, C70, 19–22
11. Peron F., Fossey C., Sopkova-de Oliveira Santos J., Cailly T., Fabis F. Room-Temperature ortho-Alkoxylation and –Halogenation of N-Tosylbenzamides by Using Palladiul(II)-Catalyzed C H Activation. *Chemistry – A European Journal* 2014, 20, 7507–7513

#### Articles dans des revues professionnelles spécialisées

1. Modélisation moléculaire et conception de nouveaux ligands d'intérêts biologiques, R. Bureau, Article encyclopédique, *Techniques de l'ingénieur*, 10 juin 2014, ref : PHA1015.

#### Communications dans des congrès internationaux

1. Poezevara, G.; Lepailleur, A.; Lozano, S.; Lemoine, L.; Cuissart, B.; Crémilleux, B.; Bureau, R.; Vayer, P., Knowledge discovery in pharmaceutical drug transport using emerging graph patterns, *10th International Conference on Chemical Structures*, Noordwijkerhout (The Netherlands), 1-5 Juin 2014.
2. Poezevara, G.; Lepailleur, A.; Lozano, S.; Arrault, A.; Cuissart, B.; Crémilleux, B.; Bureau, R.; Vayer, P., Automatic discovery of molecular graph patterns inhibiting multiple drug transporters, *4th Strasbourg Summer School on Chemoinformatics*, Strasbourg, 23-27 Juin 2014.
3. Lepailleur, A.; Jamous Delépée, C.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Milazzo, I.; Castel, H.; Dulin, F.; Haensele, E.; Banting, L.; Whitley, D.; Clark, T.; Essex, J.; Bureau, R., Peptide and non-peptide ligands of the Urotensin Receptor. Conformational analysis and definition of pharmacophores, *4th Strasbourg Summer School on Chemoinformatics*, Strasbourg, 23-27 Juin 2014.
4. Jamous Delépée, C.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Dulin, F.; Lepailleur, A.; Haensele, E.; Banting, L.; Whitley, D.; Clark, T.; Bureau, R., Non-peptide ligands of Arginine Vasopressin receptor (V2R) : Docking study and conformational analysis., *4th Strasbourg Summer School on Chemoinformatics*, Strasbourg, 23-27 Juin 2014.
5. Lepailleur A., Freret T., Lemaître S., Boulouard M., Dauphin F., Dulin F., Lesnard A., Rault S. and Bureau R., Discovery of dual histamine H3R / serotonin 5-HT4R ligands with anti-amnesic properties. *GP2A*, 28-29 août 2014.
6. Bureau, R.; Poezevara, G.; Lepailleur, A.; Cuissart B., Representative pruned graph patterns and the detection of toxicophores, *19th EuroQSAR St. Petersburg (Russia)*, 31 Août - 4 September 2014.
7. Jamous Delépée C., Lepailleur A., Sopkova-de Oliveira Santos J., Dulin F., Milazzo I., Guilhaudis L., Castel H., Haensele E., Banting L., Whitley D., Clark T., Essex J. and Bureau R., Drawing a parallel between the antagonist pharmacophore model of the Urotensin Receptor and the agonist docking studies. *GP2A*, Nantes, 28-29 août 2014. (communication orale).
8. J. Leprince, F. Dulin, C. Neveu, L. Galas, B. Lefranc, J. Chuquet, D. Vaudry, R. Bureau, J. Sopkova-de Oliveira Santos, Hubert Vaudry..Agonist docking in a GPR103 homology model: site-directed mutagenesis and structure-activity relationship studies. *Frontiers of Chemical Biology : Investigating Life with Chemistry, ITMO BMSV*, Paris, France, June 6th 2014.
9. J. Leprince, F. Dulin, C. Neveu, L. Galas, B. Lefranc, J. Chuquet, D. Vaudry, R. Bureau, J. Sopkova-de Oliveira Santos, H. Vaudry. Docking of 26RFa(19-26) in a GPR103 homology model and experimental validation by site-directed mutagenesis and structure-activity relationship studies. *50th International Conference on Medicinal Chemistry – Interfacing Chemical Biology and Drug Discovery, RICT 2014*, July 2-4 2014, Rouen, France.
10. Fogha J., Voisin-Chiret A.-S, Burzicki G., De Giorgi M., Perato S., Bureau R., Gloaguen C., Juin P., Poulain L., Rault S., Sopkova-de Oliveira Santos J. Discovery of Oligopyridyl Scaffolds as potent Mcl-1 Inhibitors. *50th International Conference on Medicinal Chemistry – Interfacing Chemical Biology and Drug Discovery, RICT 2014*, July 2-4 2014, Rouen, France.

11. J. Sopkova-de Oliveira Santos, C. Jamous Delépée, F. Dulin, A. Lepailleur, E. Haensele, T. Clark, R. Bureau. Molecular Modeling Study of the Vasopressin/ Vasopressin Receptor V2 Complex. *50th International Conference on Medicinal Chemistry – Interfacing Chemical Biology and Drug Discovery, RICT 2014*, July 2-4 2014, Rouen, France.

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Lepailleur, A.; Lemaitre, S.; Hirschberger, A.; Freret, T.; Boulouard, M.; Dauphin, F.; Rault, S.; Bureau R., Conception de nouveaux ligands multicibles dans le cadre de la maladie d'Alzheimer, *Journée 13-14*, Caen (France), 17 Avril 2014.
2. J. Villain, G. Durrieu, R. Bureau. Quantile de régression : application à l'analyse de l'écotoxicité de molécules chimiques, *Proceeding de la 46ème journée de la Société Française de Statistique*. Rennes. 2-6 juin 2014.
3. Fogha J., Voisin-Chiret A.-S, Burzicki G., De Giorgi M., Perato S., Bureau R., Gloaguen C., Juin P., Poulain L., Rault S., Sopkova-de Oliveira Santos J. An in silico approach for Mcl-1 inhibitors discovery. *Journées de l'Ecole Doctorale*, 10-11 avril 2014, Havre, France (communication orale).
4. Fogha J., Voisin-Chiret A.-S, Burzicki G., De Giorgi M., Perato S., Bureau R., Gloaguen C., Juin P., Poulain L., Rault S., Sopkova-de Oliveira Santos J. Discovery of Oligopyridyl Scaffolds as potent Mcl-1 Inhibitors. *Journées des Jeunes Chercheurs*, 24-25 mars 2014, Montpellier, France (communication orale).

**Thèses soutenues en 2014 sur le projet**

- Les interactions protéine-protéine comme sources de conception de nouveaux médicaments anticancéreux. Jade Fogha, Doctorat de l'Université de Caen (encadrement 30%), Spécialité Pharmacochimie et modélisation moléculaire, Octobre 2014, Ecole Doctorale Normande BISE.

**Thèses en cours sur le projet**

- Jonathan Villain : Estimation de l'(éco)toxicité d'une substance chimique par des méthodes à noyaux. (2012-). Ecole Doctorale SICMA (encadrement 50%), Université Européenne de Bretagne / Université de Caen.
- Clémence Riva : Mise en évidence de nouveaux composés anti-varroas (co-direction) 50% région Basse-Normandie, 50% VetoPharma.

**Stages de Master en 2014 sur le projet**

- Abdenour Braka (stage M2). Conception de nouveaux ligands multi-cibles par modélisation moléculaire : application à la maladie d'Alzheimer.

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- Pr T. Clark, Université de Portsmouth (UK)
- Pr J. Essex, Université de Southampton (UK)
- Dr B. Cuissart, GREYC, Unicaen (Fr)
- Dr J. Leprince, Inserm U413, Université de Rouen (UK)
- Pr G. Durrieu, UBS, Vannes (Fr)
- Pr. S. Rault, Dr AS Voisin-Chiret, Dr M. Di Giorgi, CERMN, Unicaen (Fr)
- Dr L. Poulain, BioTICLA Unit, Centre François Baclesse, EA4656, Caen (Fr)
- Dr P. Juin, Dr F. Gautier, UMR 892 Inserm - 6299 CNRS, Nantes (Fr)
- Pr H. Oulyadi, Dr. M. Seban, UMR 6014 CNRS, Rouen (Fr)

**4. RNMM : UMR 6014 COBRA****Intitulé : Laboratoire de chimie organique et analytique**

Responsable : OULYADI Hassan

Laboratoire : UMR6014 CNRS, Université et INSA de Rouen - COBRA

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

**Publications de rang A**

1. Leriche E-D, Afonso C, Lange CM, Gossel M, Truong L, Coadou G, Oulyadi H, Loutelier-Bourhis C., Glycine-modified polyamidoamine dendrimers: Synthesis and structural characterization using nuclear magnetic resonance, ion-mobility mass spectrometry and capillary electrophoresis, *RSC Advances* (2014), 4, 1744-1753 DOI 10.1039/C3RA43939A
2. Loidreau Y, Deau E, Marchand P, Nourrisson MR, Logé C, Coadou G, Loaëc N, Meijer L, Besson T., Synthesis and molecular modelling studies of 8-arylpyrido[3',2':4,5]thieno[3,2-d]pyrimidin-4-amines as multitarget Ser/Thr kinases inhibitors, *Eur J Med Chem.* (2014) Dec 23;92C:124-134. DOI 10.1016/j.ejmech.2014.12.038.
3. Poyer S, Loutelier-Bourhis C, Coadou G, Mondeguer F, Enche J, Bossée A, Hess P, Afonso C., Identification and separation of saxitoxins using hydrophilic interaction liquid chromatography coupled to traveling wave ion mobility-mass spectrometry, *J Mass Spectrom.* (2015) Jan;50(1):175-81. doi: 10.1002/jms.3515

**Communications dans des congrès internationaux**

1. Ségalas-Milazzo, I.; Marotte, A.; Buchet, I.; Lefranc, B.; Neveu, C.; Chartrel, N.; Vaudry, H.; Ganesan, A.; Leprince, J.; Guilhaudis, L., Effects of the conformation on the activity of 26RFa, an orexigenic neuropeptide, *33<sup>th</sup> European Peptide Symposium*, Sofia (Bulgarie), 30 août – 5 sept. 2014
2. Guilhaudis L., Marotte A., Buchet I., Lefranc B., Neveu C., Chartrel N., Vaudry H., Ganesan A., Leprince J., Ségalas-Milazzo I., Investigation of the bioactive conformation of 26RFa, a orexigenic peptide, *14<sup>th</sup> Naples Workshop on bioactive peptides*, Naples (Italie) 12-14 juin 2014 (communication par affiche)
3. Poyer S.; Loutelier-Bourhis C.; Mondeguer F.; Enche J.; Coadou G.; Bossée; A. Hess P.; Afonso C., Characterization of Paralytic Shellfish Poisons by HILIC-IM-MS coupling , *62<sup>nd</sup> ASMS Conference 2014* abstract 1878, 15-19/6/2014. Baltimore

**Communications dans des congrès nationaux**

1. Poyer, S.; Loutelier-Bourhis, C; Coadou, G.; Mondeguer, F.; Enche, J.; Bossée, A. Hess, P.; Afonso, C., Characterization of paralytic shellfish poisons by HILIC-IM-MS coupling, *2<sup>ème</sup> journée du Club Chromatographie du val de Seine*, 26/06/2014, Rouen – France (Communication orale)

**Thèses en cours sur le projet**

- Riham NAJJAR, 2014-2017, Analyse structurale de peptides urotensinergiques par Résonance Magnétique Nucléaire (RMN) et Modélisation Moléculaire

**Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)**

- U982 INSERM, Rouen, Dr. H. Castel, Dr. N. Chartrel, Dr. J. Leprince, Dr. H. Vaudry
- UMR CNRS 6214 – INSERM U771, Angers, Dr. M. Chabbert
- University of East Anglia, Royaume-Uni, Dr. Ganesan