



Normandie Université

Pôle Régional de Modélisation Numérique

Références des Publications des laboratoires utilisateurs pour l'année 2015

Référence du document : RA-PUBLIS-2015 - Révision 01 - Date de création : 03/02/2016

Validation : 30 mai 2016 (HP)

Documents référencés : N/A

Résumé : Liste des Publications des laboratoires utilisateurs du PRMN (service de calcul intensif) pour l'année 2015.

Révisions :

- 01 : première version publiée

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	9
Intitulé : Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	
Projet : 2002003	9
Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	
Projet : 2003008	10
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	11
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	12
Intitulé : Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins".	
Projet : 2005004	12
Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands	
Projet : 2005010	13
Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.	
Projet : 2005013	14
Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.	
Projet : 2006003	14
Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.	
Projet : 2006007	16
Intitulé : Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc	
Projet : 2006011	16
Intitulé : Simulation d'écoulements liquide-gaz : DNS et LES	
Projet : 2006013	17
Intitulé : Etude par DFT du mécanisme de la cooligomérisation 2:1 d'Alcynes et d'alcènes catalysée par les complexes du cobalt	
Projet : 2007001	17
Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement	

Projet : 2007013	19
Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés	
Projet : 2008005	19
Intitulé : Etude du processus d'agrégation dans les solutions aqueuses : Analyse par simulation de dynamique moléculaire classique et quantique	
Projet : 2008013	19
Intitulé : Simulations découlements fluides réactifs - Interactions flamme/paroi, combustion petite échelle, combustion stratifiée	
Projet : 2008018	20
Intitulé : Benchmark de modèles d'incendie	
Projet : 2010006	21
Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique	
Projet : 2010010	21
Intitulé : Topologie quantique	
Projet : 2011001	22
Intitulé : Etude théorique du mécanisme d'une réaction de carbométallation intramoléculaire	
Projet : 2011007	22
Intitulé : Modélisation de systèmes nanostructurés : nanoparticules magnétiques, conducteurs ioniques	
Projet : 2011012	23
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 : 2012004	23
Intitulé : Modélisation d systèmes biologiques complexes, des métalloprotéines	
Projet : 2012006	24
Intitulé : Simulation hautes-fidélités de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe	
Projet : 2012008	25
Intitulé : Modélisation des joints de grains sous irradiation	
Projet : 2012013	26
Intitulé : Simulation STEM - HAADF	
Projet : 2012016	26
Intitulé : Classification de molécules	
Projet : 2013005	27
Intitulé : Agrégats d'acide phosphorique pour l'étalonnage en spectrométrie de masse couplée à la mobilité ionique	
Projet : 2013006	27
Intitulé : Imagerie mathématique et analyse numérique	
Projet : 2013010	28
Intitulé : Modélisation numérique de l'impact hydro-sédimentaire de l'implantation de systèmes récupérateurs d'énergie	
Projet : 2013019	28

Intitulé : Modélisation de la pollution atmosphérique : couplage des échelles locales et régionales - modèles SIRANE 2.0 et CHIMERE.	
Projet : 2014002	29
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	29
Intitulé : Etude de mécanisme de diffusion à l'interface dans les semi-conducteurs III-V.	
Projet : 2014005	30
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	30
Intitulé : Modèle Conceptuel Modulaire	
Projet : 2014007	30
Intitulé : Conduction électrique le long des dislocations dans les nano-fils de matériaux nitrures-III.	
Projet : 2014008	31
Intitulé : Développement de nouveaux descripteurs atomiques et moléculaires pour la caractérisation des liaisons "faibles".	
Projet : 2014010	32
Intitulé : Matériaux composites hybrides par intégration de plis lin dans des structures stratifiés carbone.	
Projet : 2014011	32
Intitulé : Simulations de la turbulence de Couette-Taylor en présence de Gradient de température radial.	
Projet : 2014012	32
Intitulé : Transition laminaire-turbulent dans un tube de section circulaire avec un élargissement.	
Projet : 2014015	33
Intitulé : Cinétique de transformation de phase dans les superalliages à base Ni et Co	
Projet : 2014016	33
Intitulé : Étude des thioglycosyltransférases UGT74B1 et UGT74C1 d'Arabidopsis Thaliana par modélisation moléculaire et spectroscopie RMN.	
Projet : 2015003	33
Intitulé : Simulation du mélange à viscosité variable	
Projet : 2015004	34
Intitulé : Modélisation des propriétés magnétiques d'oxydes de métaux de transition anisotropes.	
Projet : 2015005	34
Intitulé : Taylor-Couette turbulent avec transfert de chaleur	
Projet : 2015007	35
Intitulé : Structure et Dynamique dans les mélanges liquides ioniques/solvants moléculaires	
Projet : 2015008	35
Intitulé : Etude théorique d'une surface de silice modifiée et rationalisation des interactions phase stationnaire/composé aromatique cible.	

Projet : 2015009	36
Intitulé : Rationalisation du moment dipolaire de deux molécules pharmaceutiques durant la rotation de groupements flexibles.	
Projet : 2015011	36
Intitulé : Impact des organismes fixés sur l'hydrodynamique au voisinage d'hydroliennes.	
Projet : 2015012	36
Intitulé : Exposition aux dioxines et risque de cancer du sein (Projet GEO3N). Modélisation de la dispersion des dioxines dans différents milieux pour le développement et la validation d'un score d'exposition applicable dans des études épidémiologiques.	
Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire	37
RNMM : SMS EA 3233	37
Intitulé : Sciences et méthodes séparatives	
RNMM : Plateforme PISSARO	38
Intitulé : Utilisation de l'outil MASCOT pour l'identification des protéines	
RNMM : CERMN	40
Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie	
RNMM : UMR 6014 COBRA	40
Intitulé : Laboratoire de chimie organique et analytique	

A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIANN pour l'année 2015. Il regroupe les travaux effectués par les laboratoires utilisateurs des ressources mises à disposition par le CRIANN 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 CRIANN/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 CRIANN 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 - EA 3226 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 104 416

Publications de rang A

1. J.-G. Caputo, G. Cruz-Pacheco and P. Panayotaros, *J. Phys. A: Math. Theor.* 48, 075102, (2015).
2. J.-G. Caputo, I. Gabitov and A.I. Maimistov, *Phys. Rev. B* in press (2015)

Communications dans des congrès internationaux

1. J.-G. Caputo, R. Gerbaldo, J. Noudem, G. Ghigo, L. Dupont, F.Laviano, P. Bernstein, L. Gozzelino, Trapped field in bulk MgB2 superconductor fabricated by Spark Plasma Sintering. Poster à la Conférence EUCAS, Lyon, Septembre 2015.

Thèses en cours sur le projet

- Imene KHAMES « Flux non-linéaires sur des réseaux »

Stages de Master en 2015 sur le projet

- A. Vieira, réaction-diffusion.
- J.B. Rouault, dynamique de réseaux.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- D. Dutykh (Chambery)
- R. Melin (Grenoble)

Autres informations : articles soumis

1. R. Melin, M. Sotto, D. Feinberg, J.G. Caputo et B. Doucot, soumis à *Phys. Rev. B*, <http://arxiv.org/abs/1511.08436>
2. J.G. Caputo, D. Dutykh and B. Gleyse, soumis à *IMA J appl math*, <http://arxiv.org/abs/1509.09082>

2. Projet : 1998022

Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

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

Heures.CPU 2015 : 1 330 642

Publications de rang A

1. Taguelmimt, N. Danaila, L., Hadjadj, A. Effect of viscosity gradients on mean velocity profile in temporal mixing layer. *Journal of Turbulence* (2016).
2. Kotov, D., Yee, H.C., Wray, A., Hadjadj, A. Sjogreen, B. High Order Numerical Methods for the Dynamic SGS Model of Turbulent Flows with Shocks. *Communications in Computational Physics*, 19(2), 273-300 (2016).

3. Taguelmimt, N. Danaila, L., Hadjadj, A. Effects of viscosity variations in temporal mixing layer. *Flow, Turbulence and Combustion*, 96(1), 163-181 (2016).
4. Verma, S.B., Hadjadj, A. Supersonic flow control. *Shock Waves*, 25, 443–449 (2015).
5. Sow, A., Chinnayya, A., Hadjadj, A. Computational study of non-ideal and mildly-unstable detonation waves. *Computers & Fluids*, 119, 47-57, (2015).
6. Verma, S.B., Hadjadj, A., Haidn, O. Unsteady Flow Conditions During Dual-Bell Sneak Transition. *AIAA, Journal of Propulsion and Power*, 31(4), 1175-1183 (2015).
7. Jourdan, G., Mariani, C., Houas, L., Chinnayya, A., Hadjadj, et al. Analysis of shock-wave propagation in aqueous foams using shock tube experiments. *Physics of Fluids*, 27, 056101 (2015).
8. Hadjadj, A., Perrot, Y., Verma, S.B. Numerical Study of Shock/Boundary Layer Interaction in Supersonic Overexpanded Nozzles. *Aerospace Science and Technology*, 42, 158-168 (2015).
9. Shadloo, M.S., Hadjadj, A., Hussain, F. Statistical behavior of supersonic turbulent boundary layers with heat transfer at M=2. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 53, 113–134 (2015).
10. Hadjadj, A., Ben-Nasr, O., Shadloo, M.S., Chaudhuri A. Effect of wall temperature in supersonic turbulent boundary layers : A numerical study. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 81, 426–438 (2015).

Communications dans des congrès internationaux

1. Sow, A., Chinnayya, A., Hadjadj, A. Numerical simulations of mildly unstable gaseous detonations in small channels. 25rd International Colloquium of the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS), Leeds, UK, 2-7 August 2015.
2. Soni, V., Hadjadj, A., Geva, M., Ram, O., Sadot, O., Ben-Dor, G. Computational study of shock waves reflection over concave double wedges reflectors. 30th International Symposium on Shock Waves (ISSW28), Tel-Aviv, Israël, 19-24 July 2015.
3. Piquet, A., Georges-Picot, A., Hadjadj, A. Unsteadiness of supersonic flows in convergent divergent nozzles. 30th International Symposium on Shock Waves (ISSW28), Tel-Aviv, Israël, 19-24 July, 2015.
4. Kotov, D.V., Yee, H.C., Wray, A., Hadjadj, A., Sjogreen, B. High Order Numerical Methods for the Dynamic SGS Model of Turbulent Flows with Shocks. 22nd AIAA Computational Fluid Dynamics Conference Dallas, Texas, USA, 2015

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- TAGUELMIMT Noureddine. Etude numérique de l'écoulement de couche de mélange temporelle à viscosité variable. Thèse de doctorat soutenue le 19/11/2015 à l'INSA de Rouen

Thèses en cours sur le projet

- SONI Vineet. Thèse de doctorat (en cours) Université de Rouen, soutenance prévue Nov. 2016
- PIQUET Arthur. Thèse de doctorat (en cours) INSA de Rouen, soutenance prévue Nov. 2016

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Collaboration dans le cadre du projet ANR MAPIE avec l'Ecole Centrale Paris et l'Université de Nantes.

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

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Nohad GRESH

Laboratoire : LPMS / FRE 2463 CNRS (PARIS)

Heures.CPU 2015 : 194 361

Publications de rang A

1. K. El Hage, J.-P. Piquemal, Z. Hobaika, R. G. Maroun, N. Gresh., Approaching the double-faceted nature of the CX bond in halobenzenes with a bifunctional probe, *Chem. Phys. Letts.* 2015, 637, 51-57.
2. N. Gresh, J. E. Sponer, M. Devereux, K. Gkionis, B. De Courcy, J.-P. Piquemal, J. Sponer. Stacked and H-Bonded Cytosine Dimers. Analysis of the Intermolecular Interaction Energies by Parallel Quantum Chemistry and Polarizable Molecular Mechanics. *J. Phys. Chem. B.*, 2015, 119, 9477-9495. DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b01695
3. Q. Wang, J. A. Rackers, C. He, R. Qi, C. Narth, L. Lagardere, N. Gresh, J. W. Ponder, J.-P. Piquemal, P. Y. Ren, General Model for Treating Short-Range Electrostatic Penetration in a Molecular Mechanics Force Field. *J. Chem. Theory Comput.* 2015, 11, 2609- 2618. DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00267
4. K. El Hage, J.-P. Piquemal, Hobaika, Z.; Maroun, R. G.; Gresh, N., Could the 'Janus-like' Properties of the Halobenzene CX Bond (X=Cl, Br) Be Leveraged to Enhance Molecular Recognition? *J. Comput. Chem.* 2015, 36, 210-221. DOI: 10.1002/jcc.23786
5. 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, 36, 285-302. DOI: 10.1002/jcc.23801
6. Chapitre de livre : Nohad Gresh, Krystel El Hage, Elodie Goldwaser, Benoit de Courcy, Robin Chaudret, David Perahia, Christophe Narth, Louis Lagardere, Filippo Lipparini and Jean-Philip Piquemal. Addressing the Issues of Non-isotropy and Non-additivity in the Development of Quantum Chemistry-Grounded Polarizable Molecular Mechanics. *Quantum Modelling of Complex Molecular Systems*, J.-L. Rivail, M. Ruiz-Lopez, X. Assfeld, Eds., Springer, 2015, pp. 1-49.

Communications dans des congrès internationaux

1. Nohad Gresh, Addressing the issues of non-isotropy and non- additivity in the development of QC-grounded polarizable MM/MD potentials, *Modelling Interactions in Biomolecules*, Prague, 13-18 Septembre 2015, J. Burda, organisateur.

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

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Jérôme YON

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

Heures.CPU 2015 : 45 182

Publications de rang A

1. M. Yang, K. F. Ren, T. Petkov, B. Pouligny, J.C. Loudet, X. Sheng, "Computational study of radiation torque on arbitrary shaped particles with MLFMA", *Opt. Express* 23(18), 23365-23379, 2015
2. M. Yang, Y. Wu, X. Sheng and K. F. Ren, "Comparison of scattering diagrams of large non-spherical particles calculated by VCRM and MLFMA", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 10.1016/j.jqsrt.2015.01.024, 2015

3. Y. Wu, M. Yang, X. Sheng and K. F. Ren, "Computation of scattering matrix elements of large and complex shaped absorbing particles with multilevel fast multipole algorithm", J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 10.1016/j.jqsrt.2015.02.005, 2015
4. J. Yon, A. Bescond, and F. Liu, "On the radiative properties of soot aggregates part 1: Necking and overlapping," Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, vol. 162, pp. 197-206, 2015.

Communications dans des congrès internationaux

1. K.F. Ren, F.R.A. Onofri, M. Yang, and X. Sheng "The fine structure in the scattering diagrams of large ellipsoidal particle predicted by Vectorial Complex Ray Model", 9th International Symposium on Measurement Techniques for Multiphase Flows – ISMTMF, Sapporo (Japan), 23-25 Sept. 2015
2. K.F. Ren "Scattering of a Gaussian beam by an Ellipsoidal particle with Vectorial Complex Ray Model" , PIERS - Progress In Electromagnetics Research Symposium PIERS 2015 in Prague, Czech Republic, 06-09 July, 2015
3. F.R.A. Onofri*, K.F. Ren, Q. Gaubert, and M. Sentis "Fine structures of the near-backward scattering of single spheroid droplets: characterization of size and temperature" , Electromagnetic & Light Scattering (ELS-XV), Leipzig, (Germany), June 21-26th, 2015
4. J. Yon, A. Bescond, and F. Liu, "Impact of the necking and overlapping of soot aggregates on their radiative properties," in Workshop on Light Scattering, Bremen (Germany), 2015.
5. J. Yon, A. Bescond, and F. Liu, "Effects of organic coating on the radiative properties of soot aggregates.," in Computational Thermal Radiation in Participating Media V, Albi, France., 2015.
6. J. Yon, A. Coppalle, M. Talbaut, A. Bescond, A. Valencia, and D. Hebert, "Optical diagnostic for soot particles," in P4TA-CERTAM International Workshop: Characterization of Complex Nanoaerosol Emissions: metrology, health and environmental issues., Rouen, France, 2015.

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- A. Bescond, "Contribution à la métrologie des nanoparticules de suie et à la caractérisation des particules produites par un générateur de référence," soutenue le 16 septembre 2015 à Saint Etienne du Rouvray.

Thèses en cours sur le projet

- Zelong MA, « Validation Expérimentale du Modèle de Tracé de Rayons Vectoriels Complexes », soutenance prévue septembre 2017
- Guillaume Lefevre, «Caractérisation des propriétés radiatives des particules de suies en présence de composés organiques», 01/10/15-01/10/18.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Xinqing Sheng, Center for Electromagnetic Simulation, School of Information and Electronics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China.
- Fengshan Liu, Measurement Science and Standards, National Research Council Canada.

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 2015 : 1 039 522

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- Geoffroy VAUDOR, Atomisation assistée par un cisaillement de l'écoulement gazeux. Développement et validation, Université de Rouen, 8 avril 2015.

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Grégory PINON

Laboratoire : LOMC (LE HAVRE)

Heures.CPU 2015 : 1 357 093

Communications dans des congrès internationaux

1. Carlier Clement, Pinon Grégory, Gaurier Benoit, Germain Gregory, Rivoalen Elie (2015). Numerical and experimental study of elementary interactions in marine current turbines array. *11th EWTEC 2015 - European Wave and Tidal Energy conference (EWTEC)*, 6-11th Sept 2015, Nantes, France.
Carlier Clement, Pinon Grégory, Gaurier Benoit, Germain Gregory, Rivoalen Elie (2015). A Synthetic Eddy
2. Method to represent the ambient turbulence in numerical simulation of marine current turbine. *11th EWTEC 2015 - European Wave and Tidal Energy conference (EWTEC)*, 6-11th Sept 2015, Nantes, France.

Thèses en cours sur le projet

- Arnaud Fur - débutée en novembre 2015 - Étude numérique du comportement de membranes ondulantes. Thèse co-financée Région Haute Normandie / IFREMER
- Clément Carlier - débutée en décembre 2013 – Simulation du comportement d'hydroliennes dans des conditions de fonctionnement réalistes. Thèse co-financée Région Haute Normandie / IFREMER (Institut Carnot)
- Xuezhou Lu - débutée en novembre 2012 - 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

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 : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 36 496

Publications de rang A

1. J. Marchois, C. Fressigné, B. Lecachey; J. Maddaluno ; Base or nucleophile? DFT finally elucidates the origin of the selectivity between the competitive reactions triggered by MeLi or LDA on propanal, *Chem. Commun.* 2015, 51, 3458-3461 DOI: 10.1039/C5CC01549A
2. Lesage, D.; Barozzino-Consiglio, G.; Duwald, R.; Harrison-Marchand, A.; Fressigné, C.; Faull, K. F.; Maddaluno, J.; Gimbert, Y., A lithium amide protected against protonation in the gas phase: unexpected effect of LiCl, *J. Org. Chem.* 2015, 80, 6441–6446. DOI:10.1021/acs.joc.5b00875
3. Barozzino-Consiglio, G.; Yuan, Y.; Fressigné, C.; Harrison-Marchand, A.; Oulyadi, H.; Maddaluno, Enantioselective alkynylation of aldehydes by mixed-aggregates of 3-aminopyrrolidine lithium amides and lithium acetylides *J. Organometallics*, 2015, 34, 4441–4450. DOI: 10.1021/acs.organomet.5b00647

Communications dans des congrès internationaux

1. J. Maddaluno, Organolithium chemistry: an analytical resurrection, *10th International School on Organometallic Chemistry (ISOC-10)*, Camerino (Italie), 5-9 septembre 2015

Thèses en cours sur le projet

- Pauline Barrois, 1ère année de thèse

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Pr. Hassan Oulyadi, Laboratoire COBRA, Université de Rouen.
- Pr. Hélène Gérard, Laboratoire de Chimie Théorique, UPMC, Paris.
- Dr. Yves Gimbert, Département de Chimie Moléculaire, Université de Grenoble.
- Pr. Annie-Claude Gaumont, Laboratoire de Chimie Moléculaire et Thioorganique, ENSI Caen.

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

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

Porteur : Denis LEDUE

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

Heures.CPU 2015 : 651

Voir projet n° 2010006

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 - UNICAEN EA 4258 (CAEN)

Heures.CPU 2015 : 23 803

Communications dans des congrès internationaux

1. Rezg R., Mornagui B., Sopkova-de Oliveira Santos J., Dulin F., El-Fazaa S., Ben El-haj N., Bureau R. and Gharbi N. Protective effects of caffeic acid against hypothalamic neuropeptides alterations induced by malathion in rat. *Environ Sci Pollut Res.* 2015, 22 (8), 6198-6207.
2. Gloaguen C., Voisin-Chiret A S, Sopkova-de Oliveira Santos J., Fogha J., Gautier F., De Giorgi M., Burzicki G., Perato S., Pétigny-Lechartier C., Simonin-Le Jeune K., Brotin E., Goux D., N'Diaye M., Lambert B., Louis M.-H., Liguat L., Lopez F., Juin P., Bureau R., Rault S. and Laurent Poulain L. First Evidence that Oligopyridines, Alpha Helix Foldamers, Inhibit Mcl-1 and Sensitize Ovarian Carcinoma Cells to Bcl-xL-Targeting Strategies. *J. Med. Chem.*, 2015, 58 (4), 1644–1668.
3. Rochais C., Lecoutey C., Gaven F., Giannoni P., Hamidouche K., Hedou D., Dubost E., Genest D., Yahiaoui S., Freret T., Bouet V., Dauphin F., Sopkova de Oliveira Santos J., Ballandonne C., Corvaisier S., Malzert-Fréon A., Legay R., Boulouard M., Claeyssen S. Dallemagne P. Novel Multitarget-Directed Ligands (MTDLs) with Acetylcholinesterase (AChE) Inhibitory and Serotonergic Subtype 4 Receptor (5-HT4R) Agonist Activities As Potential Agents against Alzheimer's Disease: The Design of Donecopride. *J. Med. Chem.*, 2015
4. Camacho E., Aguila B., Elie N., Sopkova J., Martel C., Davis A., Lecoutey C. and Allouche S. Regulation of the Human Delta-Opioid Receptor by Alkaloids: Different Roles of Arrestins Neurochemistry & Neuropharmacology: Open Access doi:10.4172/ncoa.1000101

Communications dans des congrès nationaux

1. J. Fogha, G. Burzicki, M. Di Giorgi, Serge Perato, C. Gloaguen, P. Juin, L. Ligat, F. Lopez, A. S. Voisin-Chiret, L. Poulain, R. Bureau, J. Sopkova-de Oliveira Santos. Discovery of Oligopyridyl scaffold molecules as potent Mcl-1 inhibitors. Sopkova-de Oliveira Santos, J. 4ème congrès du GT Enzymes et 19ème congrès du GGMM, Sète, 25 - 28 Mai 2015.
2. J. Sopkova-de Oliveira Santos, Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands : conception de puissants inhibiteurs de la protéine Mcl-1. 3e journée « Mésochallenges », 7 octobre 2015.

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 2015 sur le projet

- Nicolas Maillet (stage M1) : Découverte d'antagonistes non peptidiques du GPR103 par approche pharmacophorique.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Projet Interactions protéine-protéine : La ligue contre le cancer, CRUNCH
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)
- Polypharmacologie - ANR Jeunes Chercheurs MALAD, LECMA
CERMN (Prof P. Dallemagne, Dr C. Rochais)
GMPc, Université de Caen Basse-Normandie (Prof M. Boulouard)
IGF, CNRS Université Montpellier, (Dr S. Claeysen)
- Projet GPCR
Unité INSERM U413, Rouen (Dr H. Vaudry, Dr J. Leprince)
Université de Portsmouth (Prof T. Clark)
Université de Southampton (Prof J. W. Essex)

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Eric HENON

Laboratoire : UMR 6519 (REIMS)

Heures.CPU 2015 : 201

Publications de rang A

1. Thomas Haschka, Eric Hénon*, Christophe Jaillet, Laurent Martini, Catherine Etchebest and Manuel Dauchez, « Alternative to the Traditional L2 Norm to Derive Partial Atomic Charges », Comp. Theor. Chem. 1074 (2015), 50

2. Thomas Hashka, Eric Hénon and Manuel Dauchez , « Visualization of molecular properties at the quantum mechanical level using Blender », International Workshop on Virtual and Augmented Reality for Molecular Science, Pub. IEEE (2015), 7-13

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 : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 10 912

Publications de rang A

1. Andreini, M.; De Paolis, M.; Chataigner, I. Catal, Thiourea-catalyzed dearomatizing [4+2] cycloadditions of 3-nitroindole, *Commun.* 2015, 63, 15-20.
2. Bailly, L.; Petit, E.; Maeno, M.; Trapp, O.; Cardinael, P.; Chataigner, I.; Cahard, D., Enantiomerisation of Allylic Trifluoromethyl Sulfoxides studied by HPLC analysis and DFT calculations, accepté pour publication dans *Chirality*.

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- Thèse de Maxime Beuvin, Dérivés benzéniques comme composants à deux électrons en cycloadditions : nouveaux processus désaromatisants, 30 janvier 2015.

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Karine Pasturaud, soutenance prévue fin 2016

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Programme de collaboration avec Hélène Gérard (LCT, UMR CNRS 7616, UPMC) Etude théorique DFT.
- Programme de collaboration avec Dominique Cahard (COBRA, UMR CNRS 6014, Université de Rouen) Etude théorique DFT.
- Programme de collaboration avec Cyrille Kouklovsky (ICMMO, UMR 8182, Université de Paris-Sud, Orsay). Etude de réactions nitrosocycloadditions

12. Projet : 2006003

Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.

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

Porteur : Pascale DOMINGO

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

Heures.CPU 2015 : 750 588

Publications de rang A

1. G. Lodier, P. Domingo, L. Vervisch (2015) Quantification of the pre-ignition front propagation in DNS of rapidly compressed mixture, *Flow. Turbulence and Combustion*, 94(1): 219-235.
2. L. Cifuentes, C. Dopazo, J. Martin, P. Domingo, L. Vervisch (2015) Local volumetric dilatation rate and scalar geometries in a premixed methane-air turbulent jet flame. *Proc. Combust. Inst.*, 35(2): 1295-1303.
3. P. Domingo, L. Vervisch (2015) Large Eddy Simulation of premixed turbulent combustion using approximate deconvolution and explicit flame filtering, *Proc. Combust. Inst.*, 35(2): 1349-1357.
4. G. Ribert, D. Taieb, V. Yang (2015) Large-eddy simulation of a supercritical channel flow using a shock capturing numerical scheme, *Computers and Fluids* (117).

5. X. Petit, G. Ribert, P. Domingo (2015) Framework for real-gas compressible reacting flows with tabulated thermochemistry, *J. Supercritical Fluids* (101).
6. B. Denet, L. Biamino, G. Lodato, L. Vervisch and P. Clavin (2015), Model equation for the dynamics of wrinkled shock waves. Comparison with DNS and experiments, *Combustion Science and Technology*, 187, 296--323.
7. B. Farcy, L. Vervisch, P. Domingo (2015) Large Eddy Simulation of selective non-catalytic reduction (SNCR): A downsizing procedure for simulating nitric-oxide reduction units. Accepted *Chemical Engineering Science*.
8. A. Abou-Taouk, B. Farcy, P. Domingo, L. Vervisch, S. Sadasivuni, L.-E. Eriksson Optimized reduced chemistry and molecular transport for Large Eddy Simulation of partially premixed combustion in a gas turbine, *Combust. Sci. Tech.* (sous presse).
9. B. Farcy, L. Vervisch, P. Domingo, N. Perret (2015) Reduced-order modeling for the control of selective non-catalytic reduction (SNCR) of nitrogen monoxide. Accepted *AIChE Journal*.

Communications dans des congrès internationaux

1. B. Duboc, P. Domingo, G. Ribert, Simulating kerosene/air flames with Hybrid Transported-Tabulated Chemistry, *7th ECM* (Budapest, Hungary), 2015.
2. B. Duboc, P. Domingo, G. Ribert, From fully premixed to highly stratified combustion using Hybrid Transported Tabulated Chemistry, *15th ICNC* (Avignon, France), 2015.
3. B. Duboc, P. Domingo, G. Ribert, Simulating kerosene/air flames with Hybrid Transported-Tabulated Chemistry. *LBV* (Rouen, France), 2015.
4. G. Ribert, X. Petit, P. Domingo, N. Vallée, Boundary conditions treatment for supercritical flows with tabulated thermochemistry. *SciTech, 53rd AIAA ASM Conference*, Kissimmee, Florida (USA), 2015, AIAA-2015-1610.
5. N. Jaouen, P. Domingo, L. Vervisch, Using genetic algorithm for reduced chemical schemes optimization. *7th ECM* (Budapest, Hungary), 2015.
6. N. Jaouen, L. Vervisch, P. Domingo, Using genetic algorithms for optimizing reduced chemical-scheme for turbulent flames simulation. *15th ICNC* (Avignon, France), 2015.
7. E. Bossenec, G. Lodato, L. Vervisch, A new approach to secure scalar boundedness in flame simulation with high-order spectral difference methods on unstructured meshes, *15th ICNC* (Avignon, France), 2015.
8. G. Lodato, L. Vervisch, and P. Clavin, Direct Numerical Simulation of Shock-Wavy-Wall Interaction by High-Order Spectral Difference Methods, *13th U.S. National Congress on Computational Mechanics*, Jul. 26-30, 2015, San Diego, CA (USA).
9. E. Bossenec, G. Lodato, and L. Vervisch., A Scalar Limiting Algorithm for High-Order Methods}. *13th U.S. National Congress on Computational Mechanics*, Jul.26-30, 2015, San Diego, CA (USA).
10. B. Farcy, D. Midou, L. Vervisch, P. Domingo, Laboratory-scale downsizing procedure for highly resolved LES of large-scale combustion system, *15th ICNC* (Avignon, France), 2015.

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- Benjamin Farcy, Analyse des mécanismes de destruction non-catalytiques des Oxydes d'Azote (DeNOx) et application à la simulation aux grandes échelles (LES) d'un incinérateur. Encadrants L. Vervisch / P. Domingo

Thèses en cours sur le projet

- Eurielle Bossenec, encadrants L. Vervisch / G. Lodato
- Dorian Midou, encadrants L. Vervisch / P. Domingo
- Nicolas Jaouen, encadrants P. Domingo/L. Vervisch
- Bastien Duboc, encadrants P. Domingo/G. Ribert
- Umut Ulven, encadrant G. Ribert
- Kevin Bioche, encadrants L. Vervisch / G. Ribert
- Loïc Ruan, encadrants P. Domingo / G. Ribert

13. 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 : GPM - UMR 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2015 : 101 870

Voir projet n° 2012008

14. 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 2015 : 263 364

Communications dans des congrès internationaux

1. M Cailloux, J Helie, J Reveillon and F X Demoulin, Large Eddy Simulation of a Cavitating Multiphase Flow for Liquid Injection, Cav2015, Lausanne
2. N. Hecht, F.X. Demoulin, J. Reveillon, Towards general purpose LES model of atomization, ICLASS 2015, Taiwan

Thèses en cours sur le projet

- Javier Anez Perdomo : Modélisation de l'injection de pétrole pour les procédés FCC (Fluid Catalytic Cracking)
- Félix Dabonneville : Association de méthode SPH et Eulériennes pour la modélisation de l'atomisation.

Stages de Master en 2015 sur le projet

- Guillaume Sahut, Etude de l'évaporation en écoulement turbulent

Autres informations : article soumis

- Z. Bouali, B. Duret, F.-X. Demoulin, A. Mura, DNS analysis of small-scale turbulence-scalar interactions in evaporating two-phase flows. Submitted. International Journal of Multiphase Flows, 2015.

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Vincent GANDON

Laboratoire : UMR 7611, C229 (PARIS 05)

Heures.CPU 2015 : 23 187

Publications de rang A

1. Wu, Z.; Retailleau, P.; Gandon, V.; Voituriez, A.; Marinetti, A., Use of Planar Chiral Ferrocenylphosphine-Gold(I) Complexes in the Asymmetric Cycloisomerization of 3-Hydroxylated 1,5-Enynes. *Eur. J. Org. Chem.* 2015, accepté.
2. Michelet, B.; Thiery, G.; Bour, C.; Gandon, V., On the Non-Innocent Behavior of Substrate Backbone Esters in Metal-Catalyzed Carbocyclizations and Friedel-Crafts Reactions of Enynes and Arenynes. *J. Org. Chem.* 2015, 80, 10925.
3. Hromjakova, T.; Retailleau, P.; Grimaud, L.; Gandon, V.; Chabaud, L.; Guillou, C., Hypervalent Iodine-Mediated Synthesis of 1,2-Dispirodienones: Experimental and Theoretical Investigations. *Eur. J. Org. Chem.* 2015, 7494.
4. Riveira, M. J.; Quiroga, G. N.; Mata, E. G.; Gandon, V.; Mischne, M. P., Cycloisomerization of Conjugated Trienones and Isomeric 2H-Pyrans: Unified Strategy toward Cyclopenta[b]furans. *J. Org. Chem.* 2015, 80, 6515.
5. Bour, C.; Guillot, R.; Gandon, V., First Evidence for the Existence of Hexafluoroantimonic(V) Acid. *Chem. Eur. J.* 2015, 21, 6066.
6. Albright, T. A.; Drissi, R.; Gandon, V.; Oldenhof, S.; Oloba-Whenu, O. A.; Padilla, R.; Shen, H.; Vollhardt, K. P. C.; Vreeken, V., The Primary Photoproduct in the Intercyclobutadiene Haptotropism of CpCophenylenes is a Terminal, Fluxional η^4 -Benzene Complex with a Thermally Accessible Triplet State. *Chem. Eur. J.* 2015, 21, 4546.
7. Pisset, M.; Michelet, B.; Guillot, R.; Bour, C.; Bezzenine-Lafollée, S.; Gandon, V., Gallium(III)- and Calcium(II)-Catalyzed Meyer-Schuster Rearrangements Followed by Intramolecular Aldol Condensation or endo-Michael Addition. *Chem. Commun.* 2015, 51, 5318.
8. Lalli, C.; Dumoulin, A.; Lebé, C.; Drouet, F.; Guérineau, V.; Touboul, D.; Gandon, V.; Zhu, J., Chiral Calcium-BINOL Phosphate Catalyzed Diastereo- and Enantioselective Synthesis of syn-1,2-Disubstituted 1,2-Diamines: Scope and Mechanistic Studies. ; Masson, G. *Chem. Eur. J.* 2015, 21, 1704.

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Florent LOUIS

Laboratoire : PC2A (VILLENEUVE D'ASCQ)

Heures.CPU 2015 : 767

Publications de rang A

1. LOUIS F., A Theoretical Study of the Kinetics of the Hydrogen Atom Abstraction Reactions from Cyclopropane by H, O (3P), and Cl (2P3/2) Atoms and OH Radicals, *International Journal of Chemical Kinetics*, 2015, 47, 232-245.

- MIRADJI F., SOUVI S., CANTREL L., LOUIS F., VALLET V., Thermodynamic Properties of Gaseous Ruthenium Species, *Journal of Physical Chemistry A*, 2015, 119, 4961-4971
- SULKOVA K., CANTREL L., LOUIS F., Gas-phase Reactivity of Cesium-Containing Species by Quantum Chemistry, *Journal of Physical Chemistry A*, 2015, 119, 9373-9384
- LEPLAT N., FEDERIC J., SULKOVA K., SUDOLSKA M., LOUIS F., CERNUSAK I., ROSSI M. J., The Kinetics of the Reaction $C_2H_5\cdot + HI \rightarrow C_2H_6 + I\cdot$ over an extended Temperature Range (213 - 623 K): Experiment and Modeling, *Zeitschrift fur Physikalische Chemie*, 2015, 229, 1475-1502

Communications dans des congrès internationaux

- MIRADJI F., SOUVI S., CANTREL L., LOUIS F., VALLET V., Etude des propriétés thermochimiques des composés gazeux du ruthénium, Congrès 2015 de la Société Chimique de France, 7-9 Juillet 2015, Lille (France)
- KHANNICHE S., LOUIS F., CANTREL L., ČERNUSÁK I., Reactivity of iodine (V) oxides: implications for atmospheric chemistry and nuclear safety, Central European Symposium on Theoretical Chemistry, 6-9 Septembre 2015, Banská Bystrica (Slovaquie)
- CANTREL L., LOUIS F., COUSIN F., GASNOT L., GREGOIRE A.C., Problématiques chimiques en lien avec la sûreté nucléaire, Congrès 2015 de la Société Chimique de France, 7-9 Juillet 2015, Lille (France)
- LOUIS F., FORTIN C., CORNET M., ŠKOVIERA J., KHANNICHE S., CANTREL L., ČERNUŠÁK I., Etude théorique des propriétés thermochimiques de composés gazeux de l'iode: implications en chimie atmosphérique et en sûreté nucléaire, Congrès 2015 de la Société Chimique de France, 7-9 Juillet 2015, Lille (France)
- LOUIS F., KHANNICHE S., CANTREL L., ČERNUSÁK I., Reactivity of iodine oxides towards CO - Is it a relevant oxidation reaction in the atmosphere?, Central European Symposium on Theoretical Chemistry, 6-9 Septembre 2015, Banská Bystrica (Slovaquie)
- NOVOTNY M., ŠKOVIERA J., ČERNUSÁK I., ODA T., LOUIS F., W2, W4, WH, WH2: Ab initio and DFT benchmarks, Central European Symposium on Theoretical Chemistry, 6-9 Septembre 2015, Banská Bystrica (Slovaquie)
- KHANNICHE S., LOUIS F., CANTREL L., ČERNUSÁK I., Modelling of the behaviour of iodine oxides: Implications for atmospheric chemistry and nuclear safety, 6th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Smolenice (Slovaquie), 11-15 Octobre 2015

Thèses en cours sur le projet

- Jan Skoviera, Etude théorique de la formation de clusters $CsxHy$, 2012-2016, thèse en co-tutelle, France/Slovaquie.
- Faoulat Miradji, Etude du comportement du ruthénium lors de son transport dans le circuit primaire, 2013-2016, bourse IRSN.
- Camille Fortin, Etude de l'interaction iode/atmosphère, 2015-2018, bourse Lille1.

Stages de Master en 2015 sur le projet

- FORTIN C., Atmospheric Iodine Modelling, Stage de Master 2, Mention Chimie, parcours Atmospheric Environment, Université Lille 1, 2015
- BRAY C., Etude théorique de la réaction $C_2H_5OO + IO =$ produits, Stage de Master 2, Mention Chimie, parcours Chimie Energie Environnement, Université Lille 1, 2015

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Université Comenius de Bratislava : groupe du professeur ČERNUSÁK.

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

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

Porteur : Sébastien PETIT

Laboratoire : CRISMAT - UMR 6508 (CAEN)

Heures.CPU 2015 : 258 628

Publications de rang A

1. C. Toulouse, M. Cazayous, F. Levy-Bertrand, H. Barkaoui, V. Simonet, R. Ballou, P. Lejay, S. de Brion, L. Chai, M.B. Lepetit, J. B. Brubach and P. Roy, Phonons in the multiferroic compound Ba₃NbFe₃Si₂O₁₄ : evidences for symmetry breaking? Phys. Rev. B 92, 104302, 2015.
2. M. Poupon, N. Barrier, S. Petit, S. Clevers and V. Dupray, , Hydrothermal Synthesis and Dehydration of CaTeO₃(H₂O): Original Route to Generate New CaTeO₃ Polymorphs, Inorg. Chem., 54, 5660, 2015.
3. V. Balédent, S. Chattopadhyay, P. Fertey, M.-B. Lepetit, M. Greenblatt, B. Wanklyn, F. O. Saouma, J. I. Jang et P. Foury-Leylekian, Evidence for room temperature electric polarization in RMn₂O₅ multiferroics, Phys. Rev. Letters 114, 117601, 2015.

Articles dans des revues professionnelles spécialiséesE. Cannuccia, M.-B. Lepetit, K. Singh, Ch. Simon, B. Corraze, E. Janod et L. Cario, Orbital-Ordering-Driven Multiferroicity in GeV₄S₈, ILL highlights Annual Report 2014.**18. Projet : 2008005****Intitulé : Etude du processus d'agrégation dans les solutions aqueuses : Analyse par simulation de dynamique moléculaire classique et quantique**

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

Porteur : Abdenacer IDRISSE

Laboratoire : LASIR (VILLENEUVE DASCQ)

Heures.CPU 2015 : 78 869

Voir projet n° 2015007

19. Projet : 2008013**Intitulé : Simulations découlements 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 2015 : 962 860

Publications de rang A

1. Bénard, P., Balarac, G., Moureau, V., Dobrzynski, C., Lartigue, G., and D'Angelo, Y. (2015) Mesh adaptation for large-eddy simulations in complex geometries. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, doi: 10.1002/flid.4204.

Communications dans des congrès internationaux

1. Dufresne, K. Hane, V. Moureau, G. Lartigue, F. Duchaine, Y. D'Angelo, Fluid–solid conjugate heat transfer for thermo-electric converter design, *Proceedings of the 2nd Australasian Conference on Computational Mechanics*, Brisbane, december 2015.
2. Cyprien Morize, Eric Herbert, Yves D'Angelo, Alban Sauret, Resuspension of a granular bed by thermal convection, 68th Annual Meeting APS Division of Fluid Dynamics, Boston, 2015.

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- Pierre Bénard, Analysis and optimization of a meso-scale combustor by Large-Eddy Simulations, October 2015

Stages de Master en 2015 sur le projet

- Kalidou Hane, Qualification d'un démonstrateur de conversion thermoélectrique, Juillet 2015
- Safi Bennour, Approche par EEM pour des modèles de sous-maille en LES pour la combustion turbulente, Juillet 2015

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Eric Herbert et Christophe Goupil , Laboratoire Interdisciplinaire des Energies de Demain (LIED) UMR 8236, Université Paris Diderot, Bât. Lamarck B 35 rue Hélène Brion 75013 Paris FRANCE.
- G. Balarac, Univ. Grenoble Alpes/CNRS, LEGI UMR 5519, F-38000 Grenoble, France
- Cécile Dobrzynski, IMB, Bordeaux Institut National Polytechnique, EPI Cardamom, INRIA Bordeaux - Sud-Ouest, 200 av de la vieille Tour, 33405 Talence cedex
- Cyprien Morize, FAST Lab, Orsay, FRANCE
- Alban Sauret, SVI, CNRS/Saint-Gobain, Aubervilliers, France

Autres informations : article soumis

- P. Bénard, V. Moureau, G. Lartigue, Y. D'Angelo, Large-Eddy Simulation of a hydrogen enriched methane/air meso-scale combustor, submitted to *Combustion & Flame*, october 2015.
- Eric Herbert, Cyprien Morize, Aurélie Louis–Napoléon, Alban Sauret, Christophe Goupil & Yves D'Angelo, Craterization and entrainment of an immersed granular bed through buoyancy driven destabilisation, papier en cours de rédaction pour soumission dans *Applied Physics* ou *Physical Review E*.

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

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

Porteur : Alexis COPPALLE

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

Heures.CPU 2015 : 30 688

Communications dans des congrès internationaux

1. A. Coppalle, Influence of the position of vents in the case of naturally-ventilated fires, *FM Global Open Source CFD Fire Modeling Workshop*, Norwood MA, May , 2015.

Communications dans des congrès nationaux

1. A. Coppalle, Influence of the position of vents in the case of naturally-ventilated fires, *Journée technique du GdR Feux du CNRS «FireFOAM:un outil pour la modélisation de la dynamique des incendies»*, 23 septembre 2015, INERIS, Paris 10^{ème}.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- GDR Feux du CNRS (GDR 2864)

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

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Denis LEDUE

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

Heures.CPU 2015 : 1 609

Publications de rang A

1. G. Lhoutellier, D. Ledue, R. Patte, F. Barbe, B. Dieny, and 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 interfaces, *J. Phys. D:Appl. Phys.* 48, 115001, 2015.

Communications dans des congrès internationaux

1. G. Lhoutellier, D. Ledue, R. Patte, B. Dieny, V. Baltz, Monte Carlo simulations of blocking temperature distributions for exchange-biased F/AF bilayers, International Conference on Magnetism, ICM 2015, Barcelone, Espagne (5-10/07/2015)

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- Grégoire Lhoutellier, Bicouches à anisotropie d'échange : étude par simulations numériques de l'influence de la microstructure et des interfaces, soutenue le 17 décembre 2015 à l'Université de Rouen (2012-2015).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 9 779

Voir projet n°2014008

23. 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 : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 31 726

Publications de rang A

1. Lhermet, R.; Ahmad, M.; Hauduc, C.; Fressigné, C.; Durandetti, M.; Maddaluno, J.; Intramolecular Carbolithiation of Heterosubstituted Alkynes: An Experimental and Theoretical Study, *Chem. Eur. J.*, 2015, 21, 8105-8111 DOI: 10.1002/chem.201500201

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

1. En direct des laboratoires de l'institut de Chimie "Comment contrôler le chemin suivi par une réaction chimique ?" http://www.cnrs.fr/inc/communication/direct_labos/durandetti.htm

Communications dans des congrès internationaux

1. Maha Ahmad, Rudy Lhermet, Muriel Durandetti, Jacques Maddaluno, Intramolecular Carbolithiation of Heterosubstituted Alkyne, *ICHAC-11, 11th International Conference on Heteroatom Chemistry*, 14-19 juin 2015, Caen (Communication orale).
2. Maha Ahmad, Rudy Lhermet, Muriel Durandetti, Jacques Maddaluno, Intramolecular Carbolithiation of Heterosubstituted Alkyne, *18th IUPAC International Symposium on Organometallic Chemistry Directed Towards Organic Synthesis - OMCOS 18*, 28 juin- 02 juillet 2015, Sitges, Espagne. (Communication par affiche).

Communications dans des congrès nationaux

1. Maha Ahmad, Rudy Lhermet, Muriel Durandetti, Jacques Maddaluno, Intramolecular Carbolithiation of Heterosubstituted Alkyne, *2ème Journées de Catalyse de Paris Saclay - CHARM3AT*, 19 - 22 avril 2015, Valançay (Communication orale).

Thèses en cours sur le projet

- Maha Ahmad, 3ème année de thèse en cours

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Dr Aurélien Moncomble, Laboratoire de Spectrochimie Infrarouge et Raman (LASIR), Université de Lille I.
- Dr Corinne Gosmini, Laboratoire "Hétéroéléments et Coordination", École Polytechnique, Palaiseau.

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

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

Porteur : Florent CALVAYRAC

Laboratoire : Institut des Molécules et Matériaux du Mans (LE MANS)

Heures.CPU 2015 : 10389

Publications de rang A

1. K. Brymora, J. Fouineau, Eddarir, Asma, F. Chau, N. Yaacoub, J.-M. Grenèche, J. Pinson, S. Ammar, et F. Calvayrac, Grafting of diazonium salts on oxides surface: formation of aryl-O bonds on iron oxide nanoparticles, *Journal of Nanoparticle Research*, accepté 2015. DOI : 10.1007/s11051-015-3232-x

Communications dans des congrès internationaux

1. F. Calvayrac, Kullback-Leibler divergence as an estimate of reproducibility of numerical results, 2015, p. 1-5. DOI : [10.1109/NTMS.2015.7266501](https://doi.org/10.1109/NTMS.2015.7266501)
2. F. Wang, F. Calvayrac, V. Montembault, et L. Fontaine, Modelling irradiation by EM waves of multifunctionalized iron oxide nanoparticles and subsequent drug release, *Journal of Physics : Conference Series*, vol. 633, p. 012003, sept. 2015. DOI :10.1088/1742-6596/633/1/012003

Communications dans des congrès nationaux

- Colloque INNOVASIA (Le Mans, Novembre 2015)
- Theory Days in Toulouse (Toulouse, Novembre 2015)

Thèses en cours sur le projet

- TANG Nguyen Van (début en mai 2015) sur les systèmes nanostructurés Fer/Platine, avec N.Randrianatoandro (50%) pour la partie expérimentale et 50% F.Calvayrac
- LEMA Charline (début octobre 2015) avec E.Suraud LPT Toulouse (50%) R.Busselez (25%) et 25% F.Calvayrac sur la modélisation multiéchelle de l'irradiation de matériaux nanostructurés

Stages de Master en 2015 sur le projet

- Thi Thanh Huyen Nong γ -Fe₂O₃@CoO nanoparticles: Structure and Magnetic behavior

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Souad Ammar et son équipe, ITODYS Paris 7
- Luc Mazaleyrat et son équipe, SATIE ENS Cachan
- Eric Suraud et son équipe, LPT Université Paul Sabatier

25. 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 Caen - UMR 6252 (CAEN)

Heures.CPU 2015 : 50

26. Projet : 2012004**Intitulé : Modélisation d systèmes biologiques complexes, des métalloprotéines**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Dorothée BERTHOMIEU

Laboratoire : ICGM - UMR 5253 (MONTPELLIER 5)

Heures.CPU 2015 : 49 643

27. 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 2015 : 179 185

Publications de rang A

1. Bénard, P., Balarac, G., Moureau, V., Dobrzynski, C., Lartigue, G. & D'Angelo, Y. (2015) Mesh adaptation for large-eddy simulations in complex geometries. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, in press.
2. Odier, N., Balarac, G., Corre, C. & Moureau, V. (2015) Numerical study of a flapping liquid sheet sheared by a high-speed stream. *International Journal of Multiphase Flow*, 77, 196-208.
3. Veynante, D. & Moureau, V. (2015) Analysis of dynamic models for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Comb. and Flame*, in press.
4. Guedot, L., Lartigue, G. & Moureau, V. (2015) Design of implicit high-order filters on unstructured grids for the identification of large scale features in les and application to a swirl burner. *Physics of Fluids*, 27 (045107).

Communications dans des congrès internationaux

1. Lefebvre, A., Larabi, H., Moureau, V., Varea, E., Modica, V. & Renou, B. (2015) New methodology for the experimental determination of the consumption speed in spherical vessels. European Combustion Meeting,.
2. Guédot, L., Lartigue, G. & Moureau, V. (2015) Analysis of the interactions of the precessing vortex core with a spray flame in a swirl burner. *Direct and Large-Eddy Simulation 10*,. Limassol, Cyprus.
3. Balarac, G., Bénard, P., Lartigue, G., Moureau, V. & Dobrzynski, C. (2015) Mesh adaptation for large-eddy simulations in complex geometries. *Direct and Large-Eddy Simulation 10*,. Limassol, Cyprus.
4. Mendez, S., Chnafa, C., Gibaud, E., Sig\`uenza, J., Moureau, V. & Nicoud, F. (2015) YALES2BIO: A computational fluid dynamics software dedicated to the prediction of blood flows in biomedical devices. 5th International Conference on Biomedical Engineering, vol. 46. Vietnam.
5. Moureau, V. & Lartigue, G. (2015) Toward large-eddy simulation of complex burners with exascale super-computers: a few challenges and solutions. International Conference on Numerical Combustion (ICNC),. Avignon, France.
6. Moureau, V. & Lartigue, G. (2015) The challenge of pollutant emission predictions in realistic burners. International Conference on Numerical Combustion (ICNC),. Avignon, France.
7. Guedot, L., Benard, P., Farcy, B., Lartigue, G. & Moureau, V. (2015) High-performance computing for large-eddy simulation of aeronautical burners. Invited lecture at the High-Pressure High-Reynolds workshop, KAUST, Saudi Arabia.

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- 2011-2014: L. Guédot, "Modeling and optimization of multi-point injection systems". LEMCOTEC European project. Defended the 29th of september, 2015. PhD director : Prof Luc Vervisch. Co-advisor: V. Moureau.

Thèses en cours sur le projet

- 2015-2018: Y. Dufresne, "Modeling of granular flows with heat and mass transfers". MORE4LESS ANR project. PhD director : Prof Mourad Boukhalfa.
- 2015-2018: N. Legrand, "Higher-order methods for multi-level Large-Eddy Simulation". ELCI project funded by "Investissements d'Avenir". PhD director : Prof Alain Berlemont.
- 2014-2017: L. Boulet, "Conjugate heat transfer modeling of casing fire tests". TURBOMECA / DGAC funding. PhD director : Prof Mourad Boukhalfa.

- 2014-2017: H. Larabi, "Auto-adaptive simulation of spray flames"
Normandy region funding. PhD director : Prof Mourad Boukhalifa.
- 2013-2016: T. Roger, "Semi-implicit time integration of the Navier-Stokes equations"
SNECMA research project. PhD director : Prof Luc Vervisch.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Groupement d'Intérêt Scientifique SUCCESS: CORIA, LEGI, I3M, EM2C, IMFT, LMAP, CERFACS, IFP-EN
- Intel Exascale Computing Research Lab et Université de Versailles Saint- Quentin-En-Yvelines

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

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

Porteur : Helena ZAPOLSKY

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

Heures.CPU 2015 : 60 831

Publications de rang A

1. O. Kapikranyan, H. Zapolsky, R. Patte, C. Pareige, B. Radiguet, P. Pareige, Point defect absorption by grain boundaries in alpha-iron by atomic density function modeling, accepté dans *Phys Rev. B*.

Communications dans des congrès internationaux

1. H. Zapolsky, M. Lavrskyi, O. Kapikranyan et A.G. Khachaturyan, Atomic scale modeling of microstructural evolution, *TMS 2015*, Orlando, Mars 15-19 2015 (conférence invitée).
2. M. Lavrskyi, H. Zapolsky, F. Danoix et A.G. Khachaturyan, Spinodal decomposition in Fe-Ni-C martensite : atomistic modelling versus experiment, *TMS 2015*, Orlando, Mars 15-19 2015 (conférence invitée).

Communications dans des congrès nationaux

1. M. Lavrskyi, H. Zapolsky, A.G. Khachaturyan, Atomistic modeling of martensite transformation in steels, *ESOMAT 2015*, 15-19 September, Antwerp, Belgium
2. A. Vaugeois, M. Lavrskyi, H. Zapolsky, R. Patte, Atomistic modeling of segregation at grain boundaries in bcc iron, *Workshop du projet européen EXMONAN*, 28-30 octobre 2015, Rouen
3. H. Zapolsky, Atomic density function modelling of diffusional phenomena at grain boundaries, *Workshop projet européen EXMONAN*, 28-30 octobre 2015, Rouen

Thèses en cours sur le projet

- M. Lavrskyi
- A. Vaugeois

29. Projet : 2012013**Intitulé : Simulation STEM - HAADF**

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

Porteur : Williams LEFEBVRE

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

Heures.CPU 2015 : 25 568

Publications de rang A

1. W. Lefebvre, D. Hernandez-Maldonado, F. Moyon, F. Cuvilly, C. Vaudolon, D. Shinde, F. Vurpillot, HAADF-STEM atom counting in atom probe tomography specimens: towards quantitative correlative microscopy, *Ultramicroscopy* 159 (2015) 403-4012.

Communications dans des congrès internationaux

1. W. Lefebvre, Precipitation hardening in light alloys systems investigated at the atomic scale, *EUROMAT*, Warsaw (Poland) Sept.21-24 (2015).

Communications dans des congrès nationaux

1. Williams Lefebvre, Couplages et synergies entre défauts observés à l'échelle nanométrique, *Journée annuelles de la SF2M*, Chime-ParisTech, 26-28 Octobre 2015 Keynote Lecture

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

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Luc BRUN

Laboratoire : GREYC - UMR 6072 (CAEN)

Heures.CPU 2015 : 116 425

Publications de rang A

1. Gaüzere, B., Grenier, P. A., Brun, L., & Villemin, D., Treelet kernel incorporating cyclic, stereo and inter pattern information in chemoinformatics. (2015). *Pattern Recognition*.

Communications dans des congrès internationaux

1. P.A Grenier, L Brun, D Villemin. From bags to graphs of stereo subgraphs in order to predict molecule's properties. *Graph-Based Representations in Pattern Recognition 2015*

Autres informations : article soumis

- P.-A. Grenier, L. Brun et D. Villemin, Chemoinformatics and stereoisomerism: A stereo graph kernel together with three new extensions. *Pattern Recognition Letters* (Soumis le 15/11/2015).

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- Pierre-Anthony Grenier, Modélisation de la stéréochimie : une application à la chémoinformatique. Soutenue le 26 novembre 2015.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

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

31. 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 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 5

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

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Carole Le GUYADER

Laboratoire : LMI - EA 3226 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 13 775

Communications dans des congrès internationaux

1. T. Chaumont-Frelet, Helmholtz Equation in Highly Heterogeneous Media, *1st. Pan-American Congress on Computational Mechanics, IACM*, Buenos Aires, Argentina, April 27-29, 2015
2. T. Chaumont-Frelet, Analysis of the Pollution Effect in Finite Element Discretization of Highly Heterogeneous Helmholtz Problems, *LBL Applied Mathematics Seminar*, Berkeley, USA, February 25, 2015

Communications dans des congrès nationaux

1. T. Chaumont-Frelet, Multiscale Medium Approximation for the Helmholtz equation. Application to geophysical benchmarks, *3rd Depth Imaging Partnership workshop*, Inria TOTAL, Pau, France, June 22-23, 2015.
2. T. Chaumont-Frelet, Pollution analysis for high order discretizations of highly heterogeneous Helmholtz problems, *GEAGAM workshop: Exploring the Earth*, Inria, Pau, France, May 26-27, 2015.
3. T. Chaumont-Frelet, Multiscale Medium Approximation for the Helmholtz equation. Application to geophysical benchmarks, *3rd "Depth Imaging Partnership" workshop*, Inria TOTAL, Pau, France, June 22-23, 2015.
4. T. Chaumont-Frelet, Multiscale Medium Approximation for Seismic Wave Propagation Modelling, *Numerical Simulation and HPC workshop*, CORIA, Rouen, France, February 19, 2015.

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- Solène Ozeré, Modélisation Mathématique de Problèmes Relatifs au Recalage d'Images, soutenue le vendredi 6 novembre 2015 à l'INSA de Rouen, encadrant : C. Le Guyader
- Théophile Chaumont-Frelet, Approximation par éléments finis de problèmes d'Helmholtz pour la propagation d'ondes sismiques, soutenue le vendredi 11 décembre 2015 à l'INSA de Rouen.

Thèses en cours sur le projet

- Noémie Debroux, Laboratoire de Mathématiques de l'INSA de Rouen, encadrant : C. Le Guyader.

33. Projet : 2013010**Intitulé : Modélisation numérique de l'impact hydro-sédimentaire de l'implantation de systèmes récupérateurs d'énergie**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Anne-Claire BENNIS

Laboratoire : M2C - UMR 6143 (CAEN)

Heures.CPU 2015 : 70 960

Communications dans des congrès internationaux

1. H. Gunnoo, A.-C. Bennis, A. Rivier, N. Abcha, and A. Ezersky, Interactions between the surface gravity waves and the Von Karman streets: a numerical study, *European Geosciences Union General Assembly*, 13-17/04/15, Vienne, Autriche.
2. H. Gunnoo, N. Abcha, I. Garcia-Hermosa, A.-C. Bennis and A. Ezersky, *Influence of surface waves on karman street behind vertical cylinder : subharmonic lock-in and phase synchronisation*, 5th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows (ICJWSF2015), 15-18/06/15, Stockholm, Suède. Proceedings : Springer Proceedings in Physics 185.

Thèses en cours sur le projet

- H. Gunnoo, Etude des structures spatio-temporelles dans un sillage de mât conditionnées par l'action commune des vagues et des courants, 2014-2017, financement régional.

34. 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 - UMR 5509 (ECULLY)

Heures.CPU 2015 : 14 878

Thèses en cours sur le projet

- Couplage des échelles régionale et urbaine du transport de polluants : Application à la modélisation opérationnelle de la qualité de l'air

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Nguyen Chi Vuong (Doctorant) - Association Agréée pour la Surveillance de la Qualité de l'Air (AASQA) Air Rhône-Alpes

35. 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 2015 : 133 614

Publications de rang A

1. Salnikov V., Lemaitre S., Choi D., Karamian-Surville, Ph. Measure of combined effects of morphological parameters of inclusions within composite materials via stochastic homogenization to determine effective mechanical properties. *Composite Structures*, Volume 129, 1 October 2015, Pages 122–131.
2. Salnikov V., Lemaitre S., Choi D., Karamian-Surville, Ph. On efficient and reliable stochastic generation of RVEs for analysis of composites within the framework of homogenization. *Computational Mechanics*. January 2015, Volume 55, Issue, pp 127-144.

Communications dans des congrès internationaux

1. Salnikov V., Lemaitre S., Choi D., Karamian-Surville, Ph. Methods for analysis of effective mechanical, thermal and electric properties of composite materials (41. Advances in numerical techniques for analysis of composites via homogenisation. *International Conference on Composite Structures (ICCS 18)* Lisbon, 2015

Communications dans des congrès nationaux

1. Lemaitre S, Salnikov V, Choi D, Karamian P. Génération de VER 3D par la dynamique moléculaire et variations autour de la pixellisation. Calcul des propriétés effectives des composites, accepted for publication in the *proceedings of the CSMA 2015*.
2. Lemaitre S, Salnikov V, Choi D, Karamian P. 3D thermal homogenization of multiphase materials using FFT accelerated scheme. Congrès Français de Mécanique, Lyon, 2015

Thèses en cours sur le projet

- Sophie Lemaitre, 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.

36. 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 - UMR 6252 (CAEN)

Heures.CPU 2015 : 187 550

Thèses en cours sur le projet

- Mokhtar Khaldi, Modélisation de la propagation de la fissuration transverse dans les composites renforcés par des fibres naturelles, PhD Thesis, Université d'Oran et Université de Caen Normandie, soutenance prévue en 2016.

- Etonam TOSSOU, Matériaux composites hybrides par intégration de plis lin dans des structures stratifiés carbone, Université de Caen Normandie, début thèse octobre 2015.
- Meriem FEHRI, Flambement des poutres composites renforcées par des fibres naturelles et/ou conventionnelles, Co-tuelle ENI Sfax et Université de Caen Normandie, début thèse mars 2015.

37. 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 LETOUZE

Laboratoire : LHEEA (NANTES)

Heures.CPU 2015 : 318 775

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- Baptiste Elie, Modélisation numérique de sillages lointains d'hydroliennes par une approche Volumes Finis faiblement compressible, PhD Thesis, LHEEA, Ecole Centrale Nantes.

Autres informations : article soumis

- B. Elie, G. Oger, P. -E. Guillermin, B. Alessandrini, Simulation of HATT wakes using a weakly-compressible Cartesian finite volume solver with local mesh refinement, soumis à Ocean Engineering

38. Projet : 2014006

Intitulé : Modèle Conceptuel Modulaire

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Nicolas LECOQ

Laboratoire : M2C (CAEN)

Heures.CPU 2015 : 786

39. 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 Alençon - UMR 6252 (DAMIGNY)

Heures.CPU 2015 : 550 986

40. Projet : 2014008**Intitulé : Développement de nouveaux descripteurs atomiques et moléculaires pour la caractérisation des liaisons "faibles".**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Vincent TOGNETTI

Laboratoire : COBRA - UMR 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 10 850

Publications de rang A

1. E. Falkowska, V. Tognetti, L. Joubert, P. Jubault, J.-P. Bouillon, X. Pannecoucke, First efficient synthesis of SF₅-substituted pyrrolidines using 1,3-dipolar cycloaddition of azomethine ylides with pentafluorosulfanyl- substituted acrylic esters and amides, *RSC Adv.* 5 (2015) 6864.
2. M. Yahia-Ouahmed, V. Tognetti, L. Joubert, Halogen-halogen interactions in perhalogenated ethanes: An interacting quantum atoms study, *Comput. Theor. Chem.* 1053 (2015) 254.
3. V. Tognetti, C. Morell, L. Joubert, Quantifying electro/nucleophilicity by partitioning the dual descriptor, *J. Comput. Chem.* 36 (2015) 649.
4. G. Hamdoun, M. Sebban, V. Tognetti, A. Harrison-Marchand, L. Joubert, J. Maddaluno, H. Oulyadi, Alkyl lithium Mixed-Aggregates: Dynamic Behavior and Comprehensive Analysis of NMR 2J_{7Li-7Li} Spin-Spin Coupling, *Organometallics* 34 (2015) 1932
5. V. Tognetti, C. Morell, L. Joubert, Atomic electronegativities in molecules, *Chem. Phys. Lett.* 635 (2015) 111.
6. R. Inostroza-Rivera, M. Yahia-Ouahmed, V. Tognetti, L. Joubert, B. Herrera, A. Toro-Labbé, Atomic decomposition of conceptual DFT descriptors: The example of proton transfer reactions, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (2015) 17797.
7. E. Falkowska, M. Y. Laurent, V. Tognetti, L. Joubert, P. Jubault, J.-P. Bouillon, X. Pannecoucke, Synthesis of SF₅-substituted isoxazolidines using 1,3-dipolar cycloaddition reactions of nitrones with pentafluorosulfanyl acrylic esters and amides, *Tetrahedron* 71 (2015) 8067.
8. C. Morell, V. Tognetti, E. Bignon, E. Dumont, N. Hernandez-Haro, B. Herrera, A. Grand, S. Gutiérrez-Oliva, L. Joubert, A. Toro-Labbé, H. Chermette, Insights into the chemical meanings of the reaction electronic flux, *Theor. Chem. Acc.* 134 (2015) 133.

Communications dans des congrès internationaux

1. V. Tognetti, The many faces of halogen bond, Workshop "Chemical concepts", Paris, France 20/10/2015
2. New conceptual DFT descriptors for reactivity, 16ème International Conference on Density Functional V. Tognetti, Theory and its Applications, Debrecen, Hongrie (31/08-04/09/2015)
3. V. Tognetti, Halogen bonds: the electron density perspective, 41ème International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (CHITEL-2015), Turin, Italie (26-31/07/2015),

Communications dans des congrès nationaux (conférences invitées)

1. V. Tognetti, Interactions en chimie organométallique : trop complexes pour la théorie ? Journées de chimie X-ENS-ESPCI, Paris, France (13-14/03/2015),
2. V. Tognetti, La densité électronique au cœur de la réactivité chimique, Laboratoire de Chimie Théorique (LCT), Paris (04/12/2015)

Thèses en cours sur le projet

- L. Patrikeev (thèse soutenue début janvier 2016) : Développement d'un code d'analyse topologique de la densité électronique
- M. Yahia-Ouahmed, en cours : Etude de liaisons non-covalentes par la théorie « atoms-in-molecules »

41. 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 : CIMAP Alençon - UMR 6252 (DAMIGNY)

Heures.CPU 2015 : 7 864

Thèses en cours sur le projet

- Mokhtar Khaldi, Modélisation de la propagation de la fissuration transverse dans les composites renforcés par des fibres naturelles, PhD Thesis, Université d'Oran et Université de Caen Normandie, soutenance prévue en 2016
- Etonam TOSSOU, Matériaux composites hybrides par intégration de plis lin dans des structures stratifiés carbone, Université de Caen Normandie, début thèse octobre 2015
- Meriem FEHRI, Flambement des poutres composites renforcées par des fibres naturelles et/ou conventionnelles, Co-tuelle ENI Sfax et Université de Caen Normandie, début thèse mars 2015

42. 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 2015 : 64 024

Publications de rang A

1. A. Meyer, H. N. Yoshikawa & I. Mutabazi, Effect of the radial buoyancy on a circular Couette flow, *Phys. Fluids* 27, 114104 (2015).
2. R. Guillerm, C.Kang, C. Savaro, V. Lepiller, A. Prigent, K-S. Yang & I. Mutabazi, Flow regimes in a vertical Taylor-Couette system with a radial thermal gradient, *Phys. Fluids* 27, 094101 (2015)
3. C. Kang, K-S. Yang & I. Mutabazi, Thermal effect on large-aspect-ratio Couette-Taylor system: numerical simulations, *J. Fluid Mech.* 771, 57-78 (2015).

43. 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 2015 : 154 091

Voir projet 2015005

44. 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 6634 (SAINT-ETIENNE-DU-ROUVRAY)

Heures.CPU 2015 : 1 538

45. 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 6014 (MONT SAINT AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 2 933

46. Projet : 2015003**Intitulé : Simulation du mélange à viscosité variable**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Luminata DANAILA

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

Heures.CPU 2015 : 1 318 914

Publications de rang A

1. Taguelmimt N., Danaila L. and Hadjadj A., 2016, Effects of viscosity gradients on mean velocity profile in temporal mixing layer, *Journal of Turbulence*, DOI <http://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/14685248.2015.1131900>.
2. Taguelmimt N., Danaila L. and Hadjadj A., 2015, Effects of viscosity variations in temporal mixing layer, *Flow, Turbulence and Combustion*, DOI 10.1007/s10494-015-9649-6.

Communications dans des congrès internationaux

1. Danaila L., Taguelmimt N., and Hadjadj A., Effects of viscosity variations in temporal mixing layer, APS Meeting, Boston, Nov. 2015.

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- TAGUELMIMT Nouredine, Etude numérique de l'écoulement de couche de mélange temporelle à viscosité variable, Thèse de doctorat soutenue le 19/11/2015 à l'INSA de Rouen.

47. Projet : 2015004**Intitulé : Modélisation des propriétés magnétiques d'oxydes de métaux de transition anisotropes.**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Denis LEDUE

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

Heures.CPU 2015 : 13 861

Communications dans des congrès internationaux

1. A. Al-Baalbaky, D. Ledue, R. Patte, Monte Carlo investigation of magnetic properties of anisotropic transition-metal oxides, *International Conference on Magnetism, ICM 2015*, Barcelone, Espagne (5-10/07/2015)

Thèses en cours sur le projet

- Thèse débutée en novembre 2014 (A. Al-Baalbaky)

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- R. Frésard, CRISMAT, ENSICAEN, 14050 Caen, France

48. Projet : 2015005**Intitulé : Taylor-Couette turbulent avec transfert de chaleur**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Jorge PEIXINHO

Laboratoire : UMR 6294 (LE HAVRE)

Heures.CPU 2015 : 1 169 257

Publications de rang A

1. K. Selvam, J. Peixinho, A. P. Willis, Localised turbulence in a circular pipe flow with a gradual expansion, *Journal of Fluid Mechanics, Volume 771*, R2, 1-13 (2015)

Communications dans des congrès internationaux

1. K. Selvam, J. Peixinho and A. P. Willis, Turbulence in a Gradual Expansion Circular Pipe Flow, *Understanding and harnessing turbulence honouring W. K. George on occasion of his 70th birthday*, Cargèse, France (2015) (Poster)
2. K. Selvam, J. Peixinho and A. P. Willis, Turbulence in a Gradual Expansion Circular Pipe Flow, *19th International Couette-Taylor Workshop (ICTW)*, Cottbus, Germany (2015) (Poster)
3. K. Selvam, J. Peixinho and A. P. Willis, Transition to Turbulence in a Circular Pipe Flow with Gradual Expansion, *6th International Symposium on Bifurcations and Instabilities in Fluid Dynamics (BIFD)*, Paris, France (2015) - (Oral Presentation)

Communications dans des congrès nationaux

1. K. Selvam, J. Peixinho and A. P. Willis, Turbulence in a Gradual Expansion Circular Pipe Flow, *18ème Rencontre du Non Linéaire*, Paris, France (2015) - (Poster)

Thèses en cours sur le projet

- Kamal Selvam, Flow Through Slowly Diverging Pipes, soutenance prévue en septembre 2016

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Collaboration avec Ashley P. Willis, School of Mathematics and Statistic, University of Sheffield, Grande-Bretagne sur les aspects théoriques et numériques.
- Participation au projet : "Turbulence development of the high Reynolds number flow" du programme EuHIT (European High-Performance Infrastructures in Turbulence) avec le CFTM2 (Center for Flow and Transport Modeling and Measurements) de la Brandenburgische Technische Universität de Cottbus en Allemagne.

49. Projet : 2015007**Intitulé : Structure et Dynamique dans les mélanges liquides ioniques/solvants moléculaires**

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

Porteur : Abdenacer IDRISSE

Laboratoire : LASIR (VILLENEUVE DASCQ)

Heures.CPU 2015 : 633 798

Publications de rang A

1. A. Idrissi, B. Marekha, M. Kiselev, P. Jedlovsky, The local environment of the molecules in water-DMSO mixtures, as seen from computer simulations and Voronoi polyhedra analysis, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (2015) 3470 – 3481
2. A. Idrissi, G. Hantal, P. Jedlovsky, Properties of the liquid–vapor interface of acetone–methanol mixtures, as seen from computer simulation and ITIM surface analysis, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (2015) 8913 – 8926

50. Projet : 2015008**Intitulé : Etude théorique d'une surface de silice modifiée et rationalisation des interactions phase stationnaire/composé aromatique cible.**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Pascal CARDINAEL

Laboratoire : SMS - UPRES EA 3233 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 15 441

Communications dans des congrès internationaux

1. Mélanie Mignot, Alain Tchaplà, Olivier Mercier, Pascal Cardinael, Valérie Agasse, Microwave preparation, characterization, and evaluation of a new polar-embedded aromatic core-shell stationary phase for high-performance liquid chromatography, Euroanalysis XVIII, September 6-10 2015, Bordeaux, France (communication orale)
2. Mélanie Mignot, Alain Tchaplà, Olivier Mercier, François Boyer, Pascal Cardinael, Valérie Agasse, Microwave preparation, characterization, and evaluation of a new polar-embedded aromatic core-shell stationary phase for high-performance liquid chromatography, HPLC 2015, 21 au 25 juin 2015, Genève, Suisse (communication par poster)

Thèses en cours sur le projet

- MIGNOT Mélanie, Elaboration de phases stationnaires originales en HPLC. Bourse MESR 2013-2016

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Dr. V. Tognetti, Laboratoire COBRA Equipe Analyse et modélisation

51. Projet : 2015009**Intitulé : Rationalisation du moment dipolaire de deux molécules pharmaceutiques durant la rotation de groupements flexibles.**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Samuel PETIT

Laboratoire : SMS - UPRES EA 3233 (MONT-SAINT-AIGNAN)

Heures.CPU 2015 : 23 745

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Benjamin SCHAMME, en collaboration avec Dr. Vincent TOGNETTI et Prof. Laurent JOUBERT, Laboratoire COBRA, Equipe Analyse et modélisation.

52. Projet : 2015011**Intitulé : Impact des organismes fixés sur l'hydrodynamique au voisinage d'hydroliennes.**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Anne-Claire BENNIS

Laboratoire : M2C - UMR 6143 (CAEN)

Heures.CPU 2015 : 20 568

Communications dans des congrès internationaux

1. A. Rivier, A.-C. Bennis, J.-C. Dauvin, Impact of biofouling on turbulent wake downstream a tidal turbine, *2nd Sino-French Forum for Water Science, 02/11/15*, Caen, France.
2. A. Rivier, A.-C. Bennis, J.-C. Dauvin, Modelling of the impact of biofouling on hydrodynamics downstream of a tidal turbine, *Ocean sciences meeting, 21-26/02/16*, New Orleans, Etats-Unis.
3. A. Rivier, A.-C. Bennis, J.-C. Dauvin, Impact of biofouling on turbulent wake downstream of a tidal turbine, *35th International Conference on Coastal Engineering (ICCE 2016), 17-22/07/16*, Istanbul, Turkey.

Communications dans des congrès nationaux

1. A. Rivier, A.-C. Bennis, J.-C. Dauvin, Impact du biofouling sur le sillage turbulent derrière une hydrolienne, *Workshop hydroliennes, 08/10/15*, Le Havre, France
2. A. Rivier, A.-C. Bennis, J.-C. Dauvin, Modélisation numérique de l'environnement hydrodynamique par la présence d'organismes fixés sur les pales d'hydroliennes à axe vertical, *Journée thématique Sciences de l'Univers Equip@Meso, 27/11/15*, Toulouse, France.

Stages de Master en 2015 sur le projet

- Stage de Guillaume Jean, M2 IM. (4 Avril – 31 Août 2016)

53. Projet : 2015012**Intitulé : Exposition aux dioxines et risque de cancer du sein (Projet GEO3N). Modélisation de la dispersion des dioxines dans différents milieux pour le développement et la validation d'un score d'exposition applicable dans des études épidémiologiques.**

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Béatrice FERVERS

Laboratoire : Centre de Lutte contre le cancer de Lyon et de Rhône-Alpes (LYON)

Heures.CPU 2015 : 8 501

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

Publications de rang A

1. C. Brandel, Y. Cartigny, N. Couvrat, M. E. S. Eusebio, J. Canotilho, S. Petit, G. Coquerel, Mechanisms of Reversible Phase Transitions in Molecular Crystals: Case of Ciclopirox, *Chem. Mater.* 2015, 27, 6360-6373
2. E. Bobo, S. Petit, G. Coquerel, Growth rate dispersion at single crystal level, *Chem. Eng. Technol.*, 2015, 38 (6), 1011-1016
3. B. Schammé, N. Couvrat, P. Malpeli, L. Delbreilh, V. Dupray, E. Dargent, G. Coquerel, Crystallization kinetics and molecular mobility of an amorphous active pharmaceutical ingredient: A case study with Biclotymol, *Int. J. Pharm.*, 2015, 490 (1-2), 248-257
4. B. Fours, Y. Cartigny, S. Petit, G. Coquerel, Formation of New Polymorphs Without any Nucleation Step. Desolvation of the Rimnabant Monohydrate: Directional Crystallisation Concomitant to Smooth Dehydration, *Faraday Discussions* 2015, 179, 475-488
5. F. Simon, S. Clevers, G. Gbabode, N. Couvrat, V. Agasse-Peulon, M. Sanselme, V. Dupray, G. Coquerel, Enhanced Second Harmonic Generation from an organic self-assembled eutectic binary mixtures: A case study with 3-nitrobenzoic and 3,5-dinitrobenzoic acids, *Cryst. Growth Des.*, 2015, 15 (2), 946-960
6. R. Le Goff, A. Martel, M. Sanselme, A. Martin Lawson, A. Daïch, S. Comesse, Simple access to highly functional bicyclic - and -lactams: origins of chirality transfer to contiguous tertiary/quaternary stereocenters assessed by DFT, *Chem. Eur. J.*, 2015, 21 (7), 2966-2979
7. A. Favrelle, G. Gouhier, F. Guillen, C. Martin, N. Mofaddel, S. Petit, K. M. Mundy, S. P. Pitre, B. D. Wagner, Structure-Binding Effects: Comparative Binding of 2-Anilino-6-naphthalene Sulfonate by a Series of Alkyl- and Hydroxyalkyl-Substituted beta-Cyclodextrins, *J. Phys. Chem. B*, 2015, 119, 12921-12930

Communications dans des congrès internationaux

1. C. Brandel, Q. Viel, Y. Cartigny, J. ter Horst, S. Petit, G. Coquerel, Impact of molecular flexibility on the nucleation behaviour of Diprophylline enantiomers, *Faraday Discussion (Nucleation – a transition state to the directed assembly of materials)*, Leeds (UK), Mars-April 2015, Abstract book, p.26
2. Q. Viel, C. Brandel, Y. Cartigny, G. Coquerel, E. Dargent, S. Petit, Molecular Mobility vs Polymorphism of Chiral Pharmaceutical Compounds: Case of Diprophylline, *PolyChar 23*, University of Nebraska-Lincoln (USA), May 2015, Abstract book, p. 52
3. B. Schammé, L. Delbreilh, V. Dupray, E. Dargent, G. Coquerel, Role of molecular mobility and fragility on physical stability of two amorphous pharmaceuticals in the supercooled and glassy states, *PolyChar 23*, University of Nebraska-Lincoln (USA), May 2015, Abstract book, p. 51
4. Y. Cartigny, G. Coquerel, Contribution of the study of solid-vapor equilibria for the determination of phase diagrams between organic molecules and solvent, *13th Joint European Thermodynamic Conference, JETC2015*, May 2015, Nancy, France, Abstract book, p. 55

Communications dans des congrès nationaux

1. Q. Viel, Y. Cartigny, G. Coquerel, E. Dargent, S. Petit, Incidence of confinement in the crystallization route from the amorphous state of a chiral molecule, *41^{èmes} JEEP (Conference on Phase Equilibria)*, Coimbra, Mars 2015, Abstract book, p. 113

2. G. Baaklini, M. Sanselme, Y. Cartigny, G. Coquerel, Influence of the water content on the solid-solid transition of 1,3-dimethylurea, *41^{èmes} JEEP (Conference on Phase Equilibria)*, Coimbra, Mars 2015, Abstract book, p. 115
3. G. Baaklini, M. Sanselme, G. Coquerel, A new polymorphic form of N-methylurea obtained from melt-crystallization, *41^{èmes} JEEP (Conference on Phase Equilibria)*, Coimbra, Mars 2015, Abstract book, p. 116

Thèses soutenues en 2015 sur le projet

- SIMON Florent (2011-2015), Cristallisation de composé moléculaire et développement de techniques de caractérisation solide
Directeur G. Coquerel/V. Dupray
- ROBERT Benoit (2010-2015), Cristallisation et polymorphisme cristallin : étude de variétés cristallines du fumarate de (1,4 - diazabicyclo[3.2.2]nonane-4-bromophényle), un agoniste du récepteur α -7 nicotinique
Directeur G. Coquerel/P. Cardinael
- BAAKLINI Grace (2012-2015), Les effets du Spray Drying sur le polymorphisme des composés pharmaceutiques et organiques
Directeur G. Coquerel

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. Delbreihl
- Emilie BOBO (2013 - 2016), Etude du mécanisme de formation des inclusions dans les cristaux organiques et inorganiques
Directeur G. Coquerel
- Clément De Saint Jorre (2015 - 2018), Mécanisme de l'Enrichissement Préférentiel
Directeur G. Coquerel/P. Cardinaël

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 "Pathiopathologie et biothérapies des maladies inflammatoires et autoimmunes", 2t2 Bd Gambetta, 76183 ROUEN Cedex

Publications de rang A

1. Andrault, P.-M., Samsonov, S.A., Weber, G., Coquet, L., Nazmi, K., Bolscher, J.G.M., Lalmanach, A.-C., Jouenne, T., Brömme, D., Ptasbartro, M.T., et al. (2015). Antimicrobial Peptide LL-37 Is Both a Substrate of Cathepsins S and K and a Selective Inhibitor of Cathepsin L. *Biochemistry (Mosc.)* 54, 2785–2798.
2. Bebianno, M.J., Sroda, S., Gtomest, T., Chan, P., Bonnafe, E., Budzinski, H., and Cret, F. (2015). Proteomic changes in *Corbicula fluminea* exposed to wastewater from a psychiatric hospital. *Environ. Sci. Pollut. Res. Int.*
3. Bertrand, J., Marion-Letellier, R., Azhar, S., Chan, P., Legrand, R., Gtoichon, A., Ghouzali, I., Aziz, M., Vtaudry, D., Savoye, G., et al. (2015). Glutamine enema regulates colonic ubiquitinated proteins but not proteasome activities during TNBS-induced colitis leading to increased mitochondrial activity. *Proteomics* 15, 2198–2210.
4. Billard, Vt., Ourtry, A., Maillard, A., Gartnica, M., Coquet, L., Jouenne, T., Crtuz, F., Garcia-Mina, J.-M., Yvin, J.-C., and Etienne, P. (2014). Copper-deficiency in *Brassica napus* induces copper remobilization, molybdenum accumulation and modification of the expression of chloroplastic proteins. *PLoS One* 9, e109889.
5. Breton

15. Obry, A., Lequerré, T., Hardouin, J., Boyer, O., Fardellone, P., Philippe, P., Le Loët, X., Cosette, P., and Vittecoq, O. (2014). Identification of S100A9 as biomarker of responsiveness to the methotrexate/etanercept combination in rheumatoid arthritis using a proteomic approach. *PLoS One* 9, e115800.
16. Obry, A., Hardouin, J., Lequerré, T., Jarnier, F., Boyer, O., Fardellone, P., Philippe, P., Marcelli, C., Loët, X.L., Vittecoq, O., et al. (2015). Identification of 7 Proteins in Sera of RA Patients with Potential to Predict ETA/MTX Treatment Response. *Theranostics* 5, 1214–1224.
17. Ouidir, T., Jarnier, F., Cosette, P., Jouenne, T., and Hardouin, J. (2015a). Characterization of N-terminal protein modifications in *Pseudomonas aeruginosa* PA14. *J. Proteomics* 114, 214–225.
18. Ouidir, T., Kentache, T., and Hardouin, J. (2015b). Protein lysine acetylation in bacteria: current state of the art. *Proteomics*.
19. Ouidir, T., Cosette, P., Jouenne, T., and Hardouin, J. (2015c). Proteomic profiling of lysine acetylation in *Pseudomonas aeruginosa* reveals the diversity of acetylated proteins. *Proteomics* 15, 2152–2157.
20. Rocher B, ·Bultelle F, ·Chan P, ·Foll F, ·Letendre J, ·Monsinjon T, ·Olivier S, ·Péden R, ·Poret A, ·Vaudry D, ·Knigge T (2015). 2-DE Mapping of the Blue Mussel Gill Proteome: The Usual Suspects Revisited. *Proteomes* 3, 3-41.
21. Tennoune, N., Chan, P., Breton, J., Legrand, R., Chabane, Y.N., Akkermann, K., Järv, A., Ouelaa, W., Takagi, K., Ghouzali, I., et al. (2014). Bacterial ClpB heat-shock protein, an antigen-mimetic of the anorexigenic peptide α -MSH, at the origin of eating disorders. *Transl. Psychiatry* 4, e458.
22. Trouillard, R., Hubert-Roux, M., Tognetti, V., Guilhaudis, L., Plasjon, C., Menu-Bouaouiche, L., Coquet, L., Guérineau, F., Hardouin, J., Ele Ekouna, J.-P., et al. (2015). Determination of Multimodal Isotopic Distributions: The Case of a (¹⁵N) Labeled Protein Produced into Hairy Roots. *Anal. Chem.* 87, 5938–5946.
23. Vanier, G., Hempel, F., Chan, P., Rodamer, M., Vaudry, D., Maier, U.G., Lerouge, P., and Bardor, M. (2015). Biochemical Characterization of Human Anti-Hepatitis B Monoclonal Antibody Produced in the Microalgae *Phaeodactylum tricornutum*. *PLoS One* 10, e0139282.
24. Young C., Sinadinos A, Lefebvre A., Chan P., Arkle S., Vaudry D., Gorecki D. (2015). A novel mechanism of autophagic cell death in dystrophic muscle regulated by P2RX7 receptor large-pore formation and HSP90. *Autophagy* 11, 113-30.

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

Voir projet n° 2005004

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 Laurent Joubert et Vincent Tognetti : voir projet n° 2014008