



Rapport d'activités 2008 - Recueil des publications des laboratoires utilisateurs du pôle de modélisation numérique en 2007-2008

Référence du document : T-RA2008 - Révision 02 - Date de création : 02/12/2008

Validation : HP le 02/02/2009

Documents référencés : N/A

Résumé : rapport d'activités 2008 - Volet technique - Recueil des publications des laboratoires
utilisateurs du pôle de modélisation numérique sur la période 2007-2008

Révisions :

- 01 : version initiale (BG)
- 02 : version avec introduction et mise en page (BG, JCC)

Accessibilité

CRIHAN : **OUI**

EXTÉRIEURS : **OUI**

RESTREINT : **NON**

Table des matières

Introduction	3
A. Grappe de calcul IBM	4
1. UPRES EA4258, INC3M FR CNRS 3038 - CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie)	4
2. UMR CNRS 6232 - CI-NAPS (Centre d'Imagerie - Neurosciences et d'Applications aux Pathologies)	6
3. UMR 6614 - CORIA (COMplexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie)	6
4. UMR 6619 - CRMD (Centre de Recherche sur la Matière Divisée)	11
5. ENSICAEN : Ecole Nationale Supérieure d'Ingénieurs de Caen et Centre de Recherche	11
6. UMR CNRS 6634 - GPM (Groupe de Physique des Matériaux)	13
7. UMR 6089 - GSMA (Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique)	16
8. UMR CNRS 6229 - ICMR (Institut de Chimie Moléculaire de Reims)	17
9. IRCOF (Institut de Recherche en Chimie Organique Fine de Rouen)	18
10. UMR CNRS 6263 - ISM2 (Institut des Sciences Moléculaires de Marseille)	21
11. UMR 7611 - LCO (Laboratoire de Chimie Organique)	21
12. UMR CNRS 7616 - LCT (Laboratoire de Chimie Théorique)	22
13. CNRS - UPR 1311 - LIMHP (Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux et des Hautes Pressions)	24
14. EA3226 - LMI (Laboratoire de Mathématiques de l'INSA de Rouen)	25
15. UMR CNRS 6598 - LMF (Laboratoire de Mécanique des Fluides)	26
16. UMR CNRS 8107 - LML (Laboratoire de Mécanique de Lille)	27
17. LMPG (Laboratoire de Mécanique, Physique et Géosciences)	28
18. EA3828 - LMR (Laboratoire de Mécanique de Rouen)	30
19. UMR CNRS 6143 - M2C (Morphodynamique Continentale et Côtière)	31
20. UMR CNRS 8522, FR CNRS 2416 - PC2A (Laboratoire de PhysicoChimie des Processus de Combustion et l'Atmosphère)	31
21. U648 INSERM - PMC (Laboratoire de Pharmacochimie Moléculaire et Cellulaire)	32
22. UMR CNRS 6011 - UCO2M (Unité de Chimie Organique Moléculaire et Macromoléculaire)	32
23. UMR CNRS 8576 - UGSF (Glycobiologie Structurale et Fonctionnelle)	33
B. Projet Normand pour la Modélisation Moléculaire	34
1. FRE CNRS 3101 - BRICS (Biofilms Résistances Interactions Cellules Surfaces)	34
2. UPRES EA4258, INC3M FR CNRS 3038 - CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie)	38
3. UMR CNRS 6232 - CI-NAPS (Centre d'Imagerie - Neurosciences et d'Applications aux Pathologies)	39
4. INSERM U 413 - Laboratoire de Neuroendocrinologie Cellulaire et Moléculaire	40
5. IRCOF -UMR CNRS 6014 - ECOBS (Laboratoire de Chimie Organique et Biologie Structurale)	44
6. LASOC (Laboratoire d'Analyse des Systèmes Organiques Complexes)	46
7. UPRES EA 3233 IRCOF - SMS (Sciences et Méthodes Séparatives)	46

Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIHAN sur la période octobre-2007 - septembre 2008.

Il regroupe les travaux effectués par les laboratoires utilisateurs des ressources mises à disposition par le CRIHAN dans le cadre du pôle de modélisation numérique.

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

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

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

Le chapitre A est consacré à l'utilisation de la grappe de calcul IBM dite "Les Dalton".

Le chapitre B concerne le projet RNMM (Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire).

A. Grappe de calcul IBM

1. UPRES EA4258, INC3M FR CNRS 3038 - CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie)

Localisation : Caen

Site Web : <http://www.cermn.unicaen.fr/>

Remarque : Ce laboratoire utilise également les ressources du projet RNMM (Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire). Un complément des activités figure en deuxième partie du document.

Thématiques principales

1. Conception et études structures activités de ligands sérotoninergiques.
2. Conception de nouveaux antagonistes de l'urotensine (récepteur GPR14).
Utilisation du cluster Dalton dans le cadre de ce projet (projet n°2005004).
3. Mise en place et exploitation des chimiothèques (screening virtuel sur la base des pharmacophores, docking).
4. Analyses des données issues de diffraction RX.
5. Estimation des propriétés écotoxicologiques et toxicologiques des produits chimiques.

Projet : 2005004

Responsable de projet : **Ronan Bureau**

Titre : **Découverte de nouveaux leaders par des approches structurales liées aux techniques de screening virtuel.**

Publications

1. Elodie Lescot, Jana Sopkova-de Oliveira Santos, Christophe Dubessy, Hassan Oulyadi, Aurélien Lesnard, Hubert Vaudry, Ronan Bureau and Sylvain Rault. Definition of new pharmacophores for non-peptide antagonists of human Urotensin-II. Comparison with the 3D-structure of human Urotensin-II and URP. *J. Chem. Inf. Model.*, 2007, 47, 602-612..
2. Lescot, E.; Bureau, R.; Rault, S. Nonpeptide Urotensin-II receptor agonists and antagonists: Review and structure-activity relationships. *Peptides*, 2008, 29, 680-690.
3. Lescot, E.; Sopkova-de Oliveira Santos, J.; Colloc'h, N.; Rodrigo, J.; Milazzo-Segalas, I.; Bureau, R.; Rault, S. Three-dimensional Model of human Urotensine-II Receptor: Docking of human Urotensin-II and non-peptide antagonists in the binding site and comparison with an antagonist pharmacophore model. *Proteins*, 2008, 73, 173-184.

Communications

1. Antagonistes non-peptidiques de l'Urotensine-II humaine en série thénimidazolone : Etude 3D-SAR, Synthèse et Analyse des interactions au sein du récepteur UT-II humain. V. Lefebvre, E. Lescot, F. Fabis, J. Sopkova-de Oliveira Santos, J. Rodrigo, A. Lesnard, C. Dubessy, H. Vaudry, R. Bureau, S. Rault. 14ème journées Jeunes Chercheurs en Chimie Thérapeutique, 31 Janvier 2007 Paris, France.
2. Antagonistes non-peptidiques de l'Urotensine-II humaine : Approche 3D-SAR et étude des interactions avec le récepteur GPR14. E. Lescot, J. Sopkova-de Oliveira Santos, N. Colloc'h, J. Rodrigo, A. Lesnard, H. Oulyadi, C. Dubessy, H. Vaudry, R. Bureau, S. Rault. 10ème journée de l'école doctorale Normande de Chimie-Biologie, 16 Mars 2007 Caen, France.
3. Jamous C., Sopkova-de Oliveira Santos J., Dulin F., Colloc'h N., Milazzo-Segalas I., Leprince J., Vaudry H., Bureau R. and Rault S.. Conception of new ligands of the orphan receptor GPR103 : SAR analysis of the natural ligand 26RFa and homology modelling of the GPR103. 22èmes journées franco-belges de Pharmacochimie et 17èmes conférences européennes du GP2A, Caen, 28-30 mai 2008.
4. Lefebvre V., Fabis F., Lescot E., Sopkova-de Oliveira Santos J., Rodrigo J., Lesnard A., Dubessy C., Vaudry H., Bureau R and Rault S. Synthesis of new thienimidazolones, potential ligands for the human

urotensin II receptor, based on a non-peptidic antagonists pharmacophore. 22èmes journées franco-belges de Pharmacochimie et 17èmes conférences européennes du GP2A, Caen, 28-30 mai 2008.

Conférences invités - communications orales

1. Découverte de nouveaux ligands du récepteur de l'Urotensine-II humaine : Approche 3D-SAR et études des interactions avec les récepteur. E. Lescot, J. Sopkova-de Oliveira Santos, N. Colloc'h, J. Rodrigo, R. Bureau, S. Rault. XVèmes Journées du Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire, 2-4 Mai 2007 Autrans, France.
2. Découverte de nouveaux ligands du récepteur de l'Urotensine-II humaine par criblage virtuel d'une chimiothèque. E. Lescot, J. Sopkova-de Oliveira Santos, N. Colloc'h, J. Rodrigo, A. Lesnard, H. Oulyadi, I. Milazzo, C. Dubessy, H. Vaudry, R. Bureau, S. Rault. IVème Journée Scientifique de la Chimiothèque Nationale, 27 Juin 2007 Caen, France.
3. Identification of novel ligands for Urotensin-II receptor through 3D pharmacophore virtual screening of CERMN chemolibrary. Bureau, R., Accelrys Sciences Forum, Paris, Octobre 2007 (conférencier invité).
4. Lescot E., Sopkova-de Oliveira Santos J., Colloc'h N., Rodrigo J., Milazzo-Segalas I., Bureau R. and Rault S. Three-dimensional model of the human urotensin-II receptor: Docking of human urotensin-II and nonpeptide antagonists in the binding site and comparison with an antagonist pharmacophore model. 22èmes Journées Franco-Belges de Pharmacochimie, Caen, 2008.

Projet : 2007015Responsable de projet : **Ronan Bureau**Titre : **Techniques de classification hiérarchique et données 5-HT.****Publication**

1. Varin T, Saettel N, Villain J, Lesnard A, Dauphin F, Bureau R, Rault S. 3D Pharmacophore, hierarchical methods, and 5-HT4 receptor binding data. J Enzyme Inhib Med Chem. 2008; (Accepted).

Communications

1. Classification et études de relation structure activité de ligands 5-HT4. Thibault Varin, Ronan Bureau, Nicolas Saettel, Aurélien Lesnard, Sylvain Rault. Journée Nationale des Jeunes Chercheurs. Paris, Janvier 2007.
2. Etude comparative de méthodes de classification hiérarchiques sur la base d'empreintes moléculaires. Application à des données d'activité biologiques 5-HT4. Thibault Varin, Ronan Bureau, Nicolas Saettel, Aurélien Lesnard, Sylvain Rault. Journée de l'Ecole Doctorale. Caen, Mars 2007.
3. Clustering studies on 5-HT4 ligands. Thibault Varin, Ronan Bureau, Nicolas Saettel, Jonathan Villain, Aurélien Lesnard, François Dauphin, Sylvain Rault. ChemAxon 2007 User Group Meeting. Budapest (Hongrie), Juin 2007.
4. Comparative analysis of clustering methods for 5-HT4 data. Thibault Varin, Nicolas Saettel, Aurélien Lesnard, Ronan Bureau, Sylvain Rault. Rencontre Internationale de Chimie Thérapeutiques, Lille, Juillet 2007.
5. Clustering methods and 3D-Pharmacophore for 5-HT4 data. Thibault Varin, Nicolas Saettel, Aurélien Lesnard, Ronan Bureau, Sylvain Rault. GP2A, Bordeaux, Septembre 2007.
6. Sélection de motifs structuraux émergents par algorithme génétique. Application aux ligands 5-HT7. Thibault Varin, Ronan Bureau, Aurélien Lesnard, Sylvain Rault. Journée Atelier Thématique du Réseau CRUNCH « Chimie pour le Vivant ». Caen, janvier 2008.
7. Determination of 5-HT7 ligands emerging patterns with a genetic algorithm. Thibault Varin, Ronan Bureau, Aurélien Lesnard, Sylvain Rault. GP2A. Caen, mai 2008.
8. Determination of 2D pharmacophore with a new algorithm for determining emerging patterns. Application to 5-HT7 ligands. Thibault Varin, François Rioult, Ronan Bureau, Sylvain Rault. Strasbourg Summer School on Chemoinformatics : CheminfoS3. Obernay, juin 2008.

2. UMR CNRS 6232 - CI-NAPS (Centre d'Imagerie - Neurosciences et d'Applications aux PathologieS)

Localisation : Caen

Site Web : http://www.cyceron.fr/web/formation_de_recherche.html

Remarque : de nombreux chercheurs du CI-NAPS participent également au projet RNMM (Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire).

Projet : 2007011

Responsable de projet : **Nathalie Colloc'h**

Titre : **Etude par dynamique moléculaire de l'influence du xénon sur le mécanisme de l'urate oxydase.**

Commentaire

Notre projet n°2007011 intitulé "Etude par dynamique moléculaire de l'influence du xénon sur le mécanisme de l'urate oxydase" a débuté le 21/03/2007 et se termine actuellement. Nous étions deux sur le projet : Fabienne DULIN (fdulin01) et moi-même (ncollo02). Nous avons consommé toutes les heures allouées en 2007, mais quasiment aucune des heures allouées en 2008. En effet, les calculs de simulation par dynamique moléculaire sont très gourmands en temps de calcul, cette phase de calcul est suivie par une phase d'analyse qui peut être très longue, mais qui demande peu de temps de calcul, les analyses étant essentiellement effectuée en interne.

Les travaux du laboratoire ont montré que des gaz anesthésiques comme le xénon ou le protoxyde d'azote pouvaient se lier à l'urate oxydase dans une cavité de taille importante localisée à coté du site actif de la protéine. L'urate oxydase est une protéine type pour étudier les effets des gaz sur les cibles intracellulaires. Nous avons émis l'hypothèse que cette cavité aurait un rôle dans la flexibilité de l'enzyme et que la présence d'un gaz dans cette cavité ralentirait la cinétique d'activation. Le projet proposé de dynamique moléculaire a permis de vérifier cette hypothèse. Nous avons utilisé le logiciel AMBER en version parallélisée (licence personnelle), installée au CRIHAN.

Nous avons travaillé sur deux systèmes : l'urate oxydase en présence ou en absence du xénon, et nous avons réalisé une dynamique d'environ 10 nanosecondes pour le système en présence du xénon et 6.5 nanosecondes sur le système urate sans le xénon dans la poche.

Post-doctoral

1. Fabienne Dulin, en stage post-doctoral au laboratoire (financement par la région de Basse-Normandie de janvier 2007 à août 2008)

Collaborations

1. Gérald Monard (UMR 7565, Université de Nancy)
2. Jana Sopkova (CERMN, Université de Caen).

Publications en cours d'écriture

1. Dulin F., Sopkova-de Oliveira Santos J., Monard G., Abraini J.H. et Colloc'h N., 'Insight into the functional perturbations induced by the presence of an inert gas : molecular dynamic simulations studies of urate oxidase with and without xenon'
2. Dulin F., Monard G., Sopkova-de Oliveira Santos J., Abraini J.H. et Colloc'h N., 'Catalytic mechanism of the cofactor-less urate oxidase investigated through molecular dynamic simulations'

3. UMR 6614 - CORIA (Complexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie)

Localisation : Saint Etienne du Rouvray

Site Web : <http://www.coria.fr>

Remarque : certains chercheurs du CORIA utilisent également le cluster de calcul Linux HPXO.

Projet : 1998051Responsable de projet : **Abderrahmane NEBBACHE**Titre : **Modélisation d'écoulement compressible turbulent.****Résumé**

Les ressources de calculs demandées sur le Centre Régional de Haute-Normandie - CRIHAN seront consacrées à la modélisation d'écoulement en tuyère supersonique et turbulent. Les tuyères envisagées dans cette étude sont des tuyères d'essai de laboratoire ou des modèles réduits de tuyères propulsives. Ces tuyères font apparaître dans leur divergent des configurations de chocs de décollement. Elles fonctionnent toutes en régime de surdétente. Pour l'année 2009, il est prévu de continuer de modéliser l'écoulement dans la tuyère R2Ch.

Présentation générale

Des études sur le thème de recherche proposé ont déjà fait l'objet d'attribution d'heures de calculs depuis 2002. Parmi les résultats obtenus on citera :

- Les écoulements supersoniques turbulents en tuyères bidimensionnelles planes ou axisymétriques constituent toujours mon thème de recherche principal.
- Les tuyères propulsives auxquelles je m'intéresse sont presque similaires à celles qui équipent les moteurs des lanceurs ARIANE et SSME (Space Shuttle Main Engine).
- Les résultats numériques concernant les écoulements dans ces tuyères sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Notons, par exemple, que dans la tuyère LEA – TOC , le phénomène d'hystérésis existant entre décollement libre et restreint a été reproduit numériquement.

De plus, les rapports de pressions ou seuils de basculement du décollement libre vers le décollement restreint et vice-versa correspondent à l'expérience. Le phénomène pulsatoire de la structure de décollement, présent dans la tuyère LEA – TOC , a été reproduit numériquement. Ces études permettent de mieux appréhender le phénomène de décollement apparaissant dans les tuyères fonctionnant en régime surdétendu.

Objectifs

Durant l'année 2009, je poursuivrai l'étude du décollement apparaissant dans les tuyères de l'ONERA et du DLR.

Le schéma numérique utilisé pour la résolution des équations moyennées de Navier-Stokes est celui de MacCormack de 1985.

Projet : 1998022Responsable de projet : **Abdellah HADJADJ**Titre : **Écoulements turbulents compressibles.****Congrès internationaux avec comité de lecture et actes**

1. Hadjadj, A., Dubos, S., (2008), LES of shock/boundary-layer interaction. The 18th International Shock Interaction Symposium, Rouen, 15-18 July, France.
2. Ngomo, D., Chinnayya, A., Hadjadj, A., (2008), On the use of high-order shock-capturing methods for gaseous detonation. The 18th International Shock Interaction Symposium, Rouen, 15-18 July, France.
3. Taieb, D., Ribert, G., Hadjadj, A., (2008), Numerical simulation of shock focusing on a concave surface. The 18th International Shock Interaction Symposium, Rouen, 15-18 July, France.
4. Hadjadj, A., Dubos, S., Ribert, G. (2007), Large-eddy simulation of a shock/boundary-layer interaction at $M=2.25$. The 5th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, Munchen, 27-29 August, Germany.
5. Hadjadj, A., Perrot, Y. (2007), Numerical simulation of transient supersonic nozzle flows. The 26th International Symposium on Shock Waves, DLR-Gottingen, 15-20 July, Germany.
6. Hadjadj, A., Dubos, S., Ribert, G. (2007), Large-eddy simulation of a supersonic boundary layer at $M=2.25$. IUTAM Symposium, Unsteady Separated Flows and their Control, Corfu, 18-22 June, Greece.

Rapports de contrat de recherche

1. Chadhuri, A., Hadjadj, A., (2008), Modélisation des écoulements dans les tuyères supersoniques. Contrat CNES/As-CORIA.
2. Taieb, D., Hadjadj, A., (2008), Modélisation des écoulements dans les canaux de refroidissement des moteurs-fusées. Contrat SNECMA/Région HN/INSA de Rouen.
3. Iounes, A., Hadjadj, A., Ribert, G. (2007), Modélisation des écoulements instationnaires dans les systèmes d'échappement. Application à la dépollution automobile. Contrat FAURECIA/As-CORIA.
4. Ribert, G., Hadjadj, A. (2007), Canaux de refroidissement des moteurs-fusées : pré-étude en vue de la simulation numérique. Rapport de synthèse - contrat R647 SNECMA/INSA-CORIA.

Thèses et Post-doctoral

1. Taieb, D. (2007-2010) – canaux de refroidissement moteurs-fusées. thèse INSA en cours.
2. Ngomo, O. (2007-2010) – micro-détonation et systèmes énergétiques. thèse INSA en cours
3. Mahfoudi, E. (2007-2010) – tuyères supersoniques - thèse en co-tutelle (INSA/Univ de Constantine, Algérie).
4. Chaudhuri, A. (2007-2009) – écoulement gaz chaud moteurs-fusées - Post-doc CNES

Projet de recherche Master EFE (durée 6 mois)

1. A. Balan (2008). High-fidelity numerical simulation of compressible turbulence.

Stages élèves ingénieurs INSA (durée 4 mois)

1. A. Iounes (2007). Systèmes d'échappement et dépollution automobile.
2. Vandecavez, E. (2008). Couplage fluide/structure/thermique sur machines parallèles.
3. Paillette, T. (2008). Atténuation ondes de choc et écoulement supersonique.

Projet : 2002003Responsable de projet : **Claude Rozé**Source des informations : **Thierry Girasole**Titre : **Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses.****Publications**

1. J. Yon, C. Rozé, T. Girasole, A. Coppalle and L. Méès. Extension of RDG-FA for scattering prediction of aggregates of soot taking into account large monomers interactions. Part. Part. Syst. Charact., 25, 54-67, 2008.
2. C. Calba, L. Méès, C. Rozé and T. Girasole. Ultra-short pulses propagation through a strongly scattering medium : simulation and experiments". JOSA A, 25(07), 1541-1550, 2008.

Thèse

1. C. Calba. Interaction entre une impulsion laser ultra brève et un nuage dense de particules : simulations numériques et expériences Thèse de l'Université de Rouen, soutenue le 19 mai 2008.

Communications

1. J. Yon, C. Rozé, T. Girasole, A. Coppalle and M. Talbaut. Extension de l'applicabilité de la RDG-FA à des agrégats constitués de gros monomères avec prise en compte des interactions lumineuses multiples au sein des agrégats. 23ème congrès français sur les aérosols CFA 2007-08, Paris, 16-17 janvier 2008.
2. S. Idhacen, T. Girasole, C. Rozé and L. Méès. Ultra-fast time gated images of a high pressure spray. 14th International Symposium on applications of laser techniques to fluid mechanics, Lisbon, 07-10 July 2008.

Projet : 2003008Responsable de projet : **Alain Berlemont**Titre : **Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray.**

Dans le cadre de la rupture en gouttes de jets liquides (l'atomisation), nous développons au CORIA depuis quelques années, une technique numérique de suivi d'interface – résultat de la combinaison de plusieurs techniques développées indépendamment – couplée à un solveur des équations de Navier-Stokes afin d'étudier précisément la dynamique de l'interface qui sépare le liquide du gaz. Un algorithme de calcul de configurations tridimensionnelles optimisé pour le calcul parallèle (sur plusieurs processeurs) est dès à présent opérationnel. Les résultats numériques obtenus par l'équipe du CORIA sont aujourd'hui les premiers du genre, permettant une réelle avancée dans la compréhension de l'atomisation. Ces résultats sont inédits et reconnus sur le plan mondial. Ces avancées sont très liées aux progrès spectaculaires des moyens informatiques et c'est grâce au support du CRIHAN que les calculs de l'équipe du CORIA sont effectués.

Conférence

1. Gautier Luret, Grégory Blokkeel, Romain Lebas, Thibaut Ménard, Alain Berlemont, François-Xavier Demoulin Spray interactions modelling of collision/coalescence phenomena, ILASS 2008 Sep. 8-10, 2008, Como Lake, Italy

Soutiens contractuels :

1. PREDIT Go8 « Véhicules Propres et Economes »
 1. Jets IDE2
Atomisation et formation de mélange des jets d'essence à haute pression pour la deuxième génération des moteurs à injection directe essence
 2. EMPhASE
Expériences et Modélisations de la Physique de l'Atomisation d'un Spray pour la réduction des Emissions

Projet : 2006003Responsable de projet : **Pascale Domingo**Titre : **Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.****Publications**

1. G. Godel, P. Domingo, L. Vervisch (2008)
"Tabulation of NOx chemistry for Large-Eddy Simulation of non-premixed turbulent flames"
Proceedings of the Combustion Institute
2. P. Domingo, L. Vervisch, D. Veynante (2008)
"Large-Eddy Simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow"
{Combust. Flame} vol 152, Issue 3, February 2008, Pages 415-432
3. G. Lodato, P. Domingo, L. Vervisch (2008)
"Three-dimensional boundary conditions for Direct and Large-Eddy Simulation of compressible viscous flows"
{Journal of Computational Physics}, Vol 227/10 pp. 5105-5143
4. L. Vervisch, P. Domingo (2007)
" DNS of partially premixed flame propagating in a turbulent rotating flow",
Proceedings of the Combustion Institute, vol 31 pp. 1657-1664.

Thèses en cours

1. A. Naudin,
2. G. Lodato,

3. G. Godel,
4. V. Subramanian

Master EFE

1. M. Belhi

Communications dans des congrès

1. Vervisch, L., Domingo, P., Subramanian, V., Bonomeau, G., (2008)
Chemistry in Large-Eddy Simulation of turbulent flame,
Invited keynote lecture at The Combustion Institute, 20th Journées d'Etudes of the Belgian Section, May 6-8, Gent, Belgium.
2. Vervisch, L., Domingo, P., (2008),
Large-Eddy Simulation of turbulent flames, Invited keynote lecture at LES in Science and Technology, COST P20 Conference, 21-22 April, Poznan, Poland.
3. Vervisch, L., Lodato, G., Domingo, P. (2007),
Reliability of Large-Eddy Simulation of turbulent flames, Invited plenary at Quality and Reliability of Large-Eddy Simulation, 24-26 October, Leuven, Belgium.
4. G. Bonomeau, L. Vervisch, P. Domingo (2008)
"Large-Eddy Simulation of turbulent fuel jet injection: Toward mixing control from monitoring the injection sequence" 7th international ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Chypre 4-6 juin 2008
5. G. Lodato, P. Domingo, L. Vervisch (2008)
"Fully compressible LES of wall-jet turbulent mixing at high Reynolds number" 7th international ERCOFTAC Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Chypre 4-6 juin 2008
6. V. Subramaniam, P. Domingo, L. Vervisch (2008)
"Tabulation of detailed chemistry for LES predictions of non-premixed burners ignition maps" International conference on numerical combustion, SIAM, 31 mars-2 avril, Monterey, Californie
7. G. Godel, P. Domingo, L. Vervisch (2008)
"A Strategy for Tabulating NOx from Detailed Chemistry and Coupling with Flow Solver" International conference on numerical combustion, SIAM, 31 mars-2 avril, Monterey, Californie

Projet : 2006011Responsable de projet : **Francois-Xavier DEMOULIN**Titre : **Modélisation de l'atomisation LES pour les moteurs automobiles.****Thèses**

1. Modélisation de l'injection et de l'atomisation avec une application aux nouvelles technologies d'injection dans les moteurs automobiles.
G. Luret, Encadrants : A. Berlemont, F.X. Demoulin
CORIA / Peugeot-Citroën.
Soutenance prévue en Février 2009.
2. Simulation aux grandes échelle de l'atomisation primaire, application à l'injection automobile.
J. Chesnel, Encadrants : J. Réveillon, F.X. Demoulin
CORIA et Renault, Direction des Technologies Avancées de l'Automobile
Soutenance prévue en Décembre 2009

Conférences

1. Toward L.E.S. simulation of liquid atomization
LES for Internal Combustion Engine Flows
1-2 December 2008, Rueil-Malmaison (France)

2. SUBGRID MODELING OF LIQUID ATOMIZATION, ILASS 2008
Sep. 8-10, 2008, Como Lake, Italy
3. Subgrid modeling of liquid atomization, 6th International Conference on Multiphase Flow, ICMF 2007, Leipzig, Germany, July 9 – 13, 2007
4. Spray interactions : modeling of collision/coalescence phenomena, G. Luret, G. Blokkeel, R. Lebas, T. Ménard, A. Berlemont and F.-X. Demoulin, 22nd European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems, Como Lake, Italy, 2008.

4. UMR 6619 - CRMD (Centre de Recherche sur la Matière Divisée)

Localisation : Orléans
Site Web : <http://www.crmd.cnrs-orleans.fr/>

Projet : 2003002

Responsable de projet : **Joël Puibasset**

Titre : **Etude par simulation Monte Carlo de l'absorption d'eau sur des surfaces silice.**

Publications

1. "Pseudo-critical or hysteresis temperature versus pore size for simple fluids confined in cylindrical nanopores", J. Puibasset, J. Chem. Phys. 129, 024705 (2008)
2. "Grand Canonical Monte Carlo simulation study of water adsorption in silicalite at 300K" J. Puibasset, J. Phys. Chem. B 112, 6390 (2008).
3. "Adsorption/desorption hysteresis of simple fluids confined in realistic heterogeneous silica mesopores of micrometric length: A new analysis exploiting a multiscale Monte Carlo approach" J. Puibasset, J. Chem. Phys. 127, 154701 (2007).

5. ENSICAEN : Ecole Nationale Supérieure d'Ingénieurs de Caen et Centre de Recherche

Localisation : Caen
Site Web : <http://www.ensicaen.fr>

Projet : 2007009

Responsable de projet : **Sébastien PETIT**

Titre : **Calculs des structures atomiques et électroniques de matériaux fonctionnels nanostructurés pour la micro et l'opto électronique.**

Laboratoires : projet en commun sur les laboratoires CRISMAT et CIMAP.

Thèse

1. Une thèse en cours (sept 2006-octobre 2009)

Master, DEA

1. 3 stages de MASTER 2 (2007, 2008, 2009)

Communications

1. 15ème conférence internationale sur la luminescence et la spectroscopie optique de la matière condensée (ICL'08)
2. European Research Society Strasbourg 2007

3. CECAM (Centre européen de calcul atomique et moléculaire) -Ecole de calcul (structures électroniques, énergies d'excitation..) DFT-

Dans le cadre de nos recherches nous collaborons de façon interne entre les laboratoires de l'ENSICAEN ainsi que ponctuellement avec des collègues de RENNES (INSA), LYON (ENS) et TOULOUSE

Projet : 2007013

Responsable de projet : **Marie-Bernadette LEPETIT**

Titre : **Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés**

Laboratoire : CRISMAT

Publications

1. Sylvain LANDRON et Marie-Bernadette LEPETIT,
Phys. Rev. B 77, 125106 (2008), "The crucial importance of the t_{2g} - e_g hybridization in transition metal oxides."
2. Alain GELLE et Marie-Bernadette LEPETIT,
J. Chem. Phys. 128, 244716 (2008), "Fast calculation of the electrostatic potential in ionic crystals by direct summation method."
3. N. Barrier, J. M. Rueff, M. B. Lepetit,
J. Contreras, S. Malo and B. Raveau, sous presse Solid State Sciences (2008),
"Hydrothermal synthesis and crystal structure of CaTe_2O_5 "

Articles soumis

1. Alain GELLE et Marie-Bernadette LEPETIT,
soumis J. Chem. Phys., "Multi-States Natural orbitals."
2. Sylvain LANDRON et Marie-Bernadette LEPETIT,
soumis Phys. Rev. B, "An ab-initio evaluation of the local effective interactions in the $\text{Na}_{0.5}\text{CoO}_2$ "

Thèses

1. une thèse soutenue le 6 juin 2008,
2. une thèse en cours

Master

1. un stage de master soutenu le 3 juillet 2008

Communications

1. International workshop on "Materials for Frustrated Magnetism",
Grenoble, 3-5 mars 2008
2. International Symposium on Structure-Property Relationships in Solid
State Materials, Nantes, France, 29 juin-3 juillet 2008
3. 11ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones
du 30 juin au 4 juillet 2008 au Manoir de la Vicomté à Dinard, Bretagne
4. Journées de la Matière Condensée - Strasbourg, 25 au 29 août 2008

Collaboration

1. A. Keren Technion university Israel.

Enseignement

1. Cours master physique de Caen: modélisation des systèmes électroniques et des noyaux

6. UMR CNRS 6634 - GPM (Groupe de Physique des Matériaux)

Localisation : Rouen
Site Web : <http://www.univ-rouen.fr/gpm/>

Projet : 1999006

Responsable : **Helena Zapolszy**

Source des informations : **Renaud Patte**

Titre : **Etude des cinétiques de transformation dans les alliages ternaires Ni-Al-V.**

Thèse

1. «Modélisation multi-échelle de l'évolution microstructurale dans les alliages Ni-Fe : Corrélation entre les propriétés magnétiques et structurales », Iryna Vernyhora (3ème année)

Enseignement

1. Cours Master 2 Matériaux (Université de Rouen), «Modélisation», Héléna Zapolsky

Publication

1. Ecole GDR TransDiff, Porquerolles (18-25 mai 2008), «Modélisation continue en champ moyen cinétique à l'échelle atomique», Héléna Zapolsky

Projet : 2003014

Responsable de projet : **Jean-Marc SAITER**

Titre : **Simulation de la relavation des polymères.**

Thèse

1. Contribution à l'étude des dynamiques moléculaires liées au phénomènes de relaxation sous contrainte dans les polymères semi-cristallins: Etude expérimentale et simulation numérique

Publication

1. Bond Fluctuation Model to describe physical ageing in polymeric materials
M Arnoult, J.M: Saiter, C.Pareige, J.M. Meseguer Dueñas, J.L. Gómez Ribelles, J. Molina Mateo.
Soumise a J.Chem.Phys.

Collaboration

1. Université Polytechnique de Valence, Espagne. (J. Molina Mateo et J-L. Gomez Ribelles)

Projet : 2005003

Responsable de projet : **Denis Ledue**

Source des informations : **Renaud Patte**

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

Master

1. Stage de Master 2 Physique des Matériaux de l'Université de Rouen, «Etude de la susceptibilité alternative d'assemblées de nanoparticules ferromagnétiques», Laurent Lenoble

Publication

1. Joint European Magnetic Symposia (JEMS), Dublin, Ireland (14-19/09/2008) , «AC susceptibility of ferromagnetic nanoparticle assemblies», L. Lenoble, D. Ledue, H. Kachkachi

2. Réunion thématique GDR DFT++, CEA Saclay INSTN (17-19/10/2007), « Anisotropie effective dans les nanoparticules de structure cubique », D. Ledue et H. Kachkachi

Collaboration

1. Collaboration avec le Professeur Kachkachi (Université de Perpignan)

Projet : 2005014Responsable de projet : **Cristelle Pareige**Titre : **Etudes cinétiques des transformations de phases dans des alliages modèles des aciers.****Thèse**

1. "Mécanismes de vieillissement à très longue échéance des aciers inoxydables austéno-ferritiques"
Stéphane Novy

Communication

1. "Decomposition of a Fe 20 at. % Cr : Simulation versus Experiment "
12th Workshop on Multi-Scale Modelling of Fe-Cr alloys - 6 et 7 décembre 2007 à Paris
2. Réunions d'avancement de la thèse (avec EDF) :
 - Avancement de la thèse à t0 + 24 mois, Janvier 2008
 - Avancement de la thèse à t0 + 30 mois, Avril 2008

Collaboration

1. Collaboration avec le département MMC de EDF

Rapports

1. Rapport d'avancement de la thèse (avec EDF) : Rapport t0 + 24 mois de la thèse, Janvier 2008.
2. Rapport d'avancement de la thèse (avec EDF) : Rapport t0 + 30 mois de la thèse, Avril 2008.

Projet : 2006007Responsable de projet : **Nicolas Lecoq**Source des informations : **Renaud Patte**Titre : **Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc.**

Habilitation à Diriger les Recherches : Héléna Zapolsky (décembre 2007) et Nicolas Lecoq (janvier 2008)

Thèse

1. «Modélisation par Champ de Phase de la cinétique de précipitation dans les alliages Ni-Al, Al-Sc et Al-Zr-Sc», Julien Boisse (soutenue le 29 septembre 2008)

Master

1. Stage de Master 2 Physique des Matériaux de l'Université de Rouen, «Etude de la précipitation dans les alliages Al-Sc et Al-Zr-Sc par simulation en Champ de Phase », Maryline Certain

Publications

1. Coarsening Kinetic of Aluminium-Scandium and Aluminium-Zirconium-Scandium Precipitates, J. Boisse, N. Lecoq, R. Patte, H. Zapolsky, proceeding ICAA 11, 2008
2. ICAA 11 2006, Aachen, septembre 2008, « Coarsening Kinetic of Aluminium-Scandium and Aluminium-Zirconium-Scandium Precipitates », J. Boisse, N. Lecoq, R. Patte, H. Zapolsky
3. GDR Champ de phase, Paris, juin 2008, « Cinétique de coalescence dans les alliages Al-Sc et Al-Zr-Sc. Simulations par une méthode de champ de phases », J. Boisse, N. Lecoq, R. Patte, H. Zapolsky

4. Journées simulation numérique matière condensée et désordre - interface simulation expérience, Paris (05-06/06/08), «Modélisation en champ de phase de la coalescence dans les alliages AlScZr», M. Certain, J. Boisse, N. Lecoq, H. Zapolsky, R. Patte,

Projet : 2006008Responsable de projet : **Denis Ledue**Source des informations : **Renaud Patte**Titre : **Cinétique de transformation de phase et propriétés magnétiques dans les alliages binaires. Ni_{3+x}Fe_{1-x}.****Thèse**

1. «Modélisation multi-échelle de l'évolution microstructurale dans les alliages Ni-Fe : Corrélation entre les propriétés magnétiques et structurales », Iryna Vernyhora (3ème année)

Publications

1. Joint European Magnetic Symposia (JEMS), Dublin, Ireland (14-19/09/2008), «Modelling of chemical and magnetic ordering in NiFe alloys by Monte Carlo simulations », I. Vernyhora, D. Ledue, R. Patte
2. Junior Euromat 2008, Lausanne, Switzerland (14-18/07/2008), «Simulation of Chemical and Magnetic Ordering in the Ni-Fe System», I. Vernyhora, D. Ledue, H. Zapolsky, R. Patte
3. Journées simulation numérique matière condensée et désordre - interface simulation expérience, Paris (05-06/06/08), «Modeling of microstructure evolution in Ni-Fe alloys: correlation between magnetic and chemical properties», I. Vernyhora, D. Ledue, H. Zapolsky, R. Patte
4. Journées Doctorants du GPM, «Modeling of microstructure evolution in Ni-Fe alloys: correlation between magnetic and chemical properties» , I. Vernyhora, D. Ledue, R. Patte, H. Zapolsky

Projet : 2007003Responsable de projet : **Nicolas Lecoq**Source des informations : **Renaud Patte**Titre : **Modélisation de l'évolution de la microstructure dans un acier modèle au cours de traitements thermiques.****Thèse**

1. Thèse de l'Université de Rouen : «Caractérisation à la sonde atomique tomographique de séquences de précipitation dans un acier expérimental », Johann Akre, soutenance le 22 octobre 2008

Stage

1. Stage Licence 3ème année Mécanique Physique Matériaux de Université de Rouen, «Résolution d'une équation Cahn-Hilliard hyperbolique», Thibaud Lemanissier (mars-juin 2008)

Publication

1. 51th International Field Emission Symposium, Rouen (29 juin-4 juillet 2008), «Composition trajectory of nanoscaled ordered B₂-NiAl precipitates in an experimental tool steel», J. Akre, N. Lecoq, F. Danoix, H. Leitner, P. Auger

Projet : 2008001Responsable de projet : **Pierre-Emmanuel Berche**Titre : **Etude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe₂/YFe₂.**

Thèse

1. Mémoire de M2 Recherche Matériaux de l'université de Rouen de Thomas Philippe soutenu en juin 2008 : Etude des propriétés magnétiques des super-réseaux DyFe₂/YFe₂ en simulation numérique Monte Carlo.

Communications

1. Etude des propriétés magnétiques des super-réseaux DyFe₂/YFe₂ en simulation numérique Monte Carlo.
T. Philippe, E. Talbot, P.E. Berche
Journées Simulation Numérique, Matière Condensée et Désordre
Jussieu, Paris (24/25-05-2004)
2. Investigation of the magnetization reversal in DyFe₂/YFe₂ exchange-coupled superlattices by Monte Carlo simulation
P.E. Berche, T. Philippe, E. Talbot, C. Dufour
Joint European Magnetic Symposia (JEMS08)
Trinity College, Dublin (14/19-09-2008)
3. Processus de retournement de l'aimantation dans des super-réseaux DyFe₂/YFe₂ : comparaison expérience - simulation numérique.
P.E. Berche, E. Talbot, T. Philippe, C. Dufour et K. Dumesnil
12ème Colloque Louis Néel - Couches minces et nanostructures magnétiques
La Grande Motte, (30-09/3-10-2008)

Projet : 2008014Responsable de projet : **Cristelle Pareige**Titre : **Modélisation des premiers stades de précipitation dans des alliages de magnésium modèles.****Thèse**

1. "Analyse et modélisation de transformations de phase par précipitation dans des alliages de magnésium modèles" Viktor Kopp

7. UMR 6089 - GSMA (Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique)

Localisation : Reims

Site Web : <http://www.univ-reims.fr/GSMA/>

Projet : 2005009Responsable de projet : **Thibaud Cours**Titre : **Etudes théoriques de processus atmosphériques : études cinétiques de réactions élémentaires et capture d'un composé organique volatil par une goutte d'eau.****Publication**

1. T. Cours, S. Canneaux and F. Bohr, "Feature of the Potential Energy Surface for the reaction of HO₂ Radical with acetone",
Int J of Quantum Chemistry V107 P1344-1354 (2007)

Communications

1. T. Cours et F. Bohr, "Quel est le meilleur bas niveau dans une méthodologie "Dual-Level" utilisant CCSD(T) comme haut niveau pour des réactions radicalaires ?", 6ème Rencontre des Chimistes Théoriciens du Grand Est, Poster, Mont Saint Odile, octobre 2007.

2. T. Cours, S. Canneaux, F. Louis et B. Hanoune, "Etude du mécanisme de la réaction $H_2CO + H_2O \rightarrow$ méthanediol un effet cinétique possible de la présence d'une molécule d'eau au sein du système moléculaire", 11ème rencontre des Chimistes Theoriciens Francophones, Dinard, juin 2008.

Collaboration

1. Collaboration avec le LPC2A de l'université Lille1 (avec S. Canneaux) depuis janvier 2008.

Projet : 2008006Responsable de projet : **Emmanuel Rivière**Titre : **Etude de l'impact de la convection profonde tropicale sur la composition chimique de la haute troposphère et de la basse stratosphère.****Thèse**

1. thèse en cours sur le sujet (financement Région Champagne Ardenne) :
"Evolution de la vapeur d'eau dans la haute atmosphère des régions tropicales et impact sur la couche d'ozone : mesure par lasers sous ballon et modélisation méso-échelle"

Publications en préparation

1. V. Marécal, E.D. Rivière, X. Liu, K. Longo, S. Freitas, and A. Agusti Panareda, Impact of the ECMWF reanalyses using AMMA soundings on mesoscale convective systems simulations with the BRAMS model : 2 cases from the SCOUT-AMMA campaign.
2. X. Liu, E.D. Rivière, V. Marecal, K. Longo and S. Freitas: water budget associated with a stratospheric overshoot: case study of August 23, 2006 during AMMA/SCOUT-AMMA.

Collaborations

1. V. Marécal au LPCE à Orléans.
2. S. Freitas et C. Longo au CPTEC, Brésil
3. A. Agusti Panareda à ECMWF, reading, Royaume-Unis

8. UMR CNRS 6229 - ICMR (Institut de Chimie Moléculaire de Reims)

Localisation : Reims

Site Web : <http://www.univ-reims.fr/ICMR>

Projet : 2005010Responsable de projet : **Eric Hénon**Titre : **Etude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.****Publications**

1. Eric Henon*, Manuel Dauchez, Arnaud Haudrechy, Aline Banchet , Molecular dynamics simulation study on the interaction of KRN 7000 and three analogues with human CD1d , Tetrahedron 64 (2008), 9480 (1)
2. Z. Damaj, F. Cisnetti, L. Dupont, E. Henon, C. Policar and E. Guillon *, Synthesis, characterization and dioxygen reactivity of copper(I) complexes with glycoligands , Dalton Transactions (2008), 3235

Communication

1. Eric Henon, Manuel Dauchez, Arnaud Haudrechy, Aline Banchet, Etude par dynamique moléculaire des interactions entre la protéine CD1d impliquée dans l'induction de réponses immunitaires et 4

glycolipides de la famille du KRN 7000, 11^{ème} Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Dinard, France, 30 juin – 4 juillet 2008

Collaborations

1. Une collaboration internationale a été initiée sur le sujet ayant donné lieu à la publication (1) et la communication affichée ci-dessus, avec le professeur Arjan van der Vaart, Center for Biological Physics, Arizona State University, Etats-Unis.
2. Un support de professeur invité (de l'université de Reims Champagne-Ardenne, avril et mai 2008) nous a permis d'initier cette collaboration. Des calculs, pour l'étude préliminaire du sujet de collaboration, ont été réalisés à la fois sur notre centre de calcul (<http://romeo2.univ-reims.fr>) et au CRIHAN.

Animation scientifique

« Journée Modélisation Moléculaire ROMEO/CRIHAN » Reims, (22/10/2007)

Cette journée s'est déroulée à Reims, le lundi 22 octobre 2007 et était organisée conjointement par les centres de calculs CRIHAN et ROMEO dans le but de réunir les acteurs de la modélisation moléculaire utilisant les ressources offertes par ces deux calculateurs.

Le résumé de cette journée peut être trouvé sur le site <http://romeo2.univ-reims.fr> rubrique Actualités.

9. IRCOF (Institut de Recherche en Chimie Organique Fine de Rouen)

Localisation : Rouen

Site Web : <http://ircof.crihan.fr/>

Remarque : de nombreux chercheurs de l'IRCOF participent également au projet RNMM (Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire)

Projets : 2004004 et 2005002

Responsables de projet :

2004004 : **Jacques Maddaluno**

2005002 : **Catherine Fressigné**

Titres :

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

2005002 : **Etude théorique du mécanisme d'une réaction d'hétérocyclisation anionique cascade.**

Laboratoire : **Macromoléculaire et Médicinale (FR CNRS 3038) - IRCOF**

Publications

1. "Origin of the detrimental effect of lithium halides on an enantioselective addition of alkyllithiums to aldehydes"
Paté, F.; Duguet, N.; Oulyadi, H.; Harrison-Marchand, A.; Fressigné, C.; Valnot, J.-Y.; Lasne, M.-C.; Maddaluno, J.
J. Org. Chem. 2007, 72, 6982-6991.
2. "Intramolecular carbolithiation of alkyne: anti selectivity"
Fressigné, C.; Girard, A.-L.; Durandetti, M.; Maddaluno, J.
Angew. Chem. Int. Ed. 2008, 47, 891-893.
3. "A case of anti carbolithiation of alkyne resulting from a lithium intramolecular coordination"
Fressigné, C.; Girard, A.-L.; Durandetti, M.; Maddaluno, J.
Chem. Eur. J. 2008, 14, 5159-5167.

Thèse

1. Thèse en cours de M. Matthieu Rouen

Communications

1. Organolithium mixed aggregates in asymmetric synthesis
Conférence à la Osaka Prefecture University
Osaka (Japon), 15 octobre 2007
2. Organolithium mixed aggregates in asymmetric synthesis
Conférence à l'University of Toyama
Toyama (Japon), 16 octobre 2007
3. Synthesis of 3-vinylbenzofuranes and indoles by intramolecular carbolithiation of alkynes: scope and limitations.
Communication au XXXVIIth National Symposium on Heterocyclic Chemistry
Nagano (Japon), 19 octobre 2007
4. Synthesis of 3-vinyl benzofuranes and indoles by intramolecular carbometallation of alkynes: scope and limitations.
Conférence à l'Université Ege
Izmir (Turquie), 7 mai 2008

Collaboration

1. Laboratoire de Chimie Théorique de l'Université Paris VI (Dr Hélène Gérard, Jean-Philip Piquemal et Olivier Parisel)

Projet : 2005013Responsable de projet : **Isabelle Chataigner**Titre : **Etude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.**Laboratoire : **Laboratoire des Fonctions Azotées et Oxygénées Complexes – IRCOF – UMR CNRS 6014 (COBRA).****Publications**

1. Isabelle Chataigner, Cécilia Panel, Hélène Gérard, Serge R. Piettre Chem. Commun. 2007, 3288-3290.
"Sulfonyl vs carbonyl group: which is the more electron-withdrawing?"
2. Nathalie Chopin, Hélène Gérard, Isabelle Chataigner, Serge R. Piettre
"Benzofurans as Efficient Dienophiles in Normal Electron Demand [4+2] Cycloadditions" (soumis pour publication)

Thèse

1. Nathalie Chopin, Université de Rouen, 02/10/2008
"Etude de la diénophilie des benzofuranes et indoles. Application à la synthèse d'analogues de la galanthamine."

Communications

1. 30/09/08: Séminaire Janssen-Cilag – UMR COBRA 6014, Rouen, Conférence
Isabelle Chataigner
"Désaromatisation par cycloadditions: Caractères diénique, diénophilique et dipolarophilique de cycles aromatiques électroappauvris."
2. 26/08/08: GECCO 49, Seillac, communication orale
Isabelle Chataigner
"Désaromatisation d'hétérocycles azotés et oxygénés par cycloaddition."
3. 04/08 : Anorq IX, Le Havre, 2 Posters
Isabelle Chataigner
"Dearomatisation of Nitroaromatics via 1,3-Dipolar Cycloadditions"
"Dearomatisation of Nitroaromatics via Multicomponent Domino [4+2]/[3+2] Cycloadditions"

Collaboration

Avec le Dr. Hélène Gérard, Laboratoire de chimie théorique, UPMC, Paris VI.

Projet : 2005006

Projet : 2006014

Projet : 2008002

Projet : 2008003

Responsable des projets : **Georges Dupas**

Titres :

2005006 : **Modélisation de complexes ternaires entre le cuivre (II) et deux acides aminés.**

2006014 : **Rationalisation de l'énantiosélectivité observée dans la synthèse asymétrique de nouveaux aminosulfoxydes ferrocéniques.**

2008002 : **Etude des structures et des mécanismes de formation d'arylmagnésiates.**

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

Laboratoire : **IRCOF**

Thèses

1. projet 2008002 : Omar Bayh le 27/06/2008. Nouvelle méthode de fonctionnalisation d'hétérocycles et des composés benzéniques par voie organométallique : déprotonations par des magnésiates, réactions avec des électrophiles et couplages.
2. projet 2006014 : Sylvain Achelle le 24/10/2007. Calculs effectués avec le crédit d'heures du projet 2006014. Synthèse de nouveaux oligomères possédant un ou plusieurs motifs diaziniques : applications en tant que cristaux liquides et matériaux fluorescents.
3. projet 2008003 : Marc Brestaz : Copolymérisation de cétènes disubstitués avec des cétones.
4. Sergiy Mykhaylychenko : conversion de γ -lactones en 2,2,2-trifluoroéthyl γ -lactames et pyridazinones.
5. Gérald Lemonnier : Calculs d'espèces intermédiaires zinciques bromo-fluorées. La thèse sera soutenue en Novembre.
6. Cécile Verrier : Etude de nouvelles voies de fonctionnalisation en série oxazolique par activation directe de la liaison C-H pour la synthèse de produits naturels. Calculs d'intermédiaires réactionnels. UMR 6014 COBRA
7. Thibault Martin : Etude de nouvelles voies de fonctionnalisation en série thiazolique par activation directe de la liaison C-H pour la synthèse de produits naturels. Calculs d'intermédiaires réactionnels. UMR 6014 COBRA

Publications

1. Bis and tris-(arylethynyl)pyrimidines oligomers: synthesis and light-emitting properties. Tetrahedron, 2008, 64, 2783-2791.
2. Publication en cours de soumission au Journal of Fluorine Chemistry : Synthesis of (2,2,2-trifluoroethyl) substituted pyridazin-3(2H)-ones versus 1,5-dihydropyrrol-2-ones from α,β -unsaturated γ -lactones and hydrazines
3. Publication soumise à Analytical and Bioanalytical Chemistry : Enantioseparation of underivatized amino acids by ligand exchange capillary electrophoresis in a counter-electroosmotic mode.

Collaborations

1. Collaboration avec le L2M de l'INSA de Rouen.
2. Collaboration avec l'EA 3233 du Pr. Jean-Philippe Bouillon.
3. Collaboration avec le groupe du Dr. Philippe Jubault de l'UMR 6014, COBRA.
4. Collaboration avec le LASOC dirigé par le Pr. Paul-Louis Desbène à Evreux.

10. UMR CNRS 6263 - ISM2 (Institut des Sciences Moléculaires de Marseille)

Localisation : Marseille
Site Web : <http://www.ism2.univ-cezanne.fr>

Projet : 2008010

Responsable de projet : **Yannick Carissan**

Titre : **Calculs ab-initio de potentiels d'approche de H2 sur des nanostructures.**

Publication

1. "Investigation of Silicon Model-Nanotubes as Potential Candidate Nano-Materials for Efficient Hydrogen Storage. A Combined ab initio / Grand Canonical Monte Carlo Simulation Study"
George P. Lithoos, Jannis Samios and Yannick Carissan
Journal of Physical Chemistry B (accepted for publication)

11. UMR 7611 - LCO (Laboratoire de Chimie Organique)

Localisation : Paris
Site Web : <http://www.umr7611.upmc.fr>

Projet : 2006013

Responsable de projet : **Vincent Gandon**

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

Thèse

1. une thèse en cours

Publications

1. The Role of Bent Acyclic Allene Gold Complexes in Axis-to-Center Chirality Transfers. Gandon, V.; Lemiere, G.; Hours, A.; Fensterbank, L.; Malacria, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2008, 47, 7534 (couverture intérieure).
2. Thermal Intramolecular Alder-ene Cycloisomerization of 1,6-Allenynes. Buisine, O.; Gandon, V.; Aubert, C.; Fensterbank, L.; Malacria, M. *Synlett* 2008, 751
3. Cobalt-Mediated Regio- and Stereoselective Assembly of Dienamides by Hydroaminative Alkyne Coupling of α,ω -Diyynes. Gandon, V.; Aubert, C.; Malacria, M.; Vollhardt, K. P. C. *Chem. Commun.* 2008, 1599
4. Cobalt-Catalyzed Cyclotrimerization of Alkynes: The Answer to the Puzzle of Parallel Reaction Pathways. Agenet, N.; Gandon, V.; Vollhardt, K. P. C.; Malacria, M.; Aubert, C. *J. Am. Chem. Soc.* 2007, 129, 8860
5. Tandem Gold(I)-Catalyzed Cyclization / Electrophilic Cyclopropanation of Vinyl Allenes. Lemiere, G.; Gandon, V.; Cariou, K.; Fukuyama, T.; Dhimane, A.-L.; Fensterbank, L.; Malacria, M. *Org. Lett.* 2007, 9, 2207
6. Cobalt(I)-Mediated Preparations of Polyborylated Cyclohexadienes: Scope, Limitations, and Mechanistic Insight. Geny, A.; Leboeuf, D.; Rouquié, G.; Vollhardt, K. P. C.; Malacria, M.; Gandon, V.; Aubert, C. *Chem. Eur. J.* 2007, 13, 5408
7. Cobalt-Mediated [2+2+2] Cycloaddition versus C-H and N-H Activation of 2-Pyridones and Pyrazinones with Alkynes: A Theoretical Study. Aubert, C.;

Gandon, V.; Geny, A.; Heckrodt, T. J.; Malacria, M.; Paredes, E.; Vollhardt, K. P. C. Chem. Eur. J. 2007, 13, 7466

8. Synthesis of 4:5-Benzo-1-cobalta-2-silacyclopentenes and their Reactions with Alkynes and Alkenes: an Expedient Route to Silicon-Containing Polycyclic Frameworks. Agenet, N.; Mirebeau, J.-H.; Petit, M.; Thouvenot, R.; Gandon, V.; Malacria, M.; Aubert, C. Organometallics 2007, 26, 819

12. UMR CNRS 7616 - LCT (Laboratoire de Chimie Théorique)

Localisation : Paris

Site Web : <http://www.lct.jussieu.fr>

Projet : 2008011

Responsable de projet : **Jean-Philip Piquemal**

Titre : **Modélisation multiéchelle pour la chimie bioinorganique.**

Publications

1. Anisotropic, polarizable molecular mechanics studies of inter-, intra-molecular interactions, and ligand-macromolecule complexes. A bottom-up strategy., N. Gresh, G. A. Cisneros, T. A. Darden and J-P Piquemal, J. Chem. Theory. Comput., 2007, 3, 1960. Article Invité.
2. Understanding lead chemistry from topological insights: the transition between holo- and hemidirected structures within the [Pb(CO)_n]²⁺ model series, C. Gourlaouen, H. Gérard, J.-P. Piquemal and O. Parisel, 2008, Chem. Eur. Journ., 14, 2730
3. Simple formulas for improved point-charge electrostatics in classical force fields and hybrid Quantum Mechanical/Molecular Mechanical embedding. G. A. Cisneros, S. Na-Im Tholander, D. Elking, T. A. Darden, O. Parisel and J-P Piquemal, Int. J. Quant. Chem., 2008, 108, 1905.
4. What can be learnt on biological or biomimetic systems with the topological analysis of the electron localization function? J-P Piquemal, J. Pilmé, O. Parisel, H. Gérard, I. Fourré, J. Bergès, C. Gourlaouen, A. de la Lande, M. C. van Severen and B. Silvi, Int. J. Quant. Chem., 2008, 108, 1951.
5. Energy analysis of Zn polycoordination in a metalloprotein environment and of the role of a neighboring aromatic residue. What is the impact of polarization? B. de Courcy, J-P Piquemal and N. Gresh, J. Chem. Theo. Comput., 2008, 4, 1659.

Communications

1. "Progress towards quantitative molecular modelling." Theory and Applications of Computational Chemistry 2008 (TACC 2008), September 22-27 2008, Shanghai, China.
2. "Towards next generation force fields." ISTCP VI, 6th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, July 19-24 2008, Vancouver, Canada.
3. "From Quantum Mechanics to next generation force fields" Many-Body Interactions: From Quantum Mechanics to Force Fields, 2008 Telluride Workshop, 07/07-11/2008, Colorado, USA
4. "Développement de champs de forces polarisables de nouvelle génération: vers une modélisation moléculaire quantitative » 11ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones (RCTF 2008), 06/30-07/04 2008, Dinard, France
5. "Towards improved QM/MM techniques using polarizable force fields." France-Canada workshop on the Development of QM/MM techniques for modeling biological systems, 17-18 January 2008, University Paris Descartes, Paris, France

Thèses

1. Marie-Celine Van Severen :Thèse UPMC en cours
2. Robin Chaudret : Master (janvier-juin 2008) puis Thèse UPMC depuis septembre 2008.
3. Benoit de Courcy :Thèse (codirection avec Nohad Gresh, Univ. Paris Descartes) ; thèse soutenue le 15 octobre 2008.

Collaboration

Projet pour le développement d'une méthode QM/MM basée sur la méthode SIBFA avec l'Université de Calgary (et en collaboration avec Nohad Gresh, Univ. Paris Descartes) soutenue par le fond France-Canada pour la recherche (FFCR) pour 2 ans (08/08-08/10).

Projet : 2003003

Responsable de projet : **Hélène Gérard**

Titre : **Etude Car-Parrinello de la structure, des propriétés et de la réactivité de composés organolithiens utilisés en synthèse asymétrique.**

Masters

1. Stage de Master 1 Université Paris VI de Lydia Benkaidali :
"Mise en évidence ab-initio du rôle du solvant dans le cas du mécanisme de Baylis-Hillman", soutenance janvier 2008, direction H. Gérard
2. Stage de Master 2 Université Paris VI de Lydia Benkaidali :
"Etude Statique et Dynamique d'agrégats mixtes homo et hétérobimétalliques", soutenance juin 2008, direction H. Gérard

Publications

1. "Addition of Hetero Allenyl Copper Reagents to Aldehydes: Scope and Behavior" E. Vrancken, N. Alouane, H. Gerard, P. Mangeney, J. Org. Chem., 2007, 72, 1770.
2. "First-principles molecular dynamics evaluation of thermal effects on the NMR $^1\text{J}_{\text{Li-C}}$ spin-spin coupling." A. de la Lande, C. Fressigné, H. Gérard, J. Maddaluno, O. Parisel, Chem. Eur. J., 2007, 13, 3459.
3. "A combined experimental - theoretical study on the lithiation/electrophilic quench sequence of (η^5 -cyclohexadienyl)Mn(CO) $_3$ complexes" B. Jacques, A. Chanaewa, M. Chavarot, F. Rose-Munch, E. Rose, H. Gérard., Organometallics, 2008, 27, 626.
4. "Understanding lead chemistry from topological insights: the transition between holo- and hemidirected structures within the model [Pb(CO) $_n$] $_2^+$ series.", C. Gourlaouen, H. Gérard, J.-P. Piquemal, O. Parisel, Chem. Eur. J., 2008, 14, 2730.
5. "How to optimize a C — H cleavage with a mononuclear Copper-Dioxygen adduct?" A. de la Lande, H. Gérard, O. Parisel, Int. J. Quant. Chem. 2008, 108, 1898.
6. "What can be learnt on biological-relevant systems from the topological analysis of the Electron Localization Function ?" J.-P. Piquemal, J. Pilmé, O. Parisel, H. Gérard, I. Fourré, J. Bergès, C. Gourlaouen, A. de la Lande, M. C. van Severen, B. Silvi, Int. J. Quant. Chem. 2008, 108, 1951.
7. "Unprecedented (η^5 -Formylcyclohexadienyl)Mn(CO) $_3$ Complexes: Synthesis, Structural and Theoretical Characterizations, and Resolution of the Planar Chirality." B. Jacques, A. Eloi, M. Chavarot-Kerlidou, F. Rose-Munch, E. Rose, H. Gérard, P. Herson, Organometallics 2008, 27, 2505.
8. "Theoretical exploration on the oxidative properties of a [(tren)CuO $_2$] $^+$ adduct relevant to copper monooxygenase enzymes: insights into the competitive dehydrogenation vs. hydroxylation reactive pathways" A. de la Lande, O. Parisel, H. Gérard, V. Moliner, O. Reinaud, Chem. Eur. J., 2008, 14, 6465.
9. "Theoretical study of the relative stabilities of the alpha/beta $_3$ [XW $_{11}$ O $_39$] $^m-$ lacunary polyoxometalates (X = P, Si)" D. Laurencin, A. Proust, H. Gérard, Inorg. Chem. 2008, 47, 7888.

Communications

1. Hélène GERARD :
CERC3 Young Chemists' Workshop « Modeling of Complex Systems », Perugia, (Italie, mai 2008)
"Theoretical insights into the selectivity of the synthesis of functionalized polyoxometalates"
2. Hélène GERARD :
XXXIV Congresso dei Chimici Teorici di Espressione Latina (CHITEL08), Cetraro, (Italie, juillet 2008)
"Description dynamique de la structure, de la RMN 6Li et de la réactivité d'agrégats lithiés"
3. Hélène GERARD :
Journées Modélisation de l'ENS-ENSCP 2008 (Paris, 16-17 juin 2008)
"Description dynamique de la structure, de la RMN 6Li et de la réactivité d'agrégats lithiés"

Séminaires

1. "Sélectivités : apports de chimie quantique", ENS, Paris (France, janvier 2008)
2. " Exploration théorique de la structure, de la réactivité et des propriétés RMN d'agrégats organolithiés", Montpellier, octobre 2008

Collaborations

1. J. Maddaluno et H. Oulyadi, IRCOF, Rouen : structure et réactivité de composés organolithiés, spectroscopie RMN (6Li)
2. P. Mangeney et E. Vrancken, UPMC, Paris : structure et réactivité d'organocuprates
3. O. Reinaud, Paris V, Paris : PHM et complexes biomimétiques
4. A. Proust et R. Villaneau, UPMC, Paris : greffage sur des polyoxométallates lacunaires
5. F. et E. Rose et M. Chavarrot, UPMC, Paris : complexes cyclohexadiényl manganèse.
6. M.-C. Lasne, Université de Caen : réaction de Baylis-Hillman stéréocatalysée.

13. CNRS - UPR 1311 - LIMHP (Laboratoire d'Ingénierie des Matériaux et des Hautes Pressions)

Localisation : Villetaneuse

Site Web : <http://www-limhp-cnrs.univ-paris13.fr/>

Projet : 2007002

Responsable de projet : **Xavier Bonnin**

Titre : **Simulation PIC du réacteur CASIMIR.**

Publication

1. G. Lombardi, F. Bénédic, K. Hassouni, A. Michau and X. Bonnin, Mass spectrometry, optical and electrical diagnostics of a microwave low temperature plasma reactor used for hydrogen / carbon interaction and dust formation studies, poster presented at the 18th International Plasma-Surface Interactions Conference (PSI18), Toledo, Spain, May 26th-30th, 2008, submitted to J. Nucl. Mater. (2009).

Thèse

1. Une étudiante en thèse en collaboration avec le LPPGTS (Paris 6)

Collaborations

1. LPIIM (U. de Provence - Marseille I)
2. l'Université d'Innsbruck (Autriche)

14. EA3226 - LMI (Laboratoire de Mathématiques de l'INSA de Rouen)

Localisation : Rouen

Site Web : <http://lmi.insa-rouen.fr/>**Projet : 1998007**Responsable de projet : **Jean-Guy Caputo**Titre : **Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique.****Post-doctoral**

1. post-doc régional : Dec 2007- Sep 2008 Elena Kazantseva

Master

1. Master Math Benoit Sarels Mai -Sep 2008

Publications

1. "Nonlinear waves in complex systems: energy flow and geometry"; edité par J. G. Caputo et M. P. Soerensen, dans la collection "Special Topics" de European J. Phys. et Springer, (2007).
2. "Cavity with an embedded polarized film: an adapted spectral approach"; J.- G. Caputo, E. V. Kazantseva, L. Loukitch and A.I. Maimistov
Soumis a J. Phys. A, Juillet 2008
3. "Microcavity mode management by an embedded polarized film";
J.-G. Caputo, E. V. Kazantseva, L. Loukitch and A.I. Maimistov
Soumis a Europhysics Letters Septembre 2008.
4. "Designing arrays of Josephson junctions for specific static responses";
J. G. Caputo et L. Loukitch
Inverse Problems 24 No 2 (April 2008) 025022 ,
<http://arxiv.org/abs/cond-mat/0703303>
5. "Solitons in Proteins at Non-Zero Temperatures with Allowance for the Fluctuations of Polarization";
E. Simo et J. G. Caputo
Chinese J. of Physics, vol. 46 , NO. 2 APRIL 2008.
6. "Front solutions of Richards equation";
J. G. Caputo et Y. Stepanyants
7. "Transport in porous media"; 74, 1-20, (2008).
lmi.insa-rouen.fr/~caputo/cs07.pdf
8. "Interference filter properties of nonuniform Josephson junction arrays";
M. Salez, F. Boussaha, L. Loukitch et J. G. Caputo
J. Appl. Phys. 102, 083904, (2007).
9. "Effective anisotropy of thin nanomagnets: Beyond the surface-anisotropy approach";
J. G. Caputo, Y. Gaididei, V. P. Kravchuk, F. G. Mertens, D. D. Sheka,
Phys. Rev B 76, 174428 (2007).
<http://arxiv.org/abs/0705.1555>
10. "Vortex polarity switching by a spin-polarized current";
J. G. Caputo, Y. Gaididei, F. G. Mertens and D. Sheka
Phys. Rev. Lett. 98, 056604 (2007).
<http://arxiv.org/abs/cond-mat/0607362>

Conférences

1. "Cavity with an embedded polarized film: an adapted spectral approach";
J.- G. Caputo, E. V. Kazantseva, L. Loukitch and A.I. Maimistov

presentation invitée lors de la Conférence "2008 SIAM Conference on Nonlinear Waves and Coherent Structures", Minisymposium: Nonlinear light waves: from waveguides to nanoptics, tenue à Rome du 21 au 24 Juillet 2008.

2. "Designing arrays of Josephson junctions for specific responses"
presentation invitée lors de la Conférence "Frontier of Josephson physics and nanoscience", organisée par V. Kusmartsev et G. Filatella à Palinuro, Italie du 26 au 30 Septembre 2007.

Collaboration

1. M. P. Soerensen, Dept de Maths, Universite Technique du Danemark - Y. Gaididei Institut Bogoliubov de Physique theorique, Kiev, Ukraine - A. Maimistov, Institut de Genie Physique, Moscou

15. UMR CNRS 6598 - LMF (Laboratoire de Mécanique des Fluides)

Localisation : Nantes

Site Web : <http://www.ec-nantes.fr/version-francaise/recherche/laboratoires/lmf/>

Projet : 2005008

Projet : 2006017

Projet : 2008008

Projet : 2008009

Responsable des projets : **Bertrand Alessandrini**

Titres :

2005008 : **Etude numérique des navires en mouvement non stationnaire.**

2006017 : **Optimisation numérique des navires en mouvements non stationnaires.**

2008008 : **Simulation en hydrodynamique avec une méthode SPH.**

2008009 : **Simulation en hydrodynamique avec une méthode navier-stokes à surface libre : tenue à la mer et manoeuvrabilité.**

Thèses

1. De Leffe Matthieu : « Simulation d'écoulements visqueux par la méthode SPH : application à l'hydrodynamique navale », thèse en cours
2. Leroy Clément (co-encadrant, %age à préciser) 2008-2011 : "Développement d'une méthode Volumes Finis à Flux Caractéristiques pour la simulation d'écoulements en hydrodynamique", thèse en cours
3. Nicolas Grenier : « Simulation d'écoulements diphasiques par une méthode SPH », thèse en cours
4. Pierre-Michel Guilcher « Simulation de la propagation d'ondes de gravité par une méthode SPH », soutenance octobre 2008

Publication

1. Ducrozet G., Bonnefoy F., Le Touzé D. & Ferrant P. '3D HOS simulations of extreme waves in open seas', Natural Hazards and Earth System Sciences, 7-1, pp. 109–122. (2007).

Communications

1. Le Touzé D., Oger G. & Alessandrini B., 'Smoothed Particle Hydrodynamics simulation of fast ship flows', Proc. of 27th Symp. on Naval Hydrodynamics (SNH 2008), Séoul, Corée. Octobre 2008.
2. Grenier N., Le Touzé D., Antonuo M. & Colagrossi A. 'An improved SPH formulation for multi-phase flow simulations', Proc. of 8th Int. Conf. on Hydrodynamics (ICH2008), Nantes, France. Octobre 2008.

- De Leffe M., Le Touzé D. & Alessandrini B. 'SPH modeling of shallow-water coastal flows', Proc. of 8th Int. Conf. on Hydrodynamics (ICH2008), Nantes, France. Octobre 2008.
- Maruzewski P., Oger G., Le Touzé D. & Biddiscombe J. 'High-performance computing 3D SPH model: sphere impacting the free-surface of water', Proc. of 3rd Int. SPHERIC Workshop (SPHERIC 2008), Lausanne, Suisse. Juin 2008.
- Antuono M., Colagrossi A., Monaghan J. & Le Touzé D. 'SPH conservation of circulation in breaking wave processes', Proc. of 3rd Int. SPHERIC Workshop (SPHERIC 2008), Lausanne, Suisse. Juin 2008.
- Grenier N., Le Touzé D., Ferrant P. & Vila J.P. 'Two-phase flow simulation using a volume fraction SPH scheme with a Riemann solver', Proc. of 3rd Int. SPHERIC Workshop (SPHERIC 2008), Lausanne, Suisse. Juin 2008.
- Colagrossi A., Antuono M., Grenier N., Le Touzé D. & Molteni D. 'Simulation of interfacial and free-surface flows using a new SPH formulation', Proc. of 3rd Int. SPHERIC Workshop (SPHERIC 2008), Lausanne, Suisse. Juin 2008.
- De Leffe M., Le Touzé D. & Alessandrini B. 'Coastal flow simulation using a SPH formulation modelling the non-linear shallow water equations', Proc. of 3rd Int. SPHERIC Workshop (SPHERIC 2008), Lausanne, Suisse. Juin 2008.
- Oger G., Le Touzé D., Alessandrini B. & Ferrant P. '3D impact flows using an enhanced parallelized SPH model', Proc. of Int. Conf. on Violent Flows (VF 2007), Fukuoka, Japon. Novembre 2007.
- Oger G., Le Touzé D., Alessandrini B. & Ferrant P. 'Simulations of ship flows at high Froude numbers using Smoothed Particle Hydrodynamics', Proc. of the 9th Int. Conf. on Fast Sea Transportation (FAST 2007), Shanghai, Chine. Septembre 2007.

Contrats

- SimHyd DGA ; 'Développement de méthodes numériques en hydrodynamique', 2007
- SimHyd2, DGA, contrat en cours

16. UMR CNRS 8107 - LML (Laboratoire de Mécanique de Lille)

Localisation : Lille

Site Web : <http://lmlm6-62.univ-lille1.fr/lml/>**Projet : 2006006**Responsable de projet : **Jean-Philippe Laval**Titre : **Etude de la turbulence de paroi sous gradient de pression adverse.****Thèse**

- Une thèse en cours : Rostislav Dolganov

Publications

- M. Marquillie, J.-P. Laval and R. Dolganov, 2008, Direct Numerical Simulation of separated channel flows with a smooth profile, J. Turbulence, vol 9, pp 1-23.
- B. Dubrulle, P. Blaineau, O. Mafra Lopes, F. Daviaud, J.-P. Laval and R. Dolganov, 2007, Bifurcations and dynamo action in a Taylor-Green flow, New J. Phys., vol 9, p 308.

Collaboration

- Collaboration entre 17 partenaires Européens au sein du projet Européen WALLTURB (2005-2009)

Projet : 2007008Responsable de projet : **Gilmar Mompean**Source des informations : **Laurent Thais**

Titre : **Simuations d'écoulements viscoélastiques turbulents par DNS et LES.**

Publication

1. Thais, L., Tejada-Martinez, A.E., Gatski, T.B., Mompean, G.
Temporal large eddy simulations of turbulent viscoelastic drag reduction flows. Soumis à Phys. of Fluids (en cours de revue).

Master

1. Une projet M2R : N. Szalkiewicz

Communications

1. Thais, L., Mompean, G., Tejada-Martinez, A.E., Gatski, T.B.
Simulations numériques de la réduction de traînée turbulente
43ème Colloque Annuel du Groupe Français de Rhéologie (GFR), Ecole Polytechnique, Palaiseau, Octobre 2008.
2. Thompson R.L., Thais, L., Mompean, G.
Application of tensor decomposition theorems on DNS data of viscoelastic drag reducing channel flow, 4th Brazilian Conference on Rheology, Rio de Janeiro, Brésil, Juillet 2008.

Collaborations

1. Department of Civil and Environmental Engineering, University of South Florida, Tampa, Florida USA
2. Laboratoire d'Etudes Aérodynamiques, Université de Poitiers, ENSMA, CNRS, France
3. Center for Coastal Physical Oceanography and Ocean, Earth and Atmospheric Sciences, Old Dominion University, Virginia USA
4. Grupo de Escoamento de Fluidos Complexos - LMTA - PGMEC - Department of Mechanical Engineering, Universidade Federal Fluminense, Rio de Janeiro, Brazil.

17. LMPG (Laboratoire de Mécanique, Physique et Géosciences)

Localisation : Le Havre

Site Web : <http://www.univ-lehavre.fr/recherche/lmpg/index.php>

Projet : 2003013

Responsable de projet : **Elie Rivoalen**

Titre : **Modélisation numérique d'un jet tridimensionnel en écoulement transversal.**

Publication

1. Huberson S., Rivoalen E. and Voutsinas S. "Vortex particle methods in aeroacoustic calculations", J. Comp. Phys. , 227, pp. 9216-9240 (2008).

Thèses

1. Jean Marc Cherfils (3ème année de thèse, Bourse MRES)
2. Fabrice Maganga (2ème année de thèse, Bourse Région/Ifremer)
3. Pierre Arnaud Duclos (2ème année de thèse, bourse CIFRE en cotutelle avec laboratoire UMR M2C-Rouen)

Master

1. Rémy Croquet (Stage Master – Etudiant INSA-Rouen Département Génie mathématique)

Communications

1. Réunion GDR SEED Hydrole (Systèmes d'Énergie Électrique dans leur Dimension Sociétale), Université de Brest, Ecole Navale, Ifremer, Université du Havre (LOMC et GREAH) et Université de Nantes
- 14 mars 2008 au Havre
- 16 novembre 2007 à Brest
2. « Journée Thématique Hydrolienne » organisée par l'Ifremer, au centre Ifremer d'Issy Les Moulineaux, 26 mars 2008.
3. EMDI (Espace Manche Development Initiative - Arc Manche). Participation conférence finale le 13 et 14 novembre 2007 à Portsmouth
4. J-M. Cherfils, L. Blonce, G. Pinon and E. Rivoalen, Simulation of water wave – coastal structure interaction by Smoothed Particle Hydrodynamics. 8th International Conference on Hydrodynamics, Nantes, 30 sept. 3 octobre 2008
5. F. Maganga, G. Pinon, G. Germain and E. Rivoalen, Numerical simulation of a wake of marine current turbines with a particle method, World Renewable Energy Congress X (WREC X), Glasgow, Scotland, 19-25 July 2008
6. J-M. Cherfils, L. Blonce, G. Pinon et E. Rivoalen, Simulation numérique des interactions houle-ouvrages marins. XXIVème Rencontres universitaires de Génies Civil, Nancy, 4-6 juin 2008
7. J-M. Cherfils, L. Blonce, G. Pinon et E. Rivoalen , 3rd International SPHERIC SPH Workshop, 4-6 June 2008, EPFL, Lausanne, Switzerland (session Poster)
8. Fabrice Maganga, G. Pinon, G. Germain and E. Rivoalen Numerical characterisation of the wake generated by marine current turbines farm, ICOE 2008: 2nd International Conference on Ocean Energy, (session Poster) Brest 15-17 octobre 2008.

Collaboration

1. Collaboration avec le centre IFREMER de Boulogne sur mer sur le travail concernant les hydroliennes.

Projet : 2006015Responsable de projet : **Hua Qing Wang**Source des informations : **Anthony Beaudoin**Titre : **Modélisation physique et numérique du colmatage dans les sols.**

Modélisation numérique des mécanismes de transfert de masse en milieux poreux, hétérogènes et non saturés, par une approche lagrangienne, appelée méthode particulière.

Publications

1. J.R De Dreuzy, A. Beaudoin and J. Erhel, Reply to comment on Asymptotic dispersion in 2D heterogeneous porous media determined by parallel numerical simulations by A. Fiori, G. Dagan and I. Jankovic, Water Resources Research, vol. 44, 2008.
2. J.R De Dreuzy, A. Beaudoin and J. Erhel, Asymptotic dispersion in 2D heterogeneous porous media determined by a parallel numerical simulations, Water Resources Research, vol. 43, 2007.
3. S. Oukfif, A. Beaudoin, A. Benamar and H.Q. Wang, Modeling reactive transport in heterogeneous saturated porous media, REGC (2007).

Collaborations

1. ANR MICAS (Modélisation et Calcul intensif pour la Simulation d'Aquifères)
Référence : ANR-07-CIS7-004-04
Programme : CIS
Projet : MICAS
Durée : 48 mois
Date de commencement du projet : 01/01/2008
Partenaires : Géosciences de Rennes, IRISA – INRIA de Rennes, LOMC de l'Université du Havre, CDCSP de

l'Université de Lyon 1

Objectifs scientifiques :

Macro dispersion dans des milieux poreux 3D hétérogènes.

Écoulement permanent dans des réseaux discrets de fractures 3D.

Interprétation des essais de puits dans des milieux poreux hétérogènes et des réseaux de fractures 2D et 3D.

Écoulement dans des milieux mixtes poreux et fracturés en 2D et 3D.

Résolution à grande échelle de systèmes linéaires par des méthodes multi niveaux.

Modèles stochastiques et algorithmes pour pallier le manque d'observations et l'hétérogénéité.

Déploiement de simulations multiparamétriques sur une grille de calcul.

2. PN ERINOH (Erosion interne des ouvrages hydrauliques)

Partenaires publics : CEMAGREF, CEREGE, GeM, LCPC, LRPC de Rouen, LOMC, LIRIGM et UMPC

Partenaires privés : EDF, SOBESOL et IREX

Date de commencement du projet : 01/01/2007

Objectifs scientifiques : modéliser les phénomènes mécaniques, hydraulique et physico chimiques qui sont à différentes échelles à la base de l'érosion interne. L'érosion interne à l'échelle du grain nécessite deux phénomènes : son détachement et son transport.

3. GDR MOMAS (Modélisations mathématiques et Simulations numériques liées aux problèmes de gestion des déchets nucléaires)

Date : 2006/2007 et 2007/2008

Partenaires : MAB, LOMC, INRIA/IEC, LEA

Objectifs scientifiques : prendre en compte les incertitudes sur les propriétés du milieu poreux dans les simulations numériques de transport de contaminant, passif ou actif. Pour résoudre ce problème, il nous faut à la fois disposer d'une modélisation stochastique des caractéristiques du milieu, par exemple vitesse de transport et dispersion mécanique, et d'un modèle d'intégration des équations de transport permettant de caractériser l'incertitude sur la réponse.

18. EA3828 - LMR (Laboratoire de Mécanique de Rouen)

Localisation : Rouen

Site Web : <http://www.insa-rouen.fr/recherche/laboratoires/plonearticle.2005-04-08.5905807685/>

Remarque : certains chercheurs du laboratoire utilisent également le cluster de calcul Linux HPXO.

Projet : 2003006

Responsable de projet : **Fabrice Barbe**

Titre : **Approche par éléments finis de la transformation de phase solide-solide.**

Thèse

1. Salem Meftah, Octobre 2007, INSA Rouen, LMR, Modélisation de la plasticité due à une transformation martensitique dans un acier.

Publications

1. H. Hoang, F. Barbe, R. Quey and L. Taleb (2008), FE determination of the plasticity induced during diffusive transformation in the case of nucleation at random locations and instants. Computational Materials Science 43, pp. 101-107
2. Article de revue : F. Barbe, R. Quey, L. Taleb and E. Souza de Cursi (2008), Numerical modelling of the plasticity induced during diffusive transformation. Case of a random instantaneous array of nuclei. Eur J Mechanics/A 27, pp. 1121-1139

Projet : 2008012

Responsable de projet : **Fabrice Barbe**

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

Thèse

1. Ha Hoang, Mai 2008, INSA ROUEN, LMR Modélisation numérique de la plasticité des transformations de phase diffusives à l'état solide

Communication en congrès international avec proceedings publiée avec ISBN

1. R. Quey, H. Hoang, F. Barbe and L. Taleb (2008), Effect of the random spatial distribution of nuclei on the transformation plasticity in a diffusively transforming steel. Proc 2nd Int Conf Distortion Engineering, Eds. H.-W. Zoch and Th. L\"ubben, pp. 413-420 (Bremen, Germany, Sept. 2008)

19. UMR CNRS 6143 - M2C (Morphodynamique Continentale et Côtière)

Localisation : Caen

Site Web : <http://www.geos.unicaen.fr/>**Projet : 2007006**Responsable de projet : **Jean-Claude Brun-Cottan**Source des informations : **Robinson Hordoir**Titre : **Analyse des transferts à l'interface continent-océan : sédiments, circulation haline, interaction grande échelle et climat.****Publications**

1. R. Hordoir, J. Polcher, J.-C. Brun-Cotant and G. Madec (2008) : Towards a parametrization of river discharges into Ocean General Circulation Models. A closure through energy conservation. Climate Dynamics, DOI : 10.1007/s00382-008-0416-4.
2. Chauchat, J., and S. Guillou (2008), On turbulence closures for two-phase sediment-laden flow models, J. Geophys. Res., 113, C11017, doi:10.1029/2007JC004708.

20. UMR CNRS 8522, FR CNRS 2416 - PC2A (Laboratoire de PhysicoChimie des Processus de Combustion et l'Atmosphère)

Localisation : Lille

Site Web : <http://www.univ-lille1.fr/umr8522>**Projet : 2007001**Responsable de projet : **Florent Louis**Titre : **Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans la formation des polluants automobiles.****Publication**

1. A Theoretical Study of the Kinetics of the Benzylperoxy Radical Isomerization, J.Phys.Chem. A 2008 112 6045

Communications

1. Etude théorique de l'oxydation du toluène et de l'o-xylène
11ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones (RCTF), Dinard, 30 Juin-4 Juillet 2008
CANNEAUX S., LOUIS F., RIBAUOUR M., EL BAKALI A., MINETTI R., PAUWELS J.F.
2. A Theoretical Study of Toluene and o-xylene Oxidation
World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Sydney (Australie),
14-19 Septembre 2008
CANNEAUX S., LOUIS F., RIBAUOUR M., EL BAKALI A., MINETTI R., PAUWELS J.F.

21. U648 INSERM - PMC (Laboratoire de Pharmacochimie Moléculaire et Cellulaire)

Localisation : Paris

Site Web : http://www.biomedicale.univ-paris5.fr/ifr95/C107_u648.htm

Remarque : certains chercheurs du laboratoire utilisent également le cluster de calcul Linux HPXO.

Projet : 1998053

Responsable de projet : **Nohad Gresh**

Titre : **Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable.**

Thèse

1. Une thèse, date de soutenance prévue : 15 Octobre 2008

Publications

1. The specificity of acyl transfer from 2-mercaptobenzamide thioesters to the HIV-1 nucleocapsid protein. L. M. Miller Jenkins, T. Hara, S. R. Durrell, R. Hayashi, J. K. Inman, J.-P. Piquemal, N. Gresh, and E. Appella, J. Am. Chem. Soc., 131, 11067-11078 (2007).
2. Anisotropic, polarizable molecular mechanics studies of inter-, intramolecular interactions, and ligand-macromolecule complexes. A bottom-up strategy. N. Gresh, G. Andres Cisneros, T. A. Darden, and J.-P. Piquemal, J. Chem. Theory and Comput. 3, 1960-1986 (2007).
3. Energy analysis of Zn polycoordination in a metalloprotein environment and of the role of a neighboring aromatic residue. What is the impact of polarization? B.de Courcy, J.-P. Piquemal, N. Gresh. J. Chem. Theory and Comput. 4, 000-000 (2008).

Communications

1. Inhibitor-kinase interactions. 'Icy', highly polarized water molecules can tip the relative energy balances of competing inhibitors. Benoit de Courcy, Jean-Philip Piquemal, Christiane Garbay, Nohad Gresh.
2. Communication par affiche, Gordon Research Conference on Computational Chemistry, Mount Holyoke, Massachusetts, USA, Août 2008.
3. Communication orale, second Ehrlich Conference on Magic Bullets, Nuremberg, Allemagne, 4 Octobre 2008.

Collaborations

1. Laboratoire de Chimie Théorique, UMR 7616 CNRS, Paris
2. Laboratoire de Chimie Bioorganique et Bioinorganique, UMR 8182 CNRS, Orsay
3. Laboratory of Structural Biology, National Institute of Environmental Health Science, Research Triangle Park, North Carolina 27700, USA
4. Laboratory of Cell Biology, National Institute of Health, Bethesda, Maryland, 20892 USA.

22. UMR CNRS 6011 - UCO2M (Unité de Chimie Organique Moléculaire et Macromoléculaire)

Localisation : Le Mans

Site Web : <http://sciences.univ-lemans.fr/uco2m/index.htm>

Projet : 2008007

Responsable de projet : **Arnaud Martel**

Titre : **Etude de la catalyse de réactions de Diels-Alder par les sels d'étain (IV).**

Pas de publication

23. UMR CNRS 8576 - UGSF (Glycobiologie Structurale et Fonctionnelle)

Localisation : Lille

Site Web : <http://ugsf-umr-glycobiologie.univ-lille1.fr/>

Projet : 2007010

Responsable de projet : **Philippe Lagant**

Titre : **Etudes structurales de Polysaccharides anioniques formant des hydrogels : chondroïtine-sulfate.**

Publication

1. "Molecular dynamics simulation of the effect of urea and acetone solutes on the structure of water"
A. Idrissi¹, P. Damay¹, M. Kiselev, Y. Puhovsky, E. Cinar, P. Lagant, G. Vergoten

Conférence

1. 'Empirical studies on the solvation of mono and oligosaccharides. Use of the SPASIBA force field.'
International Conference of Applied Sciences. Chemistry and Chemical Engineering
CISA 2008
Slanik-Moldova University of Bacau Roumanie 4-6 avril 2008

B. Projet Normand pour la Modélisation Moléculaire**1. FRE CNRS 3101 - BRICS (Biofilms Résistances Interactions Cellules Surfaces)**

Localisation : Rouen

Source des informations : Pascal Cosette

Site Web : http://www.univ-rouen.fr/LPBM/0/fiche_DOSPM_structure/

Remarque

Ce bilan correspond à l'équipe BRICS dirigée par T Jouenne qui appartient à la FRE3101 (ex UMR6522) Cela doit être mis en perspective de l'activité de plate-forme protéomique coordonnée par l'équipe qui utilise les moyens de calcul pour le serveur Mascot et les moyens de stockage associés.

<http://plateau-roteomique.crihan.fr/ptp/home>

Publications

1. COLLET, A., COSETTE, P., VILAIN, S., COSETTE, P., JUNTER, G.A., JOUENNE, T., PHILIPPS, R.S. DI MARTINO, P.
Protein expression in E. coli S17-1 biofilms: impact of indole.
Anton. Leeuw. Inter. J. G., 91 : 71-85 (2007).
2. DUSSART-BAPTISTA, L., BODILIS, J., BARRAY, S., FREBOURG, N., FOURNIER, M., DUPONT, J.P. and T. JOUENNE
Recurrent recovery of Pseudomonas oryzihabitans strains in a karstified chalk aquifer.
Water Res., 41 : 111-117 (2007).
3. CONLON, J.M., COQUET, L., LEPRINCE, J., JOUENNE, T., VAUDRY, H., KOLODZIEJEK, J, NOWOTNY, N., BEVIER, C.R., MOLER, P.E.
Primary structures of dermal peptides from Rana heckscheri and Rana okaloosae provide insight into phylogenetic relationships among frogs of the Aquarana species group.
Dev. Comp. Immunol., 138 : 87-92 (2007)
4. LEBEAU, T., JOUENNE, T. and G.A. JUNTER
The ability of Candida shehatae co-immobilized with Saccharomyces cerevisiae to metabolize xylose from a glucose and xylose mixture.
Microbiol. Res., 162 : 211-218 (2007)
5. LIENARD, D., TRAN DINH, O., VAN OVERTVELT, V., BONNEAU, C., WAMBRE, E., BARDOR, M., COSETTE, P., LURENT, A.D., DORLHAC DE BORNE, F., DELON, R., VAN REE, R., MOINGEON, P., FAYE, L. and V. GOMORD
Production of recombinant allergens in plant cells.
Plant Biotechnol. J., 5: 93-108 (2007).
6. MAMELLI, L.DEDIEU, L., DE, E., KONKEL, M., PAGES, J.M. and J.-M. BOLLA
Chromosomal His-Tagging: An alternative approach to membrane protein purification.
Proteomics, 7: 399-402 (2007).
7. SUZUKI, H., IWAMURO, S., OHNUMA, A., COQUET, L., LEPRINCE, J., JOUENNE, T., VAUDRY, H., TAYLOR, C., ABEL, P.W. and J.M. CONLON
Expression of genes encoding antimicrobial and bradykinin-related peptides in skin of the japenese brown frog, Rana sakuraii.
Peptides, 28 : 505-514 (2007).
8. Ohnuma A, J., Conlon, M., Yamaguchi, k., Kawasaki, H., Coquet, L, Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H. and S. Iwamuroa
Antimicrobial peptides from the skin the Japanese mountain brown frog Rana ornativentris: evidence for polymorphism among preprotemporin mRNAs.
Peptides, 28:524-32 (2007).
9. CONLON, J. M., BEVIER, C.R., COQUET, L., LEPRINCE, J., JOUENNE, T., VAUDRY, H. and B.R. HOSSAK
Peptidomic analysis of skin secretions supports separate species status for the tailed frogs, Ascaphus truei and Ascaphus montanus.
Comp. Biochem. Phys. D, 2: 121-125 (2007).
10. LITZLER, P.-Y., BENARD, L., BARBIER-FREBOURG, N., VILAIN, S., JOUENNE, T., BEUCHER, E., BUNEL, C., LEMELAND, J.F. and J.P. BESSOU

- Biofilm formation on pyrolytic carbon heart valves: influence of surface free energy, roughness and bacterial species.
J. Thorac. Cardio. Sur., 2007, 134: 1025-1032.
11. CONLON, J.M., WOODHAMS, D.C., RAZA, H., COQUET, L., LEPRINCE, J., JOUENNE, T., VAUDRY, H. and L.A. ROLLINS-SMITH
Peptides with differential cytolytic activity from skin secretions of the Lemur leaf frog *Phyllomedusa lemur* (Hylidae: Phyllomedusinae).
Toxicon, 15, 498-506 (2007).
 12. CONLON, J.M., KOLODZIEJEK, J., NOWOTNY, N., LEPRINCE, J., VAUDRY, H., COQUET, L., JOUENNE, T. and S. IWAMURO
Cytolytic peptides belonging to the brevinin-1 and brevinin-2 families isolated from the skin of the Japanese brown frog, *Rana dybowskii*.
Toxicon, 50: 746-756 (2007).
 13. KHEMIRI, A., JOUENNE, T. and P. COSETTE
Presence in *Legionella pneumophila* of a like-mammalian mitochondrial permeability transition pore ?
FEMS Microbiol. Lett., 278, 171-176 (2008).
 14. KHEMIRI, A., JOUENNE, T., and P. COSETTE
Outer membrane proteomic maps and surface-exposed proteins of *Legionella pneumophila* using cellular fractionation and fluorescent labeling.
Anal. Bioanal. Chem., 390: 1861-1871 (2008).
 15. Dé, E., SAINT, N., GLINEL, K., MELI, A., LEVY, D. and F. JACOB-DUBUISSON
Influence of the passenger domain of a model autotransporter on the properties of its translocator domain.
Mol. Membr. Biol., 25: 192-202 (2008).
 16. KHEMIRI, A., JOUENNE, T. and P. COSETTE
Two proteins that might be involved in a MPTP-like system are expressed by *Legionella pneumophila*.
Eur. J. Wat. Qual., 39 : 13-22 (2008).
 17. CONLON, J.M., KOLODZIEJEK, J., NOWOTNY, N., LEPRINCE, J., VAUDRY, H., COQUET, L., JOUENNE, T. and J.D. KING
Characterization of antimicrobial peptides from the skin secretions of the Malaysian frogs, *Odorrana hosii* and *Hylarana picturata* (Anura ranidae).
Toxicon, 52 : 465-473 (2008).
 18. King, J.D., Leprince, J., Vaudry, H., Coquet, L., Jouenne, T. and J.M. CONLON
Purification and characterization of antimicrobial peptides from the Caribbean frog, *Leptodactylus validus* (Anura:leptodactylidae).
Peptides, 29 : 1287-1292 (2008).
 19. JOUENNE.T. Les biofilms bactériens, Techniques de l'Ingénieur, BIO 600 : 1-8 (2008)
 20. SULAEMAN, S., TRESSE, O., DE, E. et M. FEDERIGHI. *Campylobacter jejuni* et maladies infectieuses d'origine alimentaire. Bull. Soc. Fr. Microbiol., 23 : 26-34 (2008)
 21. BOTIA, B., CASTEL, H., LEFEBVRE, T., SEYER, D., BENARD, M., FALLUEL-MOREL, A., AUBERT, N., COSETTE, P., JOUENNE, T., VAUDRY, H., GONZALEZ, B. et D. VAUDRY.
Effets du PACAP et de l'éthanol sur la survie des neurones en grain du cervelet de rat in vitro et in vivo : étude des mécanismes d'action.
Les cahiers de l'IREB, sous presse
 22. HADJI SFAXI, LIMAM, F., FERRARO, D., FASANO, H., COSETTE, P., COQUET, L., JOUENNE, T. and N. MARZOUKI.
A new Cu,Zn SOD3 isolated from garlic : purification and antioxidant effect on cell lines.
Biologie, sous presse

Articles acceptés

1. BENARD, L., LITZLER, P.-Y., COSETTE, P., LEMELAND, J.F., JOUENNE, T. and G.A. JUNTER
Proteomic analysis of Staphylococcus aureus biofilms grown in vitro on mechanical heart valve leaflets.
J. Biomed.. Mater. Res.
2. BOTIA, A., SEYER, D., RAVNI, A., BENARD, M., FALLUEL-MOREL, A., COSETTE, P., JOUENNE, T., FOURNIER, A., VAUDRY, H., GONZALEZ, B. and D. VAUDRY
Peroxiredoxin 2 is involved in the neuroprotective effects of PACAP in cultured cerebellar granule neurons.
J. Mol. Neurosci.
3. CONLON, J.M., POWER, G.J., ABDEL-WAHAB, YHA., FLATT, P.R., JIANSHEG, H., COQUET, L., LEPRINCE, J., JOUENNE, T. and H. VAUDRY
A potent, non-toxic insulin-releasing peptide isolated from an extract of the skin of the Asian frog, Hylarana güntheri (Anura:Ranidae).
Regul. Peptides
4. COLLET, A., COSETTE, P., BELOIN, C., GHIGO, J.M., RIHOUEY, C., LEROUGE, P., JUNTER, G.A. and T. JOUENNE
Impact of rpoS deletion on the proteome of Escherichia coli grown as biofilm.
J. Prot. Res

Brevet - déclaration d'invention

1. SERRES, R., COLLET, A., COSETTE, P., JOUENNE, T., LEBON, A. et D ;VAUDRY. Déclaration d'invention d'un logiciel LIMS Laboratory Information Management Systems (n° DI-PBM 230022007)

Conférences

1. COSETTE, P.
Méthodes d'identification et outils bioinformatique en protéomique,
Technopôle de Borj-Cedria, Tunisie, 1 Novembre 2007
2. COSETTE, P.
Marquage isotopique et marquage fluorescent pour l'analyse protéomique différentielle,
Faculté des Sciences de Tunis, Tunisie, 3 Novembre 2007
3. JOUENNE, T. Les biofilms et les stratégies de lutte. Université de Cergy-Pontoise, Cergy-Pontoise, 8 Novembre 2007
4. JOUENNE T. Les biofilms et l'infection. Faculté de Médecine, CHRB Calmette, Lille, 5 Décembre 2007
5. JOUENNE T. Les biofilms, des consortiums ubiquitaires, Université Badji Mokhtar d'Annaba (Algérie), 3 février 2008
6. JOUENNE T. La protéomique et ses applications, Université Badji Mokhtar d'Annaba (Algérie), 4 février 2008.
7. JOUENNE T. Identification d'une nouvelle cible moléculaire contre P. aeruginosa organisée en biofilm. La Recherche sur l'infection dans la mucoviscidose. Des projets de recherche à la problématique clinique. Paris, 20 Mai 2008
8. JOUENNE T. Légionella : Aspects microbiologiques, Données épidémiologiques, pouvoir pathogènes, caractéristiques de croissance, typage moléculaire. Réunion d'information « Prévention de la légionellose ». Association Technique Energie Environnement, Mont-Saint-Aignan, 3 Octobre 2008

Communications

1. Khemiri A, Nigaud Y, Vaudry D, Lerouge P, Jouenne T and P Cosette
Subcellular proteomics in Legionella pneumophila.
23rd Meeting of the European Group for /Legionella /Infections (EWGLI), Madrid 11-13 Mai 2008.
2. NIGAUD, Y., COSETTE, P. and T. JOUENNE
Biofilm induces modifications of the proteome of planktonic P. aeruginosa cells.
3rd international Biofilms Conference, Munich, Allemagne, 5-8 Octobre 2008.
3. KHEMIRI, A., GALLAND, A., VAUDRY, D., JOUENNE, T. et P. COSETTE.
Protéome total, protéome membranaire et protéome associé à la paroi de Legionella pneumophila.
Congrès de Spectrométrie de masse et analyse protéomique, Pau, 16-20 Septembre 2007. Pau, 2007

- MACE, C., SEYER, D., COSETTE, P., DI-MARTINO, P., CHEMANI, C., GUERY, B., FILLOUX, A., et T. JOUENNE.
Identification of an atypical psop locus of *Pseudomonas aeruginosa* involved in the biofilm formation and virulence.
1er Colloque des jeunes PNIR « Biofilms », Paris, 5-6 Novembre 2007.
- MACE, C., SEYER, D., CHEMANI, C., COSETTE, P., DI-MARTINO, P., GUERY, B., FILLOUX, A., JUNTER, G.A. et T. JOUENNE.
Identification of a biofilm-associated cluster (bac) in *Pseudomonas aeruginosa* involved in biofilm formation and virulence.
9ème colloque des jeunes chercheurs de la Mucoviscidose, Institut Pasteur, 21 Mars 2008
- MACE, C., SEYER, D., CHEMANI, C., COSETTE, P., DI-MARTINO, P., GUERY, B., FILLOUX, A., JUNTER, G.A. et T. JOUENNE.
Identification d'un biofilm-associated cluster (BAC) chez *Pseudomonas aeruginosa*, impliqué dans la formation de biofilm et la virulence.
3èmes Journées thématiques Biofilms : approches expérimentales et moléculaires, Dourdan, 24-25 juin 2008
- CHERGUI, A., BAKHTI, M.Z., SELATNIA, A. and JUNTER G.-A.
Biosorption des ions Pb⁺² et Cd⁺² d'une solution aqueuse par une biomasse morte *Streptomyces rimosus*.
11e Congrès de la Société Française de Génie des Procédés, Saint-Etienne, 9-11 octobre 2007.

Thèse

- ARBIA KHEMIRI : protéome total, membranome et surfaceome de *Legionella pneumophila*.
Caractérisation du protéome « biofilm ». Thèse de l'Université de Rouen en biologie cellulaire, spécialité microbiologie, 15 Avril 2008.

Animation scientifique

- JOUENNE, T. Animateur de la session « Imagerie moléculaire », 1ères rencontres Normandes en Chimie-Biologie-santé, « Galénique et imagerie », Rouen, 7 Décembre 2007.

Contrats publics et privés

- 2008-2013 COST Action in "Chemistry and Molecular Sciences and Technologies (n°0701) " Antibiotic transport and efflux: new strategies to combat bacterial resistance (ATENS)
- 2007-2010 Grant by the Portuguese Foundation for science and technology: Physiological characterization of bacterial biofilms challenged by emergent antimicrobial stress agents – characterization of the bacteria resistance mechanisms .
Laboratoire partenaire: Departamento de Engenharia Biológica, Universidade do Minho, Braga, Portugal,
- 2007-2009 Programme ERA-NET PathoGenoMics. Exploring Protein Secretion within the bacterial biofilm matrix. Acronym: EPS-Matrix
Laboratoires partenaires, Institut Pasteur Paris, France(Jean-Marc Ghigo, porteur du projet), UPR CNRS 9025, Marseille, France (A. Filloux), Instituto de Agrobiotecnología, Pamplona, Espagne, (I. Lasa), Centro Investigacion y Tecnología, Segorbe, Espagne (J.R. Penades).
- 2007-2009 Coordonnateur d'un programme national « Blanc » (ANR). Elaboration of antiadhesive, antibacteria surfaces. New strategies to prevent bacteria colonization (SURFANBAC).
Laboratoires associés: UMR CNRS 7006, UMR CNRS 6008
- 2007-2008 Programme prioritaire du PNIR « Biofilm » : Etude de la réponse de *Legionella pneumophila* au stress Chlore dans un biofilm modèle. ". Collaboration avec l'UMR CNRS 6008 (Poitiers) et l'UMR CNRS 7564 (Nancy)
- 2006-2009 Programme TEMPUS CNRS-DGRSRT (Tunisie) : Recherche, caractérisation et identification de substances antimicrobiennes extraites à partir de plantes.
- 2006-2007 Programme prioritaire du PNIR « Biofilms » : Développement de surfaces anti-microbiennes.
- 2005-2008 Action intégrée n° 05 MDU 660, programme TASSILI du Comité Mixte d'Evaluation et de Prospective de coopération inter-universitaire franco-algérienne (CMEP),. Valorisation d'une biomasse mycélienne morte de *Streptomyces rimosus* dans le traitement par biosorption des eaux chargées en métaux lourds

- 2005-2007 Programme FEDER Interreg 3A AMACOM (Advanced Monitoring And Control of Microbial water quality,)
- 2004-2007 ACI BCMS: Etude de voies de sécrétion bactériennes: le système de l'hémagglutinine filamenteuse de Bordetella comme modèle des systèmes à deux partenaires et d'autotransport.
- 2006-2007 Contrat de collaboration avec la Société BIOFILM CONTROL : Site bêta du BioFilm Ring Test
- 2006-2007 Contrat de Recherche avec l'Association "Vaincre la Mucoviscidose"; Identification de protéines impliquées dans le phénotype "Biofilm" de Pseudomonas aeruginosa: Recherche de nouvelles cibles moléculaires, Projet 110548-ren.

2. UPRES EA4258, INC3M FR CNRS 3038 - CERMN (Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie)

Localisation : Caen

Source des informations : Ronan Bureau

Site Web : <http://www.cermn.unicaen.fr/>

Remarque : Ce laboratoire utilise également les ressources de modélisation numérique. Les activités liées aux projets scientifiques 2005004 et 2007015 figurent en première partie de ce document.

Thématiques principales

1. Conception et études structures activités de ligands sérotoninergiques.
2. Conception de nouveaux antagonistes de l'urotensine (récepteur GPR14).
Utilisation du cluster Dalton dans le cadre de ce projet (projet n°2005004).
3. Mise en place et exploitation des chimiothèques (screening virtuel sur la base des pharmacophores, docking).
4. Analyses des données issues de diffraction RX.
5. Estimation des propriétés écotoxicologiques et toxicologiques des produits chimiques.

Publications

1. Novel aminoethyl Biphenyls as 5-HT7 receptors ligands. M Paillet- Loilier, F. Fabis, A. Lepailleur, R. Bureau, S. Butt- Gueulle, F. Dauphin, A. Lesnard, C. Delarue, H. Vaudry and S. Rault. Bioorg. Med. Chem. Lett., 2007, 17, 3018-3022.
2. Lopez-Atalaya, J.P.; Roussel, B.D.; Levrat, D.; Nicole, O.; Benchenane, K.; Castel, H.; Leprince, J.; Hommet, Y.; To Van, D.; Sopkova, J.; Bureau, R.; Rault, S.; Vaudry, H.; Petersen, K.U.; Ali, K. and Vivien, D. Towards Safer Thrombolytic Agents In Stroke: Molecular Requirements For NMDA Receptor-Mediated Neurotoxicity. Journal of Cerebral Blood Flow & Metabolism. 2008, 28, 1212 – 1221.
3. Sopková-de Oliveira Santos J., Verhaeghe P., Lohier J.-F., Rathelot P., Vanelle P. and Rault S. Nitrated isomers of 2-trichloromethylquinoline. Acta Cryst., 2008, C64, o441–o444.
4. Sopková-de Oliveira Santos J., Caruso A., Lohier J.-F., Lancelot J.-C. and Rault S. 9-Ethyl-1,4-dimethyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl) -9H-carbazoles and 6-bromo-9-ethyl-1,4-dimethyl-9H-carbazole. Acta Cryst., 2008, C64, o453–o455

Communications

1. 2D Pharmacophore and genetic algorithm. Application to 5-HT7 ligands. Thibault Varin, Ronan Bureau, Aurélien Lesnard, Sylvain Rault. Journée de l'École Doctorale. Havre, mars 2008.
2. Sopkova-de Oliveira Santos J., Burzicki G., Lohier J.-F., Voisin-Chiret A.S. and Rault S. Oligopyridines : study of their helicity. Colloque d'AFC, Rennes, 7-10 juillet, 2008.
3. Sopkova-de Oliveira Santos J., Lesnard A., Lezoualc'h, Bureau R. and Rault S. Conception de nouveaux ligands de l'Epac2. 22èmes journées franco-belges de Pharmacochimie et 17èmes conférences européennes du GP2A, Caen, 28-30 mai 2008.

Thèses

1. M. Thibault Varin (début 2006).
Financement par une bourse régionale.
Sujet : Détermination par modélisation moléculaire de nouveaux ligands des récepteurs sérotoninergiques de type 5A (5-HT_{5A}) et 6 (5-HT₆). Exploitation des chimiothèques locales et nationales.
2. M. Sylvain Lozano (début Janvier 2008).
Projet INNOTOX. Agence National de la Recherche, ANR-07-CP2D-09-02.
Sujet : Etudes de relation structure activité dans le domaine de l'écotoxicologie. Application sur un ensemble hétérogène de composés chimiques.

Master

1. Mlle Carla Jamous

Financements post-doctoral

1. Mme Elodie Lescot-Fontaine.
Projet INNOTOX. Agence National de la Recherche, ANR-07-CP2D-09-02.
2. M. Alban Lepailleur.
Projet INNOTOX. Agence National de la Recherche, ANR-07-CP2D-09-02.

Collaboration

1. Projet Urotensine / 26 Rfa: Unité INSERM U 413 (Dr C. Delarue, Dr. H. Vaudry) et IRCOF, laboratoire de RMN (Pr H. Oulaydi), Université de Rouen.

Projet ANR

1. Projet INNO-TOX. Projet se plaçant dans le cadre de la thématique REACh. Collaboration PCAS (M. Bouquet) / CNRS 7186 (P. Vasseur).

Enseignements

1. Travaux dirigés de modélisation moléculaire dans le cadre du Master Professionnel "Imagerie de la santé" : 10 étudiants (4 heures).
2. Utilisation des logiciels comme base de support d'un cours de modélisation moléculaire, Master recherche M2 chimie organique : 10 étudiants.
3. Travaux pratiques de modélisation moléculaire dans le cadre de l'UFR des sciences pharmaceutiques : 80 étudiants (autour de 40 heures).

3. UMR CNRS 6232 - CI-NAPS (Centre d'Imagerie - Neurosciences et d'Applications aux PathologieS)

Localisation : Caen

Source des informations : Nathalie Colloc'h

Site Web : http://www.cyceron.fr/web/formation_de_recherche.html

Remarque : Ce laboratoire utilise également les ressources de modélisation numérique. Les activités liées au projet scientifique 2007011 figurent en première partie de ce document

Nous avons également utilisé les ressources du CRIHAN à travers l'utilisation d'un des logiciels de visualisation 3D des protéines disponibles: Insight II (Accelrys).

Publications

1. Colloc'h N., Gabison L., Monard G., Altarsha M., Chiadmi M., Marassio G., Sopkova-de Oliveira Santos J., El Hajji M., Castro B., Abraini J.H. et Prangé T., 'Oxygen pressurized X-ray crystallography: probing the dioxygen binding site in cofactorless urate oxidase and implications for its catalytic mechanism', *Biophys. J.*, 2008, 95, 2415-2422

2. Lescot E., Sopkova-de Oliveira Santos J., Colloc'h N., Rodrigo J., Milazzo-Segalas I., Bureau R. et Rault S. 'Three-dimensional model of the human urotensin-II receptor: docking of human urotensin-II and nonpeptide antagonists in the binding site and comparison with an antagonist pharmacophore model', *Proteins*, 2008, 73, 173-184.

Communications

1. Colloc'h N., 'Insight into the mechanism of the cofactor-less urate oxidase : X-ray structures with molecular oxygen and with the dehydrourate intermediate'. American Crystallographic Association Annual meeting, Knoxville, USA, 31 mai – 5 juin 2008
2. Colloc'h N., Gabison L., Monard G., Marassio G., Chiadmi M., Marassio G., El Hajji M., Castro B., Abraini J.H. et Prangé T., 'Etude structurale des complexes entre l'urate oxydase, différents inhibiteurs et l'oxygène moléculaire', Colloque de l'Association Française de Cristallographie, Rennes, 7-10 juillet 2008

4. INSERM U 413 - Laboratoire de Neuroendocrinologie Cellulaire et Moléculaire

Localisation : Rouen

Source des informations : David Vaudry

Site Web : http://www.univ-rouen.fr/LNCM/0/fiche_structure/

Publications

1. Deniel, N., Marion-Letellier, R., Charlionet, R., Tron, F., Leprince, J., Vaudry, H., Ducrotté, P., Dechelotte, P. and Thébault, S.: Glutamine regulates the human epithelial intestinal HCT-8 cell proteome under apoptotic conditions. *Mol. Cell. Proteom.* 6:1671-1679 (2007). (IF = 8,3)
2. Di Martino, P., Doumèche, B., Galas, L., Vaudry, H., Heim, V. and Habarou, H.: Assessing chemical cleaning of nanofiltration membranes in a drinking water production plant: a combination of chemical composition analysis and fluorescence microscopy. *Water Sci. Technol.* 55:219-225 (2007). (IF = 0,6)
3. Do-Rego, J.L., Tremblay, Y., Luu-The, V., Repetto, E., Castel, H., Vallarino, M., Bélanger, A., Pelletier, G. and Vaudry, H.: Immunohistochemical localization and biological activity of the steroidogenic enzyme cytochrome P450 17 α -hydroxylase/C17,20-lyase (P450_{C17}) in the frog brain and pituitary. *J. Neurochem.* 100:251-268 (2007). (IF = 4,8)
4. Do-Rego, J.L., Leprince, J., Luu-The, V., Pelletier, G., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Structure-activity relationships of a series of analogs of the endozepine octadecaneuropeptide (ODN₁₁₋₁₈) on neurosteroid biosynthesis by hypothalamic explants. *J. Med. Chem.* 50:3070-3076 (2007). (IF = 4,8)
5. Doumèche, B., Galas, L., Vaudry, H. and Di Martino, P.: Membrane foulants characterization in a drinking water production unit. *Trans. IChemE, Part C, Food Bioprod. Process.* 85:42-48 (2007). (IF = 0,4)
6. Egido, E.M., Hernández, R., Leprince, J., Chartrel, N., Vaudry, H., Marco, J. and Silvestre, R.A.: 26RFa, a novel orexigenic neuropeptide, inhibits insulin secretion in the rat pancreas. *Peptides* 28:725-730 (2007). (IF = 2,4)
7. Gouardères, C., Mazarguil, H., Mollereau, C., Chartrel, N., Leprince, J., Vaudry, H. and Zajac, J.M.: Functional differences between NPFF₁ and NPFF₂ receptor coupling: high intrinsic activities of RFamide-related peptides on stimulation of [³⁵S]GTP γ S binding. *Neuropharmacology* 52:376-386 (2007). (IF = 3,8)
8. Kidane, A.H., Crujisen, P.M.J.M., Ortiz-Bazan, M.A., Vaudry, H., Leprince, J., Kuijpers-Kwant, F.J., Roubos, E.W. and Jenks, B.G.: Actions of PACAP and VIP on melanotrope cells of *Xenopus laevis*. *Peptides* 28:1790-1796 (2007). (IF = 2,4)
9. Lee, L.T.O., Siu, F.K.Y., Tam, J.K.V., Lau, I.T.Y., Wong, A.O.L., Lin, M.C.N., Vaudry, H. and Chow, B.K.C.: Discovery of growth hormone-releasing hormones and receptors in nonmammalian vertebrates. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 104:2133-2138 (2007) (IF = 10,3)
10. Lescot, E., Sopkova-de Oliveira Santos, J., Dubessy, C., Oulyadi, H., Lesnard, A., Vaudry, H., Bureau, R. and Rault, S.: Definition of new pharmacophores for nonpeptide antagonists of human urotensin-II. Comparison with the 3D-structure of human urotensin II and URP. *J. Chem. Inform. Model.* 47:602-612 (2007). (IF = 3,4)

11. Matsuda, K., Wada, K., Miura, T., Maruyama, K., Shimakura, S.I., Uchiyama, M., Leprince, J., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Effect of the diazepam-binding inhibitor-derived peptide, octadecaneuropeptide, on food intake in goldfish. *Neuroscience* 150:425-432 (2007). (IF = 3,2)
12. Ohnuma, A., Conlon, J.M., Yamaguchi, K., Kawasaki, H., Coquet, L., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H. and Iwamuro, S.: Antimicrobial peptides from the skin of the Japanese mountain brown frog *Rana ornativentris*: evidence for polymorphism among preprotemporin mRNAs. *Peptides* 28:524-532 (2007). (IF = 2,4)
13. Suzuki, H., Iwamuro, S., Ohnuma, A., Coquet, L., Leprince, J., Jouenne, T., Vaudry, H., Taylor, C.K., Abel, P.W. and Conlon, J.M.: Expression of genes encoding antimicrobial and bradykinin-related peptides in skin of the stream brown frog, *Rana sakuraii*. *Peptides* 28:505-514 (2007). (IF = 2,4).
14. Bénard, M., Raoult, E., Vaudry, D., Leprince, J., Falluel-Morel, A., Gonzalez, B.J., Vaudry, H. and Fontaine, M.: Roles of complement receptors (C3aR, C5aR) in the development of the rat cerebellum. *Mol. Immunol.* 45:3767-3774 (2008). (IF = 4,8)
15. Benjdia, A., Subramanian, S., Leprince, J., Vaudry, H., Johnson, M.K. and Berteau, O.: Anaerobic sulfatase-maturing enzymes, first dual substrate radical S-adenosylmethionine enzymes. *J. Biol. Chem.* 283:17815-17826 (2008). (IF = 6,3)
16. Botia, B., Seyer, D., Ravni, A., Bénard, M., Falluel-Morel, A., Cosette, P., Jouenne, T., Fournier, A., Vaudry, H., Gonzalez, B.J. and Vaudry, D.: Peroxiredoxin 2 is involved in the neuroprotective effects of PACAP in cultured cerebellar granule neurons. *J. Mol. Neurosci.* (2008). (IF = 2,2)
17. Bourgault, S., Vaudry, D., Botia, B., Couvineau, A., Laburthe, M., Vaudry, H. and Fournier, A.: Novel stable PACAP analogs with potent activity towards the PAC1 receptor. *Peptides* 29:919-932 (2008). (IF = 2,5)
18. Chuquet, J., Lecrux, C., Chatenet, D., Leprince, J., Chazalviel, L., Roussel, S., MacKenzie, E.T., Vaudry, H. and Touzani, O. : Effect of urotensin-II on cerebral blood flow and ischemia in anesthetized rat. *Exp. Neurol.* 210:577-584 (2008). (IF = 3,7)
19. Grumolato, L., Ghzili, H., Montero-Hadjadje, M., Gasman, S., Lesage, J., Tanguy, Y., Galas, L., Ait-Ali, D., Leprince, J., Guérineau, N.C., Elkahloun, A.G., Fournier, A., Vieau, D., Vaudry, H. and Anouar, Y.: Selenoprotein T is required for PACAP-induced intracellular Ca²⁺ regulation and neuroendocrine secretion. *FASEB J.* 22:1756-1768 (2008) (IF = 7,2)
20. Houari, A., Picard, J., Habarou, H., Galas, L., Vaudry, H., Heim, V. and Di Martino, P.: Rheology of biofilms formed at the surface of NF membranes in a drinking water production unit. *Biofouling* 24:235-240 (2008). (IF = 2,9)
21. Khemiri, A., Galland, A., Vaudry, D., Chan Tchi Song, P., Vaudry, H., Jouenne, T. and Cosette, P.: Outer-membrane proteomic maps and surface-exposed proteins of *Legionella pneumophila* using cellular fractionation and fluorescent labelling. *Anal. Bioanal. Chem.* 390:1861-1871 (2008). (IF = 2,1)
22. King, J.D., Leprince, J., Vaudry, H., Coquet, L., Jouenne, T. and Conlon, J.M. : Purification and characterization of antimicrobial peptides from the Caribbean frog *Leptodactylus validus* (Anura: Leptodactyladae). *Peptides* 29:1287-1292 (2008). (IF = 2,7)
23. Le Mevel, J.C., Lancien, F., Mimassi, N., Leprince, J., Conlon, J.M. and Vaudry, H.: Central and peripheral cardiovascular, ventilatory and motor effects of trout urotensin II in the trout. *Peptides* 29:830-837 (2008). (IF = 2,5)
24. Leprince, J., Chatenet, D., Dubessy, C., Fournier, A., Pfeiffer, B., Scalbert, E., Renard, P., Pacaud, P., Oulyadi, H., Ségalas-Milazzo, I., Guilhaudis, L., Davoust, D., Tonon, M.C. and Vaudry, H.: Structure-activity relationships of urotensin II and URP. *Peptides* 29:658-673 (2008). (IF = 2,4)
25. Lopez-Atalya, J.P., Roussel, B.D., Levrat, D., Parcq, J., Nicole, O., Hommet, Y., Benchenane, K., Castel, H., Leprince, J., To Van, D., Bureau, R., Rault, S., Vaudry, H., Petersen, K.U., Ali, C. and Vivien, D.: Toward safer thrombolytic agents in stroke: molecular requirements for NMDA receptor-mediated neurotoxicity. *J. Cereb. Blood Flow Metab.* 28:1212-1221 (2008). (IF = 5,7)
26. Ravni, A., Vaudry, D., Gerdin, M., Eiden, M.V., Falluel-Morel, A., Gonzalez, B.J., Vaudry, H. and Eiden, L.E.: A cAMP-dependent, protein kinase A-independent signaling pathway mediating neuritogenesis through Egr1 in PC12 cells. *Mol. Pharmacol.* 73:1688-1708 (2008). (IF = 5,1)

27. Richard, J.A., Meyer, Y., Jolivel, V., Massonneau, M., Dumeunier, R., Vaudry, D., Vaudry, H., Renard, P.Y. and Romieu, A.: Latent fluorophores based on a self-immolative linker strategy and suitable for protease sensing. *Bioconjugate Chemistry* 19:1707-1718 (2008). (IF = 3,8)

Communications

1. Andersen, W.G., Leprince, J. and Conlon, J.R.: Purification, structural characterization and myotropic activity of a peptide related to desArg⁹bradykinin from an elasmobranch fish, the little skate, *Leucoroja erinacea*. *Peptides* (in press).
2. Aubert, N., Vaudry, D., Falluel-Morel, A., Desfeux, A., Fisch, C., Ancian, P., de Jouffrey, S., Le Bigot, J.F., Couvineau, A., Laburthe, M., Fournier, A., Laudénbach, V., Vaudry, H. and Gonzalez, B.J.: PACAP prevents toxicity induced by cisplatin in rat and primate neurons but not in proliferating ovary cells: Involvement of the mitochondrial apoptotic pathway. *Neurobiol. Dis.* (in press). (IF = 4,4)
3. Barbier, E., Pierrefiche, O., Vaudry, D., Vaudry, H., Daoust, M. and Naassila, M.: Long-term alterations in vulnerability to addiction to drugs of abuse and in brain gene expression after early life ethanol exposure. *Neuropharmacology*. (in press). (IF = 3,8)
4. Bourgault, S., Vaudry, D., Guilhaudis, L., Raoult, E., Couvineau, A., Laburthe, M., Ségalas-Milazzo, I., Vaudry, H. and Fournier, A.: Biological and structural analysis of truncated analogs of PACAP27. *J. Mol. Neurosci.* (in press). (IF = 2,2)
5. Conlon, J.M., Power, G.J., Abdel-Wahab, Y.H.A., Flatt, P.R., Jiansheng, H., Coquet, L., Leprince, J., Jouenne, T. and Vaudry, H.: A potent, non-toxic insulin-releasing peptide isolated from an extract of the skin of the Asian frog, *Hylarana güntheri* (Anura: Ranidae). *Regul. Pept.* (in press). (IF = 2,4)
6. Conlon, J.M., Kolodziejek, J., Nowotny, N., Leprince, J., Vaudry, H., Coquet, L., Jouenne, T. and King, J.D.: Characterization of antimicrobial peptides from the skin secretions of the Malaysian frogs, *Odorrana hosii* and *Hylarana picturata* (Anura: Ranidae). *Toxicon* (in press). (IF = 2,5)
7. Dejda, A., Jolivel, V., Bourgault, S., Seaborn, T., Fournier, A., Vaudry, H. and Vaudry, D.: Inhibitory effect of PACAP on caspase activity in neuronal apoptosis: a better understanding toward therapeutic applications in neurodegenerative diseases. *J. Mol. Neurosci.* (in press). (IF = 2,2)
8. Hwang, J.I., Kim, D.K., Kwon, H.B., Vaudry, H. and Seong, J.Y.: Phylogenetic history, pharmacological features, and signal transduction of neurotensin receptors in vertebrates. *Ann. N.Y. Acad. Sci.* (in press). (IF = 1,9)
9. Moons, J.S., Lee, Y.R., Oh, D.Y., Hwang, J.I., Lee, J.Y., Kim, J.I., Vaudry, H., Kwon, H.B. and Seong J.Y.: Molecular cloning of the bullfrog kisspeptin receptor GPR54 with high sensitivity to *Xenopus* kisspeptin. *Peptides* (in press). (IF = 2,7)
10. Mounien, L., Do-Régo, J.C., Bizet, P., Boutelet, I., Gourcerol, G., Fournier, A., Brabet, P., Costentin, J., Vaudry, H. and Jégou, S.: Pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide inhibits food intake in mice through activation of the hypothalamic melanocortin system. *Neuropsychopharmacology* (in press). (IF = 5,2)
11. Sakurai, N., Maruo, K., Haraguchi, S., Uno, Y., Oshima, Y., Tsutsui, K., Matsuda, Y., Do Rego, J.L., Pelletier, G., Vaudry, H. and Nakamura, M.: Immunohistochemical detection and biological activities of CYP17 (P450_{C17}) in the indifferent gonad of the frog *Rana rugosa*. *J. Steroid Biochem. Mol. Biol.* (in press). (IF = 2,7)

Thèses

1. RAVNI Aurélie : Etude fonctionnelle des gènes régulés au cours de la différenciation des cellules PC12 induite par le NGF et le PACAP. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neurosciences, 5 octobre 2007
Jury : S. Cavallaro, S. Gasman, V. Prévot, D. Vaudry, H. Vaudry et D. Vivien
2. GOURCEROL Guillaume: Modulation peptidergique au cours de la stimulation électrique gastrique. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neurosciences, 17 octobre 2007.
Jury: B. Bonaz, L. Bueno, P. Ducrotté, S. Jégou, A.M. Leroi, Y. Taché et H. Vaudry
3. GHZILI Hafida : Etude des gènes régulés par le pituitary adenylate cyclase-activating polypeptide (PACAP) au cours de la différenciation des cellules de phéochromocytome : rôle de l'inhibiteur of dna

binding 3 et de la sélénoprotéine T.

Jury : Y. Anouar, M.F. Bader, G. Eisenhofer, B. Gonzalez, P. Mariot et H. Vaudry

4. ALLAIS-BONNET Aurélie : Contribution à l'étude fonctionnelle des effets du PACAP sur l'ontogenèse du cervelet chez la souris in vivo. Doctorat d'Université – Biologie Cellulaire, option Neurosciences, 14 mai 2008.

Jury : D. Burel, P. Gaspar, B. Gonzalez, P. Gressens, J.P. Loeffler et H. Vaudry

Masters

1. BERRYER Martin : Etude des souris mutantes cérébelleuses Weaver au cours du vieillissement. Juillet 2008 (P).
2. DESCHAMPS Hélène : Etude du rôle du PACAP dans les processus développementaux dans un modèle de cellules souches embryonnaires in vitro. Juillet 2008 (P).
3. LECOINTRE Céline : Recherche des partenaires protéiques du récepteur de l'urotensine II impliqués dans le développement de tumeurs cérébrales astrocytaires. (B).
4. MANECKA Destiny-Love : Implication du facteur de transcription nuclear factor of kappa light chain enhancer in b-cell dans la différenciation des cellules de pheochromocytome de rat. (AB).
5. MARDARGENT Aurélie : Caractérisation d'un nouveau neuropeptide de type IFamide chez les mammifères. (P).
6. MOUEZA Nicolas : Etude de la région promotrice du gène de l'Ull dans les motoneurons sacrés. (P).
7. NEVEU Cindy : Etude pharmacochimique du 26RFa. (B).
8. TARDIVEL Nicolas : Régulation de la fonction corticotrope par l'Urotensine II (AB).

Livres

1. Vasoactive Intestinal Polypeptide and Pituitary Adenylate Cyclase-Activating Polypeptide. Edt, Hubert Vaudry. Special Issue of Peptides, Vol 28, 316 pages, 2007.
2. Urotensin II, Urotensin II-Related Peptide and their Receptors. Edt, Hubert Vaudry, Special Issue of Peptides, Vol. 29, 234 pages, 2008.
3. Kisspeptins. Edts, Hubert Vaudry and Manuel Tena Sempere, Special Issue of Peptides (in preparation).
4. Somatostatin, Cortistatin and their Receptors in Health and Disease. Edts, Justo Castaño, Maria M. Malagon, Hubert Vaudry, Ezio Ghigo, Luis de Lecea, and Rhonda D. Kineman, Special Issue of Molecular and Cellular Endocrinology, Vol 286, 277 pages, 2008.
5. Trends in Comparative Endocrinology and Neurobiology. Edts, Hubert Vaudry, Eric W. Roubos, Geoff Coast and Mauro Vallarino. Annals of the New York Academy of Sciences (in preparation).
6. Melanin-Concentrating Hormone. Edts, Hubert Vaudry and Jean-Louis Nahon, Special Issue of Peptides (in preparation).

Brevets

1. Conlon, J.M. et Vaudry, H. : La Ranakinine, une nouvelle tachykinine du cerveau des amphibiens, ligand sélectif des récepteurs NK1. Brevet déposé conjointement par le CNRS et l'Université Creighton, Omaha, Nebraska. Brevet déposé en Europe et aux Etats-Unis sous le n° 91-06759.
2. Beauvillain, J.C., Coulouarn, Y., Jégou, S., Lihmann, I. et Vaudry, H.: Urotensines II de mammifères et leurs applications. Brevet déposé par l'INSERM sous le n° 98-14914.
3. Lenkei, Z., Llorens-Cortès, C., Beaudet, A., Chartrel, N. et Vaudry, H.: Procédé de criblage utile pour identifier des ligands potentiels pour un récepteur capable de s'internaliser. Brevet déposé par l'INSERM sous le n° 99-00588.
4. Anouar, Y., Galas, L., Ghzili, H., Grumolato, L. et Vaudry, H.: Utilisation de produits dérivés de la sélénoprotéine T dans des applications liées à l'homéostasie calcique. Brevet déposé par l'Inserm sous le n° 04-291658.5.

5. IRCOF -UMR CNRS 6014 - ECOBS (Laboratoire de Chimie Organique et Biologie Structurale)

Localisation : Rouen

Source des informations : Isabelle Segalas-Milazzo

Site Web : <http://ircof.crihan.fr/ECOBS.htm>

Durant la période octobre 2007-octobre 2008, l'équipe RMN et Modélisation Moléculaire du Laboratoire de Chimie Organique et Biologie Structurale (LCOBS) de l'UMR CNRS 6014 comprenait 2 Professeurs, 3 Maîtres de Conférences, 4 Doctorants, 1 étudiant de Master Recherche, 1 étudiant de Master Professionnel qui utilisent ou ont utilisé quotidiennement la Modélisation Moléculaire dans leurs activités de recherche. Celles-ci portent principalement sur l'étude structurale de molécules organiques et bio-organiques en solution et les logiciels mis à disposition par le CRIHAN sont utilisés pour les tâches suivantes:

- le traitement et analyse de spectres RMN à l'aide du logiciel FELIX (Accelrys)
- le calcul de structures sous contraintes RMN à l'aide du logiciel CNX (Accelrys)
- l'analyse des structures obtenues à l'aide des logiciels CNX (Accelrys) et SYBYL (Tripos)
- la représentation par les logiciels CERIOUS2 (Accelrys) et SYBYL (Tripos) des interactions RMN sur les modèles obtenus dans les études structurales en chimie organique
- des calculs théoriques semi-empiriques à l'aide du logiciel Jaguar (Schrödinger) et représentation par le logiciel MOLDEN

Thèse soutenue au laboratoire :

1. Romain THUAU (thèse soutenue le 07 juillet 2008)
« Production et analyse structurale d'un domaine potentiel de liaison à la chitine identifié chez une chitinase de l'huître Creuse *Crassostrea gigas* & Etude structurale de trois neuropeptides humains RFamides NPFF, RFRP1 et RFRP3 par RMN et Modélisation Moléculaire. »

Thèse soutenue en co-direction :

1. Stéphane BOIVIN (thèse soutenue le 18 avril 2008)
« Etudes structurales du récepteur de l'urotensine II ».
Collaboration avec le Laboratoire d'Etudes Moléculaires et Pharmacologiques des Peptides, Institut National de la Recherche Scientifique – Institut Armand Frappier (Université du Québec, CANADA)

Thèses en cours :

1. Pedro LAMEIRAS (soutenance prévue le 05 décembre 2008)
« Etude des relations structure-activité de peptides μ -opioïdes endogènes (endomorphine-2, morphiceptine) et ses dérivés ».
2. Baptiste LECACHEY (soutenance prévue en 2009)
« Caractérisation structurale par RMN multinoyaux $^1\text{H}/^6\text{Li}/^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$ d'agrégats lithiés impliquant des amidures chiraux ».

En co-direction :

1. Abdussalam SUGHIR (soutenance prévue en 2009)
« Etude par RMN et modélisation moléculaire du complexe tiagabine/HP β -CD ».
Collaboration avec le Laboratoire de galénique, Faculté de pharmacie de l'Université de Rouen.

Publications

1. Three-dimensional model of the human urotensin-II receptor: docking of human urotensin-II and nonpeptide antagonists in the binding site and comparison with an antagonist pharmacophore model. E. LESCOT, J. SOPKOVA-DE OLIVEIRA SANTOS, N. COLLOC'H, J. RODRIGO, I. SEGALAS-MILAZZO, R. BUREAU & S. RAULT
Proteins (2008), 73, 173-184.
2. Solution structure of urotensin-II receptor extracellular loop III and characterization of its interaction with urotensin-II.
S. BOIVIN, I. SEGALAS-MILAZZO, L. GUILHAUDIS, H. OULYADI, A. FOURNIER & D. DAVOUST
Peptides (2008), 29, 700-710.

3. Structure-activity relationships of urotensin II and URP.
J. LEPRINCE, D. CHATENET, C. DUBESSY, A. FOURNIER, B. PFEIFFER, E. SCALBERT, P. RENARD, P. PACAUD, H. OULYADI, I. SÉGALAS-MILAZZO, L. GUILHAUDIS, D. DAVOUST, M. C. TONON & H. VAUDRY
Peptides (2008), 29, 658-673.
4. Solution structure of the region 51-160 of human KIN17 reveals an atypical Winged Helix domain.
L. CARLIER, J. COUPRIE, A. LE MAIRE, L. GUILHAUDIS, I. MILAZZO, M. GONDRY, D. DAVOUST, B. GILQUIN & S. ZINN-JUSTIN
Protein Science (2007), 16, 2750-2755.
5. Origin of the Detrimental Effect of Lithium Halides on an Enantioselective Nucleophilic Alkylation of Aldehydes.
F. PATE, N. DUGUET, H. OULYADI, A. HARRISSON-MARCHAND, C. FRESSIGNE, J.Y VALNOT, M.C. LASNE & J. MADDALUNO.
Journal of Organic Chemistry (2007), 72, 6982-6991.

Communications

1. NMR structure of micelle-bound 26RFa and 43RFa, two peptide ligands of the GPR103 receptor.
I. SEGALAS-MILAZZO, L. GUILHAUDIS, I. BUCHET, N. CHARTREL, J. LEPRINCE, H. VAUDRY & D. DAVOUST
30th European Peptide Symposium (Helsinki, Finlande, 31 août-5 septembre 2008).
2. Structure-activity relationship study of Kiss-10: identification of an antagonist of GPR54.
J. LEPRINCE, E. GUTIERREZ-PASCUAL, A. J. MARTINEZ-FUENTES, L. GUITAYA, L. PINTILLA, L. GUILHAUDIS, I. SEGALAS-MILAZZO, M.-C. TONON, M. TENA-SEMPERE, M. MALAGON, J. P. CASTANO & H. VAUDRY
30th European Peptide Symposium (Helsinki, Finlande, 31 août-5 septembre 2008).
3. Structural study on human neuropeptide FF
L. GUILHAUDIS, I. SEGALAS-MILAZZO, R. THUAU, N. CHARTREL & D. DAVOUST
30th European Peptide Symposium (Helsinki, Finlande, 31 août-5 septembre 2008).
4. Synthesis and biological activity of a series of azab3-pseudopeptides related to 26RFa, the endogenous ligand of GPR103.
O. LE MAREC, C. NEVEU, O. TASSEAU, L. GUILHAUDIS, I. SEGALAS-MILAZZO, M. TENA-SEMPERE, M.-C. TONON, M. BAUDY-FLOCH, H. VAUDRY & J. LEPRINCE
30th European Peptide Symposium (Helsinki, Finlande, 31 août-5 septembre 2008).
5. Structure-Activity relationship studies of selective μ -opioid peptides by ¹H-NMR spectroscopy and molecular modelling: endomorphin-2/morphiceptin and their analogs.
P. LAMEIRAS
Journée atelier thématique du réseau CRUNCH "Chimie pour l'Analyse" (Rouen, France, 18 juin 2008).
6. NMR characterization of interactions between urotensin-II and extracellular loops of UT receptor.
I. Ségalas-Milazzo, S. Boivin, L. Guilhaudis, H. Oulyadi, G. Coadou, L. Carlier, A. Fournier & D. Davoust.
Meeting: two days with GPCRs in Montpellier (La Grande Motte, France, 12 - 13 juin 2008).
7. Structure-Activity relationship studies of selective μ -opioid receptor endomorphin-2 and morphiceptin analogs, by ¹H-NMR spectroscopy and molecular calculation.
P. LAMEIRAS, J. GROSJEAN, G. COADOU, J.-C. DO-REGO, J. FICHNA, A. JANECK, J. COSTENTIN & H. OULYADI
Meeting: two days with GPCRs in Montpellier (La Grande Motte, France, 12 - 13 juin 2008).
8. Etude de la relation structure-activité d'analogues μ -opioides de l'endomorphine-2 et de la morphiceptine.
P. LAMEIRAS, J. GROSJEAN, G. COADOU, J.-C. DO-REGO, J. FICHNA, J. COSTENTIN, A. JANECKA & H. OULYADI
14ème Journée Scientifique de l'IFMRP (Evreux, France, 6 juin 2008).
9. Développement d'agonistes stables du récepteur PAC1: études structure-fonction du neuropeptide PACAP.
S. BOURGAULT, D. VAUDRY, A. DEJDA, J.-C. DO-REGO, B. BOTIA, E. RAOULT, K. TURCOTTE, L. GUILHAUDIS, I. SEGALAS-MILAZZO, D. DAVOUST, J. COSTENTIN, H. VAUDRY & A. FOURNIER
14ème Journée Scientifique de l'IFMRP (Evreux, France, 6 juin 2008).

10. Study of improvement of stability of tiagabine HCl by complexation with 2-Hydroxypropyl cyclodextrin
A. SUGHIR, I. YOUM, P. LAMEIRAS, G. COADOU, M. HUBERT, M. SKIBA, M. LAHIANI-SKIBA & H. OULYADI
14th International Cyclodextrin Symposium (Kyoto, Japan 8 - 11 mai 2008)
11. Etude structurale du récepteur de l'urotensine-II et caractérisation du site de liaison.
L. Guilhaudis
Université Claude Bernard, Lyon, France, 22 février 2008.

Collaborations

1. Laboratoire de Neuroendocrinologie Cellulaire et Moléculaire, INSERM U413, Rouen
2. Laboratoire d'Etudes Moléculaires et Pharmacologiques des Peptides, INRS – Institut Armand Frappier, Montréal (CANADA)
3. Laboratoire de Biologie Structurale et Radiobiologie (LBSR), IBITEC, CEA, Saclay
4. Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie (CERMN), UPRES EA 4258, Caen
5. Laboratoire de Biologie et Biotechnologies Marines, UMR IFREMER, Caen
6. Laboratoire de galénique, UFR de médecine et pharmacie, Université de Rouen
7. Laboratoire de neuropsychopharmacologie expérimentale, UFR de médecine et pharmacie, Université de Rouen
8. Laboratoire de chimie biomoléculaire, Université de médecine de Lodz (POLOGNE)

1. LASOC (Laboratoire d'Analyse des Systèmes Organiques Complexes)

Localisation : Evreux

Source des informations : Nadine Mofaddel

Remarque

Nous avons utilisé la modélisation pour tenter de rationaliser les phénomènes observés en électrophorèse capillaire, ce qui n'a pas toujours été très probant.

Cependant nous en parlons légèrement dans une thèse :

Hour Krajian, Les Liquides Ioniques : nouveaux milieux pour les techniques électrocinétiques miniaturisées ? Applications, soutenue le 16 septembre 2008, à l'université de Rouen.
Cela va faire l'objet de 2 ou trois publications mais pour fin 2008.

2. UPRES EA 3233 IRCOF - SMS (Sciences et Méthodes Séparatives)

Localisation : Rouen

Source des informations : Samuel Petit

Site Web : http://www.univ-rouen.fr/LSMS/0/fiche_SGR__structure/

Remarque

Utilisation des logiciels Cerius² et Materials Studio (Accelrys), et SYBYL (Tripos) pour :

1. La description et l'analyse des structures cristallines
2. Les études de croissance cristalline et de prédiction de morphologie
3. L'analyse et la prédiction du polymorphisme
4. L'étude des mécanismes de désolvatation de cristaux organiques
5. L'analyse de la reconnaissance supramoléculaire et chirale.

Publications

1. Influence of ageing, grinding and preheating on the thermal behaviour of α -lactose monohydrate
S. Garnier, S. Petit, F. Mallet, M.-N. Petit, D. Lemarchand, S. Coste, J. Lefebvre, G. Coquerel
Int. J. Pharm., 2008, 361, 131-140
2. Study of the quaternary system (+) and (-)-5-phenyl-5-trifluoromethyl-imidazolidine-2,4-dione / (-)-1-phenyl-ethylamine / Ethanol at 20°C under atmospheric pressure
F. Querniard, J. Linol, Y. Cartigny, G. Coquerel
J. Therm. Anal. & Cal., 2007, 90 (2), 359-365
3. Role of structural and macrocrystalline factors in the desolvation behaviour of cortisone acetate solvates
S. Petit, F. Mallet, M.-N. Petit, G. Coquerel
J. Therm. Anal. & Cal., 2007, 90 (1), 39-47
4. Preferential crystallization in an unusual case of conglomerate with partial solid solutions
N. Wermester, E. Aubin, M. Pauchet, S. Coste, G. Coquerel
Tetrahedron: Asymmetry, 2007, 18, 821-831

Thèses

1. RENOUD Ludovic (Décembre 2007)
Directeur G. Coquerel
Study of atypical examples of the impact of chiral discrimination on the crystallization of organic molecules (thèse Européenne)
2. WACHARINE-ANTAR Saoussen (Mai 2008)
Directeur G. Coquerel
Etude du dédoublement des solvates de méthanol (\pm)-2,4-Dichlorophénylacétique-BM par cristallisation préférentielle

Communications

1. Can we elucidate Chiral Discrimination from Physical and Structural Characterizations? A case study with Host-Guest Complexes
A. Grandeury, S. Petit, G. Coquerel
PhandTA 8, Ascona (Suisse), Octobre 2007, abstract book p. 29
2. Crystal growth of (\pm)-2,4-dichlorophenylacetic acid-BM methanol solvates
S. Wacharine-Antar, M. Sanselme, S. Petit, G. Coquerel
BIWIC 15, Magdeburg (D), September 2008, Abstract book ISBN 978-3-8322-7505-1, p. 197-203
3. Mechanisms of dehydration and rehydration of ciclopirox olamine monohydrate
L. Renou, S. Coste, Y. Cartigny, M.-N. Petit, C. Vincent, J.-M. Schneider, G. Coquerel
ISIC 17 – CGOM 8, Maastricht, NL, Septembre 2008, Abstract book p. 307-314
4. Order/disorder transformations in solid state ciclopirox
C. Vincent, L. Renou, S. Coste, Y. Cartigny, M.-N. Petit, S. Petit, M. Sanselme, J.-M. Schneider, G. Coquerel
ISIC 17 – CGOM 8, Maastricht, NL, Septembre 2008, Abstract book p. 1599-1606

Collaborations

1. Pr. Géraldine Gouhier, équipe LFAOC, IRCOF, Université de Rouen, UMR 6014
2. Dr. Christophe Meyer, Centre de Recherches, Société Johnson&Johnson, Val-de-Reuil