



Normandie Université

Pôle Régional de Modélisation Numérique

Référence des publications des laboratoires utilisateurs pour l'année 2013

Référence du document : RA-PUBLIS-2013 - Révision 02 - Date de création : 22/12/2013

Validation : 06/03/2014 (HP)

Documents référencés : N/A

Résumé : Liste des publications des laboratoires utilisateurs du PRMN (service de calcul intensif) pour l'année 2013.

Révisions :

- 01 : version initiale (MSC-BC)
- 02 : corrections mineures (HP)

Accessibilité

ComUE Normandie Université : **OUI**

EXTÉRIEURS : **OUI**

RESTREINT : **NON**

Table des matières

Introduction	6
Projets scientifiques expertisés	7
Projet : 1998007	7
Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique	
Projet : 1998022	7
Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles	
Projet : 1998053	8
Intitulé : Etude des interactions moléculaires par une approche parallèle de chimie quantique et de mécanique polarisable	
Projet : 2002003	9
Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses	
Projet : 2003008	10
Intitulé : Suivi d'interfaces pour une méthode Level Set : application à l'atomisation de spray	
Projet : 2003013	10
Intitulé : Développements et applications des méthodes particulières	
Projet : 2004004	11
Intitulé : Influence du partenaire achiral sur la stabilité et la structure d'agrégats mixtes incluant des amidures de lithium de 3-aminopyrrolidines chirales.	
Projet : 2005003	11
Intitulé : Propriétés magnétiques d'une assemblée de "nanograins".	
Projet : 2005004	12
Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands	
Projet : 2005010	13
Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organosoufrés.	
Projet : 2005013	14
Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.	
Projet : 2005014	15
Intitulé : Étude des cinétiques des transformations de phases dans les alliages modèles des aciers	
Projet : 2006003	15
Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.	
Projet : 2006007	16
Intitulé : Cinétique de précipitation dans les alliages Al-Zr-Sc	
Projet : 2006011	16
Intitulé : Simulation d'écoulements liquide-gaz : DNS et LES	
Projet : 2006013	17

Intitulé : Etude par DFT du mécanisme de la cooligomérisation 2:1 d'Alcyne et d'alcènes catalysée par les complexes du cobalt	
Projet : 2007001	18
Intitulé : Détermination de données thermocinétiques par des méthodes de chimie quantique pour des espèces et des réactions clés impliquées dans l'environnement	
Projet : 2007013	19
Intitulé : Etude ab-initio de systèmes fortement corrélés	
Projet : 2008001	19
Intitulé : Étude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe ₂ /YFe ₂ .	
Projet : 2008005	20
Intitulé : Etude du processus d'agrégation dans les solutions aqueuses : Analyse par simulation de dynamique moléculaire classique et quantique	
Projet : 2008013	21
Intitulé : Simulations d'écoulements fluides réactifs - Interactions flamme/paroi, combustion petite échelle, combustion stratifiée	
Projet : 2009007	22
Intitulé : Propriétés structurales et électroniques des Interfaces AlN/GaN	
Projet : 2010006	22
Intitulé : Couplage d'échange dans les bicouches ferromagnétique/antiferromagnétique	
Projet : 2010010	22
Intitulé : Topologie quantique	
Projet : 2011001	23
Intitulé : Etude théorique du mécanisme d'une réaction de carbométallation intramoléculaire	
Projet : 2011002	24
Intitulé : Simulation numérique en hydrodynamique navale par méthode SPH	
Projet : 2011003	24
Intitulé : Approche théorique de nouveaux fluorophores pour les sciences de la vie	
Projet : 2011005	24
Intitulé : Etude sur modèles chimiques de réactions de Friedel-Crafts appliquée à la synthèse de polyaryléthercétones	
Projet : 2011007	25
Intitulé : Modélisation de systèmes nanostructurés : nanoparticules magnétiques, conducteurs ioniques	
Projet : 2011008	25
Intitulé : Etude ab-initio du processus de bio-minéralisation du carbonate de calcium	
Projet : 2011010	26
Intitulé : Calcul des propriétés mécaniques par homogénéisation stochastique des matrices renforcées par des NTC (Nano Tube de Carbone) dans le cadre de l'élasticité tridimensionnelle dans le cadre d'une approche par décomposition de domaine	

Projet : 2011012	26
Intitulé : Interaction Onde Matière dans des nanostructures composites de type isolant/semiconducteur/terre rare ou isolant/métal. Applications aux guides d'ondes amplificateurs et au domaine de la plasmonique.	
Projet : 2011101	27
Intitulé : Exploration de l'espace conformationnel des interfaces protéines-protéines	
Projet : 2012001	27
Intitulé : Calcul des propriétés mécaniques par homogénéisation stochastique des matrices renforcées par des NTC (Nano Tube de Carbone) dans le cadre de l'élasticité tridimensionnelle dans le cadre d'une approche par décomposition de domaine.	
Projet : 2012003	28
Intitulé : Simulation Monte Carlo de la croissance de nano colonne dans le système GeMn - Comparaison à l'expérience à l'échelle atomique.	
Projet : 2012004	28
Intitulé : Modélisation d systèmes biologiques complexes, des metalloprotéines	
Projet : 2012006	28
Intitulé : Simulation hautes-fidélités de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe	
Projet : 2012007	29
Intitulé : Propriétés de multicouches Co-Pt	
Projet : 2012008	30
Intitulé : Modélisation des joints de grains sous irradiation	
Projet : 2012016	30
Intitulé : Classification de molécules	
Projet : 2013003	31
Intitulé : Optimisation des écoulements d'air et du transfert thermique autour d'un double embrayage de transmission automobile par la modélisation.	
Projet : 2013004	31
Intitulé : Diffusion et piégeage de l'hydrogène dans le nickel par calculs ab initio	
Projet : 2013005	31
Intitulé : Agrégats d'acide phosphorique pour l'étalonnage en spectrométrie de masse couplée à la mobilité ionique	
Projet : 2013006	32
Intitulé : Imagerie mathématique et analyse numérique	
Projet : 2013007	33
Intitulé : Etude théorique du mécanisme d'électrodéposition d'alliages Cobalt-Nickel : modélisation et relation structure-propriétés par approche multi échelle	
Projet : 2013008	33
Intitulé : Etude par simulations numériques de la transition de phase austénite-ferrite : application aux Pipelines	
Projet : 2013009	33

Intitulé : Simulation de séparation en masse de haute résolution avec un plasma d'ions dans un piège de Penning	
Projet : 2013013	34
Intitulé : Mésochallenge - équipe Abdellah	
Projet : 2013014	34
Intitulé : Simulations d'incendie	
Projet : 2013016	34
Intitulé : Simulation par dynamique moléculaire de la croissance des précurseurs et agrégats produits par pulvérisation.	
Projet : 2013017	34
Intitulé : Simulation de Protéines de la Matrice Extra-Cellulaire par Dynamique Moléculaire.	
Projet : 2013019	35
Intitulé : Modélisation de la pollution atmosphérique : couplage des échelles locales et régionales - modèles SIRANE 2.0 et CHIMERE.	
Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire	36
RNMM : SMS EA 3233	36
Intitulé : Sciences et Méthodes Séparatives	
RNMM : Plateforme PISSARO	37
Intitulé : Plateforme Instrumentale en Sciences Séparatives et Analytiques de Rouen	
RNMM : CERMN	40
Intitulé : Centre d'Etudes et de Recherche sur le Médicament de Normandie	
RNMM : UMR 6014 COBRA	41
Intitulé : Equipe Groupe Matériaux organiques	
RNMM : UMR 6014 COBRA	41
Intitulé : Equipe Analyse et Modélisation	

A. Introduction

Ce document s'inscrit en annexe du volet technique du rapport d'activités du CRIHAN pour l'année 2013. Il regroupe les travaux effectués par les laboratoires utilisateurs des ressources mises à disposition par le CRIHAN dans le cadre du Pôle Régional de Modélisation Numérique.

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

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

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

B. Projets scientifiques expertisés

1. Projet : 1998007

Intitulé : Modélisation de dispositifs non linéaires en supraconductivité et optique

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Jean-Guy CAPUTO

Laboratoire : LMI (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites 2013 : 121

Publications de rang A

1. "Radial sine-Gordon kinks as sources of fast breathers", J.-G. Caputo and M. P. Soerensen, Phys. Rev. E 88, 022915, (2013). <http://arxiv.org/abs/1303.4425>
2. "Oscillations of simple networks", J.-G. Caputo, A. Knippel and E. Simo, J. Phys. A: Math. Theor. 46, 035100 (2013).
3. "Mode dynamics in nonuniform waveguide arrays: a Graph Laplacian approach", A. Aceves and J.-G. Caputo, submitted to J. Optics, <http://arxiv.org/abs/1304.7035>
4. "Screening magnetic fields by a superconducting disk: a simple model", J.-G. Caputo, L. Gozzelino, F. Laviano, G. Ghigo, R. Gerbaldo, J. Noudem, Y. Thimont, P. Bernstein, accepted to J. Appl. Phys. <http://arxiv.org/abs/1308.2204>.

Communications dans des congrès internationaux

1. The Eight IMACS International Conference on Nonlinear Evolution Equations and Wave Phenomena: Computation and Theory, University of Georgia, March 25-28, 2013, Présentation de JG Caputo « oscillations in networks ».
2. Nonlinear Schrodinger workshop, Heraklio, Grece, May 21 2013, Présentation de JG Caputo « Fourier mode dynamics for NLS and synchronization in fiber lasers arrays ».

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Université de Savoie Chambéry, UMR 5127 CNRS LAMA, Denys Dutykh, Propagation of sine-Gordon kinks in Y junctions.
- Universidad Autonoma de Mexico, G. Cruz-Pacheco and P. Panayotaros, Propagation of epidemics on a network.
- INSA de Rouen : Arnaud Knippel et Lionel Loukitch.
- ENS Cachan : Benoit Sarels.

2. Projet : 1998022

Intitulé : Ecoulements turbulents compressibles

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

Laboratoire : LMFN - CORIA (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 3 244 981

Publications de rang A

1. Chinnayya, A., Hadjadj, A., Ngomo, D. Computational study of detonation-wave propagation in narrow channels. Physics of Fluids, 25, 036101 (2013).
2. Britan, A., Shapiro, H., Liverts, M., Ben-Dor, G., Chinnayya, A., Hadjadj, A. Macro-mechanical modeling of blast-wave mitigation in foams. Part I : review of available experiments and models. Shock Waves, 23(1): 5-23 (2013).
3. Del Prete, E., Chinnayya, A., Domergue, L., Hadjadj, A., Haas, J.-F. Blast wave mitigation by dry aqueous foams. Shock Waves, 23(1): 39-53 (2013).

4. Chaudhuri, A., Hadjadj, A., Sadot, O., Ben-Dor, G. Numerical study of shock-wave mitigation through matrices of solid obstacles. *Shock Waves*, 23(1): 91-101 (2013).
5. Hadjadj, A., Sadot. Shock and Blast Waves Mitigation. *Shock Waves*, 23(1): 1-4 (2013).

Communications dans des congrès internationaux

1. Sow, A., Chinnayya, A., Hadjadj, A. Effect of friction and heat losses on the mean structure of one-dimensional detonations. *Proceedings of the 8th Symposium on Numerical Analysis of Fluid Flow and Heat Transfer*, 21-27 Sept. 2013, Rhodes, Greece.
2. Del Prete, E., Counilh, D., Rambert, N., Haas, J.-F., Chinnayya, A. Hadjadj, A. Numerical modelling of shock wave propagation in a shock tube filled with aqueous foam. *Proceedings of the 29th International Symposium on Shock Waves*, July 14-19, 2013 Madison, USA.
3. Jourdan, G., Mariani, C., Houas, L., Del Prete, E., Chinnayya, A. Hadjadj, A., Haas, J.-F., Rambert, N., Counilh, D., Faure, S. Experimental investigation of shock-wave propagation in aqueous foam. *Proceedings of the 29th International Symposium on Shock Waves*, July 14-19, 2013 Madison, USA.
4. Chaudhuri, A. Hadjadj, A., Friedrich, R. Numerical Investigations of Transient Nozzle Flow Separation. *Proceedings of the Sonderforschungsbereich/Transregio 40 – Proceedings of the Summer Program*, Technical University of Munich, Germany, July 2013.

Communications dans des congrès nationaux

1. Taguelmimt, N., Danaila, L., Hadjadj, A. Effets des variations de viscosité dans un écoulement de couche de mélange temporelle. *GDR Turbulence*, École supérieure de physique et de chimie industrielles Paris (4-5 juin 2013).

Thèses en cours sur le projet

- Vineet Soni (2013-2016). Complex Multiscal and multiphysics flow simulations.
- Arthur Piquet (2013-2016). DNS and LES of Nozzle Flow instabilities.
- Alexandre Goerges-Picozapolt (2011-2014). Numerical simulation of transient nozzle flows.
- Nouredine Taguelmimt (2011-2014). Numerical simulation of variable density flows.
- Aliou Sow (2011-2014). Numerical simulation of micro-detonation flows.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Ecole Centrale Paris
- Laboratoire Jean Laray, Université Nantes

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

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Nohad GRESH

Laboratoire : LPMS / FRE 2463 CNRS (PARIS)

Heures.CPU produites 2013 : 172 371

Publications de rang A

1. Towards accurate solvation dynamics of lanthanides and actinides in water using polarizable force fields: from gas phase energetics to hydration free energies. A. Marjolin, C. Gourlaouen, C. Clavaguéra, P. Ren, J. Wu, N. Gresh, J.-P. Dognon, J.-P. Piquemal. *Theoret. Chem. Acc.*, 2012, 131, 1198-1212.
2. Could an anisotropic molecular mechanics/dynamics potential account for sigma hole effects in the complexes of halogenated compounds? K. El Hage, J. P. Piquemal, Z. Hobaika, R. G. Maroun, N. Gresh, J. Comput. Chem. 2013, 34, 1125-1135.
3. Further refinements of next-generation force fields. Nonempirical localization of off-centered points in molecules. R. Chaudret, N. Gresh, G. Andres Cisneros, A. Scemama, J.-P. Piquemal. *Can. J. Chem.* 2013, 91, 1-8. [dx.doi.org/10.1139/cjc-2012-0547](https://doi.org/10.1139/cjc-2012-0547).
4. Conformational analysis of a polypolarization, and multipole transferability. conjugated protein-binding ligand by joint quantum chemistry and polarizable molecular mechanics. Addressing the issues of

anisotropy, conjugation, polarization, and multipole transferability. E. Goldwaser, B. de Courcy, R. Hadj-Slimane, J.-P. Piquemal, N. Gresh. J. Chem. Info. Mod., soumis.

5. A supervised fitting approach to force-field parametrization with application to the SIBFA polarizable force-field. M. Devereux, N. Gresh, J.-P. Piquemal, M. Meuwly, en préparation.

4. **Projet : 2002003**

Intitulé : Propagation de pulses femtosecondes dans des milieux multidiffusifs denses

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Claude ROZE

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

Heures.CPU produites 2013 : 52 679

Publications de rang A

1. Numerical simulation of primary atomization: interaction with experimental analysis, A. Berlemont, J. B. Blaisot, Z. Bouali, J. Cousin, P. Desjonqueres, M. Doring, C. Dumouchel, S. Idlahcen, N. Leboucher, K. Lounnaci, T. M'énard, C. Rozé, D. Sedarsky, & G. Vaudor, Atomization and Sprays, DOI: 10.1615/AtomizSpr.2013007525.
2. Numerical investigation of the possibility to determine the primary particle size of fractal aggregates by measuring light depolarization, A. Bescond, J. Yon, T. Girasole, C. Jouen, C. Rozé, A. Coppalle. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 126, 130-139.
3. Computation of Radiation Pressure Force on Arbitrary Shaped Homogenous Particles by MLFMA, M. Yang, K. F. Ren, M. Gou and X. Sheng, Optics Letters 38(11):1784-1786, 2013

Communications dans des congrès internationaux

1. Bescond, J. Yon et C. Rozé, "Virtual Generation of realistic soot particles : Impact to their optical properties", ELS, Lille (France), 17-21/06/2013.
2. J. Yon, F. Liu, A. Bescond, C. Caumont, C. Rozé, F.X. Ouf et A. Coppalle, "Evaluation of the role played by multiple scattering on the radiative properties of soot fractal aggregates", EAC, Prague, Rep. Tchèque, 2-6/09/2013.
3. M. Yang, K. F. Ren and X. Sheng, "Computation of Radiation Pressure Force on Arbitrary Shaped Homogenous Particles by the Multilevel Fast Multipole Algorithm", Electromagnetics and Lights Scattering (ELS XIV), oral presentation, Lille (France), June 16-21, 2013

Communications dans des congrès nationaux

1. J. Yon, A. Bescond, C. Rozé, A. Coppalle et F.X. Ouf, "Méthode numérique pour la génération de particules de suie réalistes : Impact sur les propriétés morphologiques et optiques", CFA, Paris, 23-24/01/13.

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

1. Chloé Caumont-Prim, directeur de thèse K-F Ren, 01/12/2009 – 15/01/2013 (date de soutenance). «Détermination de la distribution de taille des nanoparticules de suie par analyse du spectre d'extinction et de diffusion angulaire de la lumière»

Thèses en cours sur le projet

1. Harsh Purwar. Etude des jets haute pression par imagerie balistique.
2. Alexandre Bescond, Développement de diagnostics optiques pour la caractérisation des émissions particulières aéronautiques et l'étude de leur réactivité.
3. Minglin YANG, Calcul rapide de diffusion de la lumière par des objets de forme complexe.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- NRC (Canada) : F. Liu
- Xidian University : Xiang'e HAN et Renxian LI
- Beijing Institut of Technology : Xinqing SHENG

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

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

Porteur : Alain BERLEMONT

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

Heures.CPU produites 2013 : 736 177

Publications de rang A

1. Alain Berlemont, Jean Baptiste Blaisot, Zakaria Bouali, Jean Cousin, Philippe Desjonqueres, Mathieu Doring, Christophe Dumouchel, Said Idlahcen, Nicolas Leboucher, Kamel Lounnaci, Thibaut Ménard, Claude Rozé, David Sedarsky, Geoffroy Vaudor, Numerical simulation of primary atomization: Interaction with experimental analysis, *Atomization and Sprays*, DOI: 10.1615/AtomizSpr.2013007525
2. F. X. Demoulin, J. Reveillon, B. Duret, Z. Bouali, P. Desjonqueres, T. Menard Using Direct Numerical Simulation to improve primary break-up modeling *Atomization and Sprays* DOI: 10.1615/AtomizSpr.2013007439
3. W. Aniszewski, T. Menard, M. Marek, Volume of Fluid (VOF) type advection methods in two-phase flows: submitted to *Computers and Fluids*, 2013/2014

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Geoffroy Vaudor, 2011-2014, « Atomisation assistée par un cisaillement de l'écoulement gazeux : développement et validation ».

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Grégory PINON

Laboratoire : LMPG EA 2255 (Le Havre)

Heures.CPU produites 2013 : 27 208

Publications de rang A

1. Paul Mycek, Benoît Gaurier, Grégory Germain, Grégory Pinon, and Elie Rivoalen. Numerical and experimental study of the interaction between two marine current turbines. *International Journal of Marine Energy*, 1(0) :70 – 83, 2013.
2. Paul Mycek, Grégory Pinon, Grégory Germain, and Elie Rivoalen. A self-regularising dvm-pse method for the modelling of diffusion in particle methods. *Comptes Rendus Mécanique*, 341(9–10) :709 – 714, 2013.
3. Paul Mycek, Benoît Gaurier, Grégory Germain, Corentin Lothodé, Grégory Pinon, and Elie Rivoalen. Caractérisation numérique et expérimentale des interactions entre deux hydroliennes. *Revue Paralia*, 6 : 2.1 – 2.12, 2013.
4. P. Mycek, B. Gaurier, G. Germain, G. Pinon, and E. Rivoalen. An experimental study of the turbulence intensity influence on the performance and wake of marine current turbines : Part I - a single turbine. Accepted with minor revision to *Renewable Energy*, 2013.
5. P. Mycek, B. Gaurier, G. Germain, G. Pinon, and E. Rivoalen. An experimental study of the turbulence intensity influence on the performance and wake of marine current turbines : Part II - elementary interactions of two turbines. Accepted with minor revision to *Renewable Energy*, 2013.

Communications dans des congrès internationaux

1. Paul Mycek, Benoît Gaurier, Grégory Germain, Jean-Valéry Facq, Thomas Bacchetti, Grégory Pinon, and Elie Rivoalen. Characterisation of the interactions between horizontal axis turbines aligned with the flow. In 10th European Wave and Tidal Energy Conference (EWTEC

Communications dans des congrès nationaux

1. Paul Mycek, Benoît Gaurier, Grégory Germain, Jean-Valéry Facq, Thomas Bachetti, Grégory Pinon, and Élie Rivoalen. Étude des interactions entre deux hydroliennes à axe horizontal alignées avec l'écoulement. In 21ème Congrès Français de Mécanique, août 2013. Bordeaux, France.
2. Xuezhou Z. Lu, Jean-Marc Cherfils, Grégory Pinon, Elie Rivoalen, and Jérôme Brossard. Simulations numériques de l'impact de la houle sur une paroi verticale par la méthode sph. In 21ème Congrès Français de Mécanique, août 2013. Bordeaux, France.
3. N. Abcha, A.C. Bennis, J. Brossard, D. Conley, E. Ellis, A. Ezersky, D. Greaves, G. Iglesias, K. Littlewood, V. Magar, J. Miles, D. Mouaze, G. Perret, G. Pinon, and D. Simmonds. OFELIA, Offshore Foundations' Environmental Impact Assessment. In 21ème Congrès Français de Mécanique, août 2013. Bordeaux, France.

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

1. Paul Mycek – Soutenue le 3 décembre 2013 - Etude numérique et expérimentale du comportement d'hydroliennes. Thèse co-financée Région Haute Normandie / IFREMER

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Jacques MADDALUNO

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites 2013 : 129 234

Publications de rang A

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

Communications dans des congrès internationaux

1. « Enantioselective catalysis with alkyl lithium reagents », Conférence à la Ludwig Maximilians Universität de Munich (Pr Paul Knochel), Munchen (Allemagne), 16 avril 2013

Communications dans des congrès nationaux

1. Enantioselective catalysis with alkyl lithium reagents, Prix 2012 de la Division de Chimie Organique de la SCF, Journées de Chimie Organique de la Société Chimique de France, ENSC Paris, 26 mars 2013.

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

- « Addition vs déprotonation : une étude théorique DFT des interactions entre un composé carbonyle et un organolithien » J. Marchois nov.2013.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Yves Gimbert : CNRS Université Joseph Fournier Grenoble
- Denis Lesage : université P & M Curie (Paris VI)

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

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

Porteur : Denis LEDUE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 14 708

Publications de rang A

1. "Magnetic relaxation of interacting ferromagnetic nanoclusters: a Monte Carlo study" D. Brinis, A. Laggoun, D. Ledue, R. Patte, soumise à la revue Journal of Physics D :Applied Physics.

Communications dans des congrès internationaux

1. Workshop « Nanoalloys as advanced materials: From structure to properties and applications » (7-9/04/2013, Lyon) : "Magnetic relaxation of interacting ferromagnetic nanoclusters: a Monte Carlo study" D. Ledue, D. Brinis, A. Laggoun, R. Patte

Thèses en cours sur le projet

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

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- H. Kachkachi, Responsable du groupe « Systèmes de Spins à l'Echelle Nanométrique (S2N) », Laboratoire PROMES - CNRS UPR8521, Université de Perpignan Via Domitia (UPVD).
- A. Laggoun, Co-directeur de thèse, Unité de Recherche MPE, Université de Boumerdes (Algérie).

9. Projet : 2005004**Intitulé : Modélisation moléculaire au service de la découverte de nouveaux ligands**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Jana SOPKOVA

Laboratoire : CERMN (Caen)

Heures.CPU produites 2013 : 137 953

Publications de rang A

1. Dubost E., Dumas N., Fossey C., Magnelli, R., Butt S., Ballandonne C., Caignard, D., Dulin F., Sopkova-de Oliveira Santos J., Millet P., Charnay Y., Rault S., Cailly, T., Fabis F. Synthesis and Structure-Affinity Relationships of Selective High-Affinity 5-HT₄ Receptor Antagonists: Application to the Design of New Potential Single Photon Emission Computed Tomography (SPECT) Tracers. J. Med. Chem., 2012, 55(22), 9693-9707.
2. Genest D., Rochais C, Lecoutey C., Sopkova-de Oliveira Santos J., Ballandonne C., Butt- Gueulle S., Legay R., Since M., and Patrick Dallemagne P. Design, Synthesis and Biological Evaluation of Novel Indano- and Thiaindano-Pyrazoles with Potential Interest in Alzheimer's Disease. Med. Chem. Commun., 2013, 4, 925-931.
3. Serge Perato, Jade Fogha, Muriel Sebban, Anne Sophie Voisin-Chiret, Jana Sopkova-de Oliveira Santos, Hassan Oulyadi, and Sylvain Rault. Conformation Control of Abiotic α - Helical Foldamers. J. Chem. Inf. Model., 2013, 53 (10), pp 2671-2680.

Communications dans des congrès internationaux

1. ConformationControlof α -helicalabioticFoldamers.FoghaJ.,PeratoS.,SebbanM.,Voisin-Chiret A.-S., Oulyadi H., Sopkova-de Oliveira Santos J., Rault S. Paris foldamers 2013 symposium, 10-12 Avril 2013, Paris, France.
2. Conformationalstudyofthehumanurotensin-IlandUII-relatedpeptide.Sopkova-de Oliveira Santos J., Lepailleur A., Milazzo-Segalas I., and Bureau R. Paris foldamers 2013 symposium, 10-12 Avril 2013, Paris, France.

Communications dans des congrès nationaux

1. Inhibitors Design of Mcl-1 and BH3-only Interactions. Fogha J., Perato S., Voisin-Chiret A.- S, Rault S., Bureau R. and Sopkova-de Oliveira Santos J. XVIIIème congrès du GGMM, 21-23 mai 2013, Oléron, France.
2. Structuralcharacterisationsofoligopyridylfoldamers,a-helixmimetics.Sopkova-de Oliveira Santos J., Burzicky G., Voisin-Chiret A. S., Oulyadi H., Bureau R. and Rault S. XVIIIème congrès du GGMM, 21-23 mai 2013, Oléron, France.
3. Abiotic Foldamer Design based on Oligophenylpyridyl Scaffolds. Fogha J., Perato S., Sebban M., Voisin-Chiret A.-S., Oulyadi H., Sopkova-de Oliveira Santos J., Rault S. 6èmes Journées de la Société Française de Chémo-informatique, 10-11 Octobre 2013, Nancy, France.

4. Interactions between 8-Arg-Vasopressin and Arginine Vasopressin Receptor 2. Conformational analysis and docking studies. Delépée C., Sopkova-de Oliveira Santos J., Dulin F., Lepailleur A., Haensele E., Banting L., Clark T. and Bureau R. 6èmes Journées de la Société Française de Chémoinformatique, 10-11 Octobre 2013, Nancy, France.
5. Inhibitors Design of Mcl-1 and BH3-only Interactions. Fogha J., Perato S., Voisin-Chiret A.- S, Rault S., Bureau R. and Sopkova-de Oliveira Santos J. Journée de l'école doctorale, 12 Juillet 2013, Caen, France.
6. Analysis of mcl-1 and BH3-only proteins: A model for drugs discovery. Fogha J., Perato S., Voisin-Chiret A.-S, Rault S., Bureau R. and Sopkova-de Oliveira Santos J. Journée des Jeunes Chercheurs, 7-8 Février 2013, Paris, France.
7. Molecular basis of agonist docking in a human GPR103 homology model: site-directed mutagenesis and structure-activity relationship studies. Leprince J., Dulin F., Neveu C., Galas L., Lefranc B., Chuquet J., Vaudry D., Bureau R., Sopkova-de Oliveira Santos J., Vaudry H. 2nd Annual Meeting of the GDR RCPG-Physiomed, Illkirch, France, October 14-16 2013
8. Molecular basis of agonist docking in a GPR103 homology model by site-directed mutagenesis and SAR studies. Neveu C., Dulin F., Lefranc B., Galas L., Calbrix C., Gach K., Bureau R., Chuquet J., Boutin J. A., Vaudry H., Vaudry D., Sopkova de-Oliveira Santos J. and Leprince J. 18ème Congrès du GFPP, 26-31 Mai 2013, Sète 2013.

Thèses en cours sur le projet

- Jade Fogha - Projet émergence Région Basse Normandie (Oligopyridines, mimes d'hélice α).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Projet Régional Basse Normandie Emergence - porteur A. S. Voisin-Chiret
- CERMN (Prof S. Rault, Dr AS Voisin-Chiret, Dr M. Di Giorgi)
- BioTICLA Unit, Centre François Baclesse, EA4656, Caen (Dr L. Poulant)
- UMR 892 Inserm - 6299 CNRS Nantes (Dr P. Juin, Dr F. Gautier)
Projet interegge PeReNE – porteur D. Vaudry
- Unité INSERM U413, Rouen (Dr H. Vaudry, Dr J. Leprince)
- Unité INSERM U413, Rouen (Dr H. Castel)
- UMR 6014 CNRS, Rouen (Prof I. Ségalas-Milazzo, Dr L. Guilhaudis)
- Université de Portsmouth (Prof T. Clark)
- Université de Southampton (Prof J. W. Essex)
ANR Jeunes Chercheurs MALAD – porteur C. Rochais
- CERMN (Prof P. Dallemagne, Dr C. Rochais, Dr D. Karila)
- GMPc, Université de Caen Basse-Normandie (Prof M. Boulouard)

10. Projet : 2005010

Intitulé : Étude théorique de réactions chimiques intervenant dans la synthèse de composés organofluorés et organisoufrés.

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Eric HENON

Laboratoire : ICMR-UMR CNRS 7312 (Reims)

Heures.CPU produites 2013 : 11 358

Publications de rang A

1. A. Blondel, J. Langeron, S. Sayens, E. Hénon, M. Couderchet, E. Guillon, Molecular properties affecting the adsorption coefficient of phenylurea herbicides, Environ. Sci. Pollut. Res. 20 (2013) 6266–6281.
2. Cristina Morar, Carmen Sacalis, Pedro Lameiras, Albert Soran, Hassan Khartabil, Cyril Antheaume, Ioan Bratu, Oana Moldovan, Mircea Darabantu, Synthesis and stereochemistry of new 1,3-thiazolidine systems based on 2-amino-2-(mercaptomethyl)propane-1,3-diol: 4,4-bis(hydroxymethyl)-1,3-thiazolidines and c-5-hydroxymethyl-3-oxa-7-thia-r-1-azabicyclo[3.3.0]octanes, Tetrahedron, 69 (2013) 9966-9985.
3. Chantal Barberot, Jean-Charles Boisson, Stéphane Gérard, Hassan Khartabil, Eddy Thiriout, Gérald Monard, Eric Hénon, Optimisation d'une approche quantique d'amarrage moléculaire, 14ème

conférence informatique ROADEFF de la société Française de Recherche Opérationnelle et Aide à la Décision, Volume 1 (2013), UTT, France.

Communications dans des congrès internationaux

1. Laurent X., Renault N., Farce A., Bertin B., Speca S., Hénon E., and Chavatte P., 7th International Symposium on CD1d and NKT cells, Dynamic of CD1d-ligand complex: A way to get closer to the Th1/Th2 activation mechanism, Tours, France, September 13th-17th 2013.
2. J. El Houari, C. Barberot, J.C. Boisson, S. Gérard, H. Khartabil, E. Thirirot, G. Monard, E. Hénon, Non Covalent Interactions in Molecular Docking : a quantum approach using the AlgoGen 2.3 software, Topological Approaches to Intermolecular Interactions, Paris, 25-28 juin 2013.

Communications dans des congrès nationaux

1. C. Barberot, J.C., Boisson, S. Gérard, H. Khartabil, E. Thirirot, G. Monard, E. Hénon, "Non Covalent Interactions in Molecular Docking: a quantum approach using the AlgoGen 2.3 software", St Pierre d'Oléron, 21-23 mai 2013.

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

- C. Barberot - Université de Reims Champagne-Ardenne (2010-2013), " Conception orientée par modélisation moléculaire de molécules d'intérêt thérapeutique : exploitation du pharmacophore pyridazinone pour le traitement potentiel des maladies bronchopulmonaires ", soutenue le 6 décembre 2013 à Reims.

Thèses en cours sur le projet

- Xavier Laurent – Institut de Chimie Pharmaceutique Albert Lespagnol, EA 4481, Université Lille-Nord de France, "Conception, synthèse et évaluation biologique de nouveaux modulateurs d'activation des lymphocytes iNKT".

Stages de Master en 2013 sur le projet

- Jihane El Houari – Institut de Chimie Moléculaire de Reims (ICMR) - UMR CNRS 7312, Université Reims-Champagne-Ardenne, "Vers un nouvel outil d'étude de la reconnaissance hôte-ligand. Suite du développement d'un logiciel de docking quantique et mise en évidence d'une nouvelle fonction d'évaluation des interactions non covalentes : NCI".

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- M. Darabantu, Babes-Bolyai University, Department of Organic Chemistry, 11 Arany János st., 400028 Cluj-Napoca, Roumanie.
- X. Laurent, P. Chavatte, ICPAL: Institut de Chimie Pharmaceutique Albert Lespagnol, EA 4481, Université Lille-Nord de France, 3 Rue du Professeur Laguesse, BP13 83, 59006 Lille Cedex, France.
- Julia Contreras-Garcia, Université Pierre et Marie Curie, Laboratoire de Chimie Théorique, UMR CNRS 7616, Paris.
- Gérald Monard, UMR CNRS 7565, University of Lorraine, SRSMC, Boulevard des Aiguillettes, Vandoeuvre les Nancy 54506, France.
- P. Goekjian, Université de Lyon, Laboratoire Chimie Organique 2-Glycosciences, UMR 5246 ICBMS UCBL-CNRS - Bâtiment 308 Curien, CPE-Lyon - 43, Blvd du 11 Novembre 1918, 69622 Villeurbanne Cedex, France
- H. Khartabil, A. Haudrechy, S. Gérard, Université de Reims Champagne-Ardenne, BSMA, UMR CNRS 7312, Reims, France.
- J-C. Boisson, Université de Reims Champagne-Ardenne, CReSTIC, Reims, France.

11. Projet : 2005013

Intitulé : Étude théorique de la réactivité d'hétérocycles aromatiques en cycloaddition.

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Isabelle CHATAIGNER

Laboratoire : LFAOC - IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites 2013 : 22 784

Publications de rang A

1. H. Gérard, I. Chataigner J. Org. Chem. 2013, 78, 9233-9242.
2. S. Lee, S. Diab, P. Queval, M. Sebban, I. Chataigner,* S. R. Piettre* Chem. Eur. J. 2013, 19, 7181-7192

Communications dans des congrès internationaux

1. Short Oral Communication, ISCC-10, 23-26 septembre 2013, Kyoto (Japon) I. Chataigner.

Communications dans des congrès nationaux

1. GECO 54, 25-30 août 2013, Le Croisic (France).

Thèses en cours sur le projet

- Maxime Beuvin (3^{ème} année).
- Karine Pasturaud (1^{ère} année).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Pr. H. Gérard, LCT, UPMC.

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

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

Porteur : Cristelle PAREIGE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 797

Publications de rang A

1. Roussel M., Talbot E., Pareige C., Pratibha Nalini R., Gourbilleau F., Pareige P., Confined phase separation in SiOX nanometric thin layers, Applied Physics Letters, Volume 103, Issue 20, id. 203109 (2013) doi: 10.1063/1.4830375.

13. Projet : 2006003**Intitulé : Simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente.**

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

Porteur : Pascale DOMINGO

Laboratoire : LMFN - CORIA (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 2 539 965

Publications de rang A

1. X. Petit, G. Ribert, G. Lartigue, P. Domingo (2013) Large-eddy simulation of supercritical fluid injection, Journal of Super critical Flow, accepté
2. G. Ribert, P. Domingo, L.Vervisch (2013) A hybrid transported-tabulated strategy to downsize detailed chemistry for Large Eddy Simulation, Flow Turbulence and Combustion, accepté
3. B. Farcy, A. Abou-Taouk, L. Vervisch, P. Domingo, N. Perret (2013) Analysis of simplified chemistry for numerical modeling of Selective Non Catalytic Reduction DeNOx Process, Fuel accepté
4. M.Belhi, P. Domingo, P.Vervisch (2013) Modeling of the Effect of DC and AC Electric Fields on the Stability of a Lifted Diffusion Methane/Air Flame, Combustion Theory and Modelling, Volume 17, issue 3, pp 749-787

Communications dans des congrès internationaux

1. L. Bouheraoua, G. Ribert, P. Domingo, G. Lartigue (2013) Large Eddy Simulation of supersonic non-reactive and reactive flows with an Immersed Boundary Method., 5th Eucass Conference, Munich (Germany)
2. G. Lodier, P. Domingo, L. Vervisch (2013) Analyzing self-ignition in rapidly compressed turbulence, International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP-8)}, Poitiers, 28 - 30 August, 2013
3. B. Farcy, A. Abou-Taouk, L. Vervisch, P. Domingo, N. Perret (2013) Numerical modelling of selective non catalytic reduction DeNOx Process 6th European Combustion Meeting, Lund University, Sweden, 25-28 June.
4. X. Petit, G. Ribert, P. Domingo (2013) LES of LOx/CH4 mixing and combustion under supercritical conditions, 6th European Combustion Meeting, Lund University, Sweden, 25-28 June
5. G. Ribert, P. Domingo, L. Vervisch (2013) Hybrid Transported-Tabulated Strategy to Downsize Detailed Chemistry for Large Eddy Simulation , 6th European Combustion Meeting, Lund University, Sweden, 25-28 June
6. X. Petit, G. Ribert, P. Domingo (2013) LOx/CH4 Mixing and Combustion under Supercritical Conditions, 51st AIAA ASM Conference, Grapevine (Dallas/Ft. Worth Region), Texas (USA), 2013, AIAA-2013-713
7. G. Ribert, P. Domingo, L. Vervisch (2013) An hybrid transported- tabulated strategy to downsize detailed chemistry for Direct Numerical Simulation, AIAA-2013-0291, 51st AIAA Aerospace Sciences Meeting, Grapevine, Texas, USA, January 7-10
8. G. Ribert, P. Domingo, L. Vervisch (2013) Hybrid Transported-Tabulated Strategy to Downsize Detailed Chemistry for Large Eddy Simulation 14th International Conference on Numerical Combustion, San Antonio, Texas, USA, April 8-10
9. L. Bouheraoua, G. Ribert, P. Domingo (2013) Large Eddy Simulation of a Supersonic Burner. SIAM Int. Conf. on Numerical Combustion, San Antonio, Texas (USA)

Thèses en cours sur le projet

- 4 doctorants effectuent des calculs sur ANTARÈS.

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

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

Porteur : Helena ZAPOLSKY

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 20 768

Communications dans des congrès internationaux

1. H. Zapolsky, M. Certain, M. Lavrsky, R. Patte « Modeling of pattern formation », StatPhys25, Seoul, 2013.
2. H. Zapolsky, M. Lavrsky, R. Patte, A.G. Khachaturyan « Atomic density function modeling of the redistribution of C atoms in Fe », TMS 2014, San Diego, USA

Thèses en cours sur le projet

- M. Lavrsky « Modélisation de la redistribution du carbone dans martensite ».

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Prof. A.G. Khachaturyan, Berkeley University, USA.

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

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

Porteur : François-Xavier DEMOULIN

Laboratoire : CORIA (UMR 6614) (Saint Etienne du Rouvray)
Heures.CPU produites 2013 : 99 872

Publications de rang A

1. Duret, B., Reveillon, J., Menard, T., Demoulin, F.-X., 2013 Improving primary atomization modeling through DNS of two-phase flows, IJMF 55 (0),130 – 137.
2. Demoulin, F.-X., Reveillon, J., Duret, B., Bouali Z., Desjonqueres P., Menard, T., 2013. Towards using Direct Numerical Simulation to improve primary break-up modeling. Accepted in Special issue of Atomization and Spray. DOI:10.1615/AtomizSpr.2013007439.

Communications dans des congrès internationaux

1. N. Hecht, Z. Bouali, T. Menard, J. Reveillon and F.X. Demoulin, Coupled modelling impact of liquid interface and dispersed sprays, Ilass 2013 Chania, Crete
2. N. Hecht, Z. Bouali, T. Menard, J. Reveillon and F.X. Demoulin, Toward fully coupled modelling impact of liquid interface and dispersed sprays, Icmf 2013 Jeju, Korea
3. Duret, B., Menard, T., Reveillon, J., Demoulin, F.-X., 2013. Two phase flows DNS of evaporating liquid-gas interface including interface regression, using Level Set and Coupled Level Set/VOF method. In : 8th ICMF, Jeju, Korea.
4. B. Duret, T. Menard, J. Reveillon, and F.X. Demoulin, Improving primary atomization modelling through DNS of two-phase flows, in ILASS – Europe 2013, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems. 2013: Chania, Crete.
5. N. Hecht, Z. Bouali, T. Menard, J. Reveillon, and F.X. Demoulin, Coupled modelling impact of liquid interface and dispersed sprays, in ILASS – Europe 2013, 25th European Conference on Liquid Atomization and Spray Systems. 2013: Chania, Crete.
6. B. Duret, T. Menard, J. Reveillon, and F.X. Demoulin, Improving primary atomization modelling through DNS of two-phase flows, in 25th European Conference Liquid Atomization & Spray Systems. 2013: Chania, Crete.

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

- Benjamin Duret (sept 2010 - octobre 2013) : Simulation numérique directe des écoulements liquide-gaz avec évaporation : application à l'atomisation.

Thèses en cours sur le projet

- Nicolas Hecht (sept 2012 - sept 2015) : Construction de méthodes hybride Euler-Lagrange appliquées à l'atomisation

16. Projet : 2006013

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Vincent GANDON

Laboratoire : UMR 7611, C229 (Paris)

Heures.CPU produites 2013 : 39 294

Publications de rang A

1. Relationship between Gallium Pyramidalization in L•GaCl₃ Complexes and the Electronic Ligand Properties. El-Hellani, A.; Monot, J.; Tang, S.; Guillot, R.; Bour, C.; Gandon, V. Inorg. Chem. 2013, 52, 11493–11502.
2. Cascade Cyclizations of Acyclic and Macrocyclic Alkynes: Studies toward the Synthesis of Phomactin A. Ciesielski, J.; Gandon, V.; Frontier, A. J. Org. Chem. 2013, 78, 9541–9552.
3. Gold Compounds Anchored to a Metallated Arene Scaffold: Synthesis, X-ray Molecular Structure and Cycloisomerization of Enyne. Dubarle-Offner, J.; Barbazanges, M.; Augé, M.; Desmarets, C.; Moussa, J.; Axet, M. R.; Ollivier, C.; Aubert, C.; Fensterbank, L.; Gandon, V.; Malacria, M.; Gontard, G.; Amouri, H. Organometallics 2013, 32, 1665–1673.

4. Molecular versus Ionic Structures in Adducts of GaX₃ with Monodentate Carbon-Based Ligands. El-Hellani, A.; Monot, J.; Guillot, R.; Bour, C.; Gandon, V. *Inorg. Chem.* 2013, 52, 506–514.

Communications dans des congrès internationaux

1. GECO 54 (Le Croisic), 25-30 août 2013, conférencier invité. Practical Homogeneous Au(I)- and Ga(III)-Catalysis: a Few Tips.

Thèses en cours sur le projet

- Guillaume Thiery - 2013-2016 - Catalyse par les sels de gallium(I).

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Florent LOUIS

Laboratoire : PC2A (Villeneuve d'Ascq)

Heures.CPU produites 2013 : 60 608

Publications de rang A

1. Atmospheric Reactivity of CH₂Cl with OH Radicals: High-Level OVOS CCSD(T) Calculations for the X-Abstraction Pathways (X = H, Cl, or I), *Journal of Physical Chemistry A*, 117, 771-782, 2013, SULKOVA K., SULKA M., LOUIS F., NEOGRADY P.
2. A Theoretical Study of the X-Abstraction Reactions (X = H, Br, or I) from CH₂Br by OH Radicals: Implications for Atmospheric Chemistry, *Zeitschrift für Physikalische Chemie, Special Issue Milestones in Physical Chemistry: The Potential Energy Surface, from Eyring and Polanyi to the present day*, 227, 1337-1359, 2013, SULKA K., SULKOVA K., LOUIS F., NEOGRADY P., CERNUSAK I.

Communications dans des congrès internationaux

1. Atmospheric reactivity of iodoalkanes towards OH radicals, International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (IMAMPC), Villeneuve d'Ascq, 2-5 Juillet 2013. LOUIS F., ŠULKOVÁ K., SULKA M., ŠUDOLSKÁ M., FEDERIČ J., ČERNUSÁK I.
2. A theoretical study of cesium borates compounds. International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (IMAMPC), Villeneuve d'Ascq, 2-5 Juillet 2013. VANDEPUTTE R., LOUIS F., CANTREL L.
3. A theoretical study of the kinetics of gas-phase elementary reactions containing caesium species of nuclear safety interest. 7th Molecular Quantum Mechanics, Lugano (Suisse), 2-7 Juin 2013. ŠULKOVÁ K., CANTREL L., LOUIS F.
4. Formation of CsxHyClusters in Negative Ion Sources for ITER. 7th Molecular Quantum Mechanics, Lugano (Suisse), 2-7 Juin 2013. ŠKOVIERA J., LOUIS F., FEDERIČ J., KELLÖ V., URBAN V., ČERNUSÁK I.
5. Thermochemistry of CsxByOz type of compounds and microsolvation of CsBO₂. 9th European Conference on Computational Chemistry, Sopron (Hongrie), 1-5 Septembre 2013. VANDEPUTTE R., LOUIS F., CANTREL L.
6. Structure and reactivity of CsxHy clusters. 9th European Conference on Computational Chemistry, Sopron (Hongrie), 1-5 Septembre 2013. ŠKOVIERA J., LOUIS F., FEDERIČ J., KELLÖ V., URBAN V., ČERNUSÁK I.
7. Reactivity of iodoalkanes towards OH radicals - Atmospheric chemistry challenge. Central European Symposium on Theoretical Chemistry, Znojmo (République Tchèque), 22-25 Septembre 2013. ŠUDOLSKÁ M., LOUIS F., ŠULKOVÁ K., SULKA M., FEDERIČ J., NEOGRADY P., ČERNUSÁK I.

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

- Thèse de Romain Vandeputte soutenue le 18 décembre 2013, Le rôle du bore sur la spéciation de l'iode dans le circuit primaire.

Stages de Master en 2013 sur le projet

- Hui Peng, Etude de la réactivité du radical IO avec les radicaux méthylperoxydes CH₃OO.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Université Comenius de Bratislava : groupe du professeur ČERNUSÁK.

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

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

Porteur : Sébastien PETIT

Laboratoire : CRISMAT (Caen)

Heures.CPU produites 2013 : 194 960

Publications de rang A

1. Julien Varignon, Sébastien Petit, Alain Gellé et Marie-Bernadette Lepetit, accepté J. Phys. : Cond. Mat., "An ab initio study of magneto-electric coupling of YMnO₃."
2. K. Singh, M. B. Lepetit, C. Simon, N. Bellido, S. Pailhès, J. Varignon, A. de Muer, J. Phys. : Cond. Mat. 25, 416002 (2013), "Analysis of the multiferroicity in the hexagonal manganite YMnO₃"
3. S. Petit, V. Balédent, C. Doubrovsky, M. B. Lepetit, M. Greenblatt, B. Wanklyn et P. Foury-Leylekian, Phys. Rev. B 87, 140301(R) (2013), "Electromagnons in multiferroic TbMn₂O₅."

Communications dans des congrès internationaux

1. Marie-Bernadette LEPETIT, French-Japanese symposium on quantum magnetism in spin, charge and orbital systems, "Ab initio determination of effective models in magnetic compounds."

Thèses en cours sur le projet

- Begüm Koçak, 2012-2015, "New theoretical concepts for designing oxide interfaces with exotic properties for electronics and spintronics".

Stages de Master en 2013 sur le projet

- Hamdi Barkaoui, février - août 2013, stage de Master II.

19. Projet : 2008001**Intitulé : Étude des propriétés magnétiques des super-réseaux intermétalliques DyFe₂/YFe₂.**

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

Porteur : Pierre-Emmanuel BERCHE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 799

Publications de rang A

1. A Monte Carlo study of the magnetization reversal in DyFe₂/YFe₂ exchange-coupled superlattices, Saoussen Djedai, Etienne Talbot and Pierre-Emmanuel Berche - soumis

Thèses en cours sur le projet

- Saoussen Djedai, Algérie, Modélisation et simulations numériques des propriétés de multicouches magnétiques.

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

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

Porteur : Abdenacer IDRISSE

Laboratoire : LASIR (Villeneuve d'Ascq)

Heures.CPU produites 2013 : 1 252 227

Publication de Rang A

1. The Study of Correlations between Hydrogen Bonding Characteristics in Liquid, Sub- and Supercritical Methanol. Molecular Dynamics Simulations and Raman Spectroscopy Analysis, Idrissi A., Oparin R., Krishtal S., Krupin S., Vorobiev E., Frolov A. and Kiselev M. , Faraday discussion, 167, 551, 2013.
2. Free Energy of Mixing of acetone and methanol : a computer simulation investigation. A. Idrissi, K. Polok, W. Gadomski, B. Marekha, M. Kiselev, P. Jedlowszky, J. Phys. Chem. B 117, 16157-16164 2013
3. Density Inhomogeneity distribution in sub- and Supercritical fluids : analysis by Molecular dynamics simulations and density based approach, A. Idrissi, I. Vyalov, N. Georgi, M. Kiselev, J. Phys. Chem. B. 117(40) 12184-12188, 2013.

Communications dans des congrès internationaux

1. The Study of Correlations between Hydrogen Bonding Characteristics in Liquid, Sub- and Supercritical Methanol. Molecular Dynamics Simulations and Raman Spectroscopy Analysis, Idrissi A., Oparin R., Krishtal S., Krupin S., Vorobiev E., Frolov A. and Kiselev M. Mesostructure and Dynamics in Liquids and Solutions Faraday Discussion 167, 18-23 September, Wills Hall, Bristol, UK.
2. Local structure in Acetone and Methanol mixture : Combination of molecular dynamics simulation and Infrared Spectroscopy, A. Idrissi, 3rd Visegrad Symposium on Structural Systems Biology, 19-22 Juin, Smolenice, Slovak Republic (2013).
3. Local Structure in Sub and Supercritical Water : IR Spectroscopy and Molecular Dynamic Simulation Analysis, Fatima Lafrad, Thierry Tassaing and Abdenacer Idrissi, 33th International Conference on Solution Chemistry, 7-12 July, Kyoto, Japan (2013)
4. Molecular dynamics study of some flavones in liquid methanol, K. Smail, N. Tchour, A. Idrissi, and M. Barj, 31th EMLG/JMLG Annual Meeting : Global perspectives on the Structure and Dynamics of Liquids and Mixtures : Experiment and Simulation , 9-13 Septembre, Lille, France (2013).
5. Organic solvents strongly modify flavonoids reactivity, fluorescence and physicochemical properties. An integrated spectroscopic and ab initio study, Alberto Mezzetti, Ari P. Seitsonen, Abdenacer Idrissi and Stefano Protti, 31th EMLG/JMLG Annual Meeting : Global perspectives on the Structure and Dynamics of Liquids and Mixtures : Experiment and Simulation , 9-13 Septembre, Lille, France (2013).
6. The structure features of solvent near the critical isotherm, Michael Kiselev, Abdenacer Idrissi, Ivan Vyalov, S. Krupin, Andrey Frolov, 31th EMLG/JMLG Annual Meeting : Global perspectives on the Structure and Dynamics of Liquids and Mixtures : Experiment and Simulation , 9-13 Septembre, Lille, France (2013).

21. Projet : 2008013**Intitulé : Simulations d'écoulements fluides réactifs - Interactions flamme/paroi, combustion petite échelle, combustion stratifiée**

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

Porteur : Yves D'ANGELO

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

Heures.CPU produites 2013 : 1 725 691

Publications de rang A

1. M. Sjostrand-Cuif, Y. D'Angelo & E. Albin, No-slip Wall Acoustics Boundary Condition treatment in the Incompressible Limit, *Computers and Fluids*, Volume 86, Pages 92–10, November 2013. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compfluid.2013.07.015>
2. R.A. Rego, Y. D'Angelo & G. Joulin, On nonlinear model equations for the response of premixed flames to acoustic like accelerations, *Combustion Theory & Modelling*, Volume 17, Issue 1, 2013 <http://dx.doi.org/10.1080/13647830.2012.721900>
3. E. Albin, H. Nawroth, S. Gölke, Y. D'Angelo, C.O Paschereit, Experimental investigation of burning velocities of ultra-wet methane-air-steam mixtures, *Fuel Processing Technology*, March 2013 <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuproc.2012.06.027>
4. M. Sjostrand-Cuif & Y. D'Angelo, DNS Analysis of a cubic meso-scale combustion chamber : I. Cold flow topology & dynamics. Soumise en septembre 2013 à *European Journal of Mechanics - B/Fluids*
5. Sjostrand-Cuif, Y. D'Angelo & N. Swaminathan, DNS Analysis of a cubic meso-scale combustion chamber : II. Reactive flow simulations. Soumise à *Combustion & Flame* en octobre 2013

Communications dans des congrès internationaux

1. P. Bénard, V. Moureau, G. Lartigue, Y. D'Angelo, Large eddy simulation of a meso-scale combustion chamber, *Proceedings European Combustion Meeting*, Lund, Sweden, 2013 (avec Proceedings, 6 pages)
2. M. Sjostrand-Cuif & Y. D'Angelo, DNS Analysis of Flow Dynamics inside a Cubic MesoScale Combustion Chamber, *Proceedings of the International Computational Mechanics Symposium 2012*, Kobe, Japan, october 2012.
3. C. Gruselle, G. Lartigue, P. Pepiot, V. Moureau & Y. D'Angelo, Numerical simulation of turbulent stratified flame propagation in a closed vessel, *Proc. of the 65th American Physical Society Annual Fall DFD Meeting*, San Diego, CA, november 2012.
4. C. Gruselle, V. Moureau, G. Lartigue, Y. D'Angelo, F. Ravet, "Numerical simulation of the propagation of a stratified turbulent flame in a closed vessel, LES4ICE, Rueil, novembre 2012
5. P. Bénard, V. Moureau, Y. D'Angelo, G. Lartigue, G. & M. Cuif-Sjostrand, LES/DNS modeling of mesocombustion chambers with Arrhenius complex chemistry. *SIAM 14th International Conference on Numerical Combustion*, San Antonio, USA, 2013
6. C. Gruselle, P. Pepiot, G. Lartigue, V. Moureau, Y. D'Angelo, F. Ravet, Investigation of flame kernel expansion in a stratified mixture using dns and les. *SIAM 14th International Conference on Numerical Combustion*, San Antonio, USA, 2013.

Thèses en cours sur le projet

- Labex Mesotherm : P. Bénard (depuis février 2012)
- CIFRE Renault : C. Gruselle (soutenance le 22 janvier 2014)

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Projet LABEX EMC3 MESOTHERM (thèse P. Bénard) & Meso-combustion (thèse de M. Sjostrand soutenue fin 2012)
- CIFRE Combustion Stratifiée : Renault Guyancourt et Cornell University (USA) : P. Pepiot
- CRISMAT/LIED Christophe Goupil,
- Politecnico de Milan, F. Cozzi
- Cambridge Univ., N. Swaminathan.

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

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

Porteur : Jun CHEN

Laboratoire : CIMAP (Alençon)

Heures.CPU produites 2013 : 1 115 648

Publications de rang A

1. Structural and electronic properties of elastically strained InN/GaN quantum well multilayer heterostructures, J. Kioseoglou, Ph. Komninou, J. Chen, G. Nouet, E. Kalesaki, and Th. Karakostas, accepté par PSS le 13 novembre 2013.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Department of Physics, Aristotle University of Thessaloniki, GR-54124, Thessaloniki, Greece.

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

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

Porteur : Denis LEDUE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 2 016

Publications de rang A

1. Temperature dependence of the exchange bias properties of ferromagnetic/antiferromagnetic polycrystalline bilayers, D. Ledue, A. Maitre, F. Barbe, L. Lechevallier Soumise à la revue Physical Review B.

Thèses en cours sur le projet

- Thèse débutée en septembre 2012 (G. Lhoutellier).

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites 2013 : 14213

Publications de rang A

1. S. T. A. G. Melissen, V. Tognetti, G. Dupas, J. Jouanneau, G. Lê, L. Joubert, A DFT study of the Al₂Cl₆-catalyzed Friedel-Crafts acylation of phenyl aromatic compounds, J. Mol. Model. 19 (2013) 4947
2. O. A. Syzgantseva, V. Tognetti, L. Joubert, On the physical nature of halogen bonds: A QTAIM study, J. Phys. Chem. A 117 (2013) 8969
3. V. Domalain, V. Tognetti, M. Hubert-Roux, C. M. Lange, L. Joubert, J. Baudoux, J. Rouden, C. Afonso, Role of Cationization and Multimers Formation for Diastereomers Differentiation by Ion Mobility-Mass Spectrometry, J. Am. Soc. Mass Spectrom. 24 (2013) 1437
4. F. Zielinski, V. Tognetti, L. Joubert, A theoretical study on the gas-phase protonation of pyridine and phosphinine derivatives, J. Mol. Model. 19 (2013) 4049
5. V. Tognetti, C. Morell, P.W. Ayers, L. Joubert, H. Chermette, A proposal for an extended dual descriptor: a possible solution when Frontier Molecular Orbital Theory fails, Phys. Chem. Chem. Phys. 15 (2013) 14465
6. V. Tognetti, L. Joubert, On critical points and exchange-related properties of intramolecular bonds between two electronegative atoms, Chem. Phys. Lett. 579 (2013) 122

7. L.-A. Jouanno, V. Tognetti, L. Joubert, C. Sabot, P.-Y. Renard, Thermally controlled decarboxylative [4+2] cycloaddition between alkoxyoxazoles and acrylic acid: Expedient access to 3-hydroxypyridines, *Org. Lett.* 15 (2013) 2530

Communications dans des congrès internationaux

1. 39ème International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL-2013), Grenade, Espagne (30/06/2013-05/07/2013), Making Density Functional Theory and Bader's Atoms-in-Molecules Theory converse.
2. Workshop on Non-Covalent Interactions, Paris, France (26-28/06/2013), QTAIM/DFT descriptors for the descriptions of weak interactions.

Thèses en cours sur le projet

- Thèse de Leonid Patrikeev.

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Catherine FRESSIGNE

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites 2013 : 27 166

NB : travaux communs avec le projet 2004004

Publications de rang A

1. « Influence of the acetylenic substituent on the intramolecular carbolithiation of alkynes : a DFT theoretical study » Fressigné C.; Lhermet R.; Girard A.L.; Durandetti M.; Maddaluno J. , *J. Org. Chem.* 2013, 78, 9659-9669.
2. « Intramolecular carbonickelation of alkenes », Lhermet, R.; Durandetti, M.; Maddaluno, J. *Beilstein J. Org. Chem.* 2013, 9, 710–716. Article sur invitation.

Communications dans des congrès internationaux

1. "Intramolecular carbometallation of hetero-substituted alkynes," International Symposium on Carbanion Chemistry (ISCC-10), Kyoto (Japon), 24 septembre 2013

Communications dans des congrès nationaux

1. "Enantioselective catalysis with alkylolithium reagents," Remise du Prix 2012 de la Division de Chimie Organique à J. Maddaluno, Journées de Chimie Organique de la Société Chimique de France, ENSC Paris, 26 mars 2013

Séminaires industriels et académiques :

- Carbolithiation intramoléculaire de Chloroalcynes: un accès à des vinyl carbenoides". Communication orale présentée au Groupe d'Etude de Chimie Organique, GECO 54 (du 25 au 30 août 2013 au Croisic).
- « Carbométallation intramoléculaire d'alcynes hétérosustitués », Conférence à l'Université de Nice (Dr Elisabet Dunach, Nice, 15 février 2013).
- "Intramolecular carbometallation of alkynes: access to benzofurans, indoles and other heterocycles" The Dr Paul Janssen Invited Lecture Series" Centre de Recherche Janssen Pharmaceutica NV , Beerse (Belgique), 9 avril 2013.
- « Intramolecular carbometallation of alkynes: simple access to benzofurans, indoles and other heterocycles" Centre de Recherche Servier, Croissy-sur-Seine, 4 septembre 2013

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

- Julien MARCHOIS, « Addition / déprotonation : une étude théorique DFT des interactions entre un composé carbonylé et un organolithiens », soutenue le 4 novembre 2013

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Cycle de conférences au Japon : "Lithium versus Nickel: Access to Heterocycles by Intramolecular Carbometallation".
 - Université de Tokushima (le 7 mai 2013 à Tokushima, Japon)
 - Université de Kochi (le 8 mai 2013 à Kochi, Japon)
 - Université d'Osaka Prefecture (le 10 mai 2013 à Osaka, Japon).
- Conférence présentée à l'Ecole Polytechnique (le 30 septembre 2013 à Palaiseau), "Lithium versus Nickel : un accès à des hétérocycles par carbométallation intramoléculaire".
- Collaboration : Muriel Durandetti, Maitre De Conférences Université de Rouen.

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

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Pierre-Michel GUILCHER

Laboratoire : Hydrocéan (Nantes)

Heures.CPU produites 2013 : 8 865

Calculs effectués dans les suites de la thèse de Mathieu de Lefte (LMF Ecole Centrale de Nantes).

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Laurent JOUBERT

Laboratoire : IRCOF (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites 2013 : 8 534

Voir autre projet du même porteur : 2010010

28. Projet : 2011005**Intitulé : Etude sur modèles chimiques de réactions de Friedel-Crafts appliquée à la synthèse de polyaryléthercétones**

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Georges DUPAS

Laboratoire : ECOFH (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 115 479

Publications de rang A

1. Melissen S.T.A.G., Tognetti V., Jouanneau, J., Lê, G., Dupas, G., Joubert, L. 2013 J. Mol. Model. 19, 4947

Communications dans des congrès internationaux

1. XIV European Symposium on Organic Reactivity, Prague, 1-6 septembre 2013, CZ: Poster 75.
2. 15th International Conference on Density Functional Theory and its Applications, Durham, UK, 9-13 septembre 2013: Poster 108.

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

- A theoretical and experimental approach to understanding poly aryl ether ketone synthesis. Soutenue le 11 décembre 2013

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- UMR 6014 : Pr G. Dupas, Pr L. Joubert, Dr V. Tognetti.
- ARKEMA, site de Serquigny : Dr L. Jouanneau, Dr G. Lè.

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

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

Porteur : Florent CALVAYRAC

Laboratoire : LPEC (Le Mans)

Heures.CPU produites 2013 : 8 951

Publications de rang A

1. Wojcik, J.; Calvayrac, F.; Goutenoire, F.; Mhadhbi, N.; Corbel, G.; Lacorre, P.; Bulou, A. Lattice Dynamics of Beta-SnWO₄; Experimental and Ab Initio Calculations. The Journal of Physical Chemistry C 2013, 117, 5301–5313.
2. Fouineau, J.; Brymora, K.; Ourry, L.; Mammeri, F.; Yaacoub, N.; Calvayrac, F.; Ammar, S.; Greneche, J.-M. Synthesis, Mössbauer Characterization, and Ab Initio Modelling of Iron Oxide Nanoparticles of Medical Interest Functionalized by Dopamine. The Journal of Physical Chemistry C 2013,
3. B. Sitamtze-Yombi, and F. Calvayrac, Structure of CoO (001) surface from DFT+U computations Surface Science (2014) [Volume 621](#), March 2014, Pages 1–6

Communications dans des congrès internationaux

1. « Irradiation of Materials » BNU Pékin juillet 2013 communication sur le code PWTELEMAN

Communications dans des congrès nationaux

1. GDR ModMat Atelier Oxydes septembre 2013 Structure of CoO (001) surface from DFT+U computations

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

- Katarzyna Brymora, Modélisation des propriétés magnétiques et optiques de nanoparticules d'intérêt médical, soutenue le 30 septembre 2013.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Eric Suraud Mai Dinh Sève L Physique Théorique Toulouse
- Feng-Shou Zhang Université Normale de Pékin (BNU)
- Souad Ammar-Merah F.Mammeri ITODYS Université Paris 7
- Entreprise ECA-EN Nantes.

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

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

Porteur : Bessem BEN DOUDOU

Laboratoire : LRPMN (Damigny)

Heures.CPU produites 2013 : 238 804

31. Projet : 2011010

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

Famille Thématique : Mathématiques appliquées

Porteur : Philippe KARAMIAN

Laboratoire : LMNO (Caen)

Heures.CPU produites 2013 : 96

Voir autre projet du même porteur : 2012001

32. Projet : 2011012

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

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Christian DUFOUR

Laboratoire : CIMAP - UMR 6252 (Caen)

Heures.CPU produites 2013 : 92 910

Publications de rang A

1. Modeling of the electromagnetic field and level populations in a waveguide amplifier: a multi-scale time problem, Alexandre Fafin, Julien Cardin, Christian Dufour, and Fabrice Gourbilleau, Optics Express, Vol. 21, Issue 20, pp. 24171-24184 (2013).

Communications dans des congrès internationaux

1. Nanostructured Silicon and Rare Earth Based Gain Media for Compact infrared Light Sources: Experimental and theoretical investigations., J. Cardin, A. Fafin, C.H. Liang, C. Dufour, O. DEbieu, C. Labbé, P. Pirasteh-Charrier, J. Charrier, Y. Dumeige, Y. Boucher F. Gourbilleau, ICMAT 2013 Materials Research Society Singapore.
2. Development of new kinds of plasmonic materials through swift heavy ion shaping technique. J. Cardin, C. Dufour, V. Khomenkov, A. Fafin, I. Monnet, G. Rizza, P-E. Coulon, A. Slablab, D. Mailly, C. Ulysse, X. Lafosse, S. peruchas, T. Gacoin, ICMAT 2013 Materials Research Society Singapore.
3. Modelling of waveguide amplifier based on Nd³⁺ doped silicon rich silicon oxide (SRSO) by a ADE-FDTD method, J. Cardin, C. Dufour, A. Fafin, F.Gourbilleau, MRS Fall Meeting, Boston,MA,USA, November 2012.

Communications dans des congrès nationaux

1. Rare Earth Sensitization in Si-based Structures for Photonic Applications L Khomenkova, C Labbé, M Morales, C Dufour - 2013 ECS Meeting.

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

- Modélisation numérique et imagerie optique en champ proche par rétro-injection laser de guides d'onde plasmoniques, Matthieu Roblin 19 décembre 2013.

Thèses en cours sur le projet

- Modélisation numérique de l'interaction onde-matière dans des matériaux nanostructurés à base de terres rares et de nanoparticules semiconductrices pour des applications et à base de nanoparticules métalliques pour la plasmonique. Alexandre Fafin prévue en juillet 2014.

Stages de Master en 2013 sur le projet

- Stage de François Ternet.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- GC Rizza, Laboratoire des Solides Irradiés, Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau.

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

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Xavier MORELLI

Laboratoire : Laboratory of 'integrative Structural & Chemical Biology (iSCB)'; Cancer Research Center of Marseille (CRCM) ; CNRS UMR 7258; INSERM U 1068; Université Aix-Marseille Institut Paoli Calmettes.

Heures.CPU produites 2013 : 229 583

Communications dans des congrès internationaux

1. Macromolecular dynamics: structure, function and diseases, Pekin.

Stages de Master en 2013 sur le projet

- Guillaume Charbonnier, stage Polytech.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Prof. Jin Wang, Jilin University, Chine.
- Dr Sonia Longhi, DR2, AFMB, CNRS, Marseille.
- Dr Denis Gerlier, DR1, CIRI, CNRS, Lyon.

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

Famille Thématique : 6. Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Philippe KARAMIAN

Laboratoire : LMNO (Caen)

Heures.CPU produites 2013 : 75 910

Publications de rang A

1. W. Leclerc, P. Karamian-Surville, A. Vivet, An efficient stochastic and double-scale model to evaluate the effective elastic properties of 2D overlapping random fibre composites. Computational Materials Science, Vol. 69, pp. 481-493, (2013)
2. W. Leclerc, P. Karamian-Surville, Domain decomposition methods to evaluate effective elastic properties of random fibre composites in the framework of the double-scale homogenization, International Journal of Solids and Structures, Vol. 50, Issue 18, pp. 2808-2816, (2013)
3. W. Leclerc, P. Karamian-Surville, Effects of fibre dispersion on the effective elastic properties of 2D overlapping random fibre composites, Computational Materials Science, Vol. 79, pp. 674-683, (2013)
4. W. Leclerc, P. Karamian-Surville, A. Vivet, Influence of morphological parameters of a 2D random short fibre composite on its effective elastic properties, Mechanics and Industry, DOI 10.1051/meca/2013078

Communications dans des congrès internationaux

1. W. Leclerc, P. Karamian, Domain Decomposition Methods For Evaluating Elastic Properties Of Random Fibre Composites, 3rd International Conference on Material Modelling (ICMM3), Poland, (2013)

Communications dans des congrès nationaux

1. W. Leclerc, P. Karamian, Décomposition de domaine pour l'étude double-échelle de milieux hétérogènes, 11e Colloque National en Calcul de Structure, Presqu'île de Giens (Var), France (2013).
2. W. Leclerc, P. Karamian-Surville, A. Vivet Influence of morphological parameters of a 2D random short fibre composite on its effective elastic properties, 21ème congrès français de mécanique, Bordeaux, France (2013).

Thèses soutenue en 2013 sur le projet

- Thèse de Willy Leclerc : Une approche numérique fiable et automatisée de l'estimation des propriétés élastiques des microstructures complexes, novembre 2013, Université de Caen.

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

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

Porteur : Cristelle PAREIGE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 13 478

Voir autre projet du même porteur : 2005014

36. Projet : 2012004**Intitulé : Modélisation d systèmes biologiques complexes, des metalloprotéines**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Dorothee BERTHOMIEU

Laboratoire : Equipe Matériaux Avancés pour la Catalyse et la Santé. Institut Charles Gerhardt UMR 5253 CNRS ENSCM (Montpellier)

Heures.CPU produites 2013 : 26 472

37. Projet : 2012006**Intitulé : Simulation hautes-fidélités de la turbulence et de la combustion en géométrie complexe**

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

Porteur : Vincent MOUREAU

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

Heures.CPU produites 2013 : 507 583

Publications de rang A

1. Pecquery, F., Moureau, V., Lartigue, G., Vervisch, L. & Roux, A. (2013) Modelling nitrogen oxide emissions in turbulent flames with air dilution: Application to les of a non-premixed jet-flame. Comb. and Flame, in press.
2. Barré, D., Kraushaar, M., Staffelbach, G., Moureau, V. & Gicquel, L. Y. (2013) Compressible and low mach number les of a swirl experimental burner. Comptes Rendus Mécanique, 341 (1-2), 277-287, <http://dx.doi.org/10.1016/j.crme.2012.11.010>.
3. Malandain, M., Maheu, N. & Moureau, V. (2013) Optimization of the deflated conjugate gradient algorithm for the solving of elliptic equations on massively parallel machines. J. Comp. Physics, 238, 32-47, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2012.11.046>.

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

1. Moureau, V., Lartigue, G., Guédot, L., Malandain, M. & Maheu, N. (2013) Méthodes de résolution des systèmes linéaires de grande taille pour la simulation instationnaire et l'analyse des écoulements turbulents en géométrie complexe. MATAPLI, bulletin de la Société de Mathématiques Appliquées et Industrielles,, vol. 102.
2. Moureau, V. (2012) Limiter les polluants de réacteurs en simulant la combustion. La Recherche, numéro spécial sur le calcul haute-performance.

Communications dans des congrès internationaux

1. Moureau, V. & Lartigue, G. (2013) Exascale challenges for combustion computational fluid dynamics (cf) applications. Intel European Research & Innovation Conference. Nice, France (conférence invitée).
2. Moureau, V. & Lartigue, G. (2013) High performance computing for combustion modeling. International Supercomputing Conference. Leipzig, Germany (conférence invitée).
3. Benard, P., Moureau, V., D'Angelo, Y., Lartigue, G. & Cuif-sjostrand, M. (2013) Les / dns modelling of mesocombustion chambers with arrhenius complex chemistry. SIAM 14th International Conference on Numerical Combustion. San Antonio, USA.
4. Mercier, R., Auzillon, P., Moureau, V., Darabiha, N., Gicquel, O., Veynante, D. & Fiorina, B. (2013) Les modeling of stratified flames stabilized by heat losses. SIAM 14th International Conference on Numerical Combustion. San Antonio, USA.
5. Schmitt, T., Boileau, M., Veynante, D. & Moureau, V. (2013) Flame wrinkling factor dynamics modeling for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP-8). Poitiers, France.
6. Mercier, R., Auzillon, P., Darabiha, N., Gicquel, O., Veynante, D., Fiorina, B. & Moureau, V. (2013) Modeling flame stabilization by heat losses using filtered tabulated chemistry for les. International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP-8). Poitiers, France.
7. Maheu, N., Moureau, V. & Domingo, P. (2013) Large-eddy simulation and heat transfer around a low-mach number blade. ERCOFTAC Direct and Large-Eddy Simulation 9. Dresden, Germany.
8. Veynante, D., Moureau, V., Boileau, M. & Schmitt, T. (2013) A priori analysis of dynamic models for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. ERCOFTAC Direct and Large-Eddy Simulation 9. Dresden, Germany.
9. Gruselle, C., Pepiot, P., Lartigue, G., Moureau, V., D'Angelo, Y. & Ravet, F. (2013) Investigation of flame kernel expansion in a stratified mixture using dns and les. SIAM 14th International Conference on Numerical Combustion. San Antonio, USA.
10. Benard, P., Moureau, V., Lartigue, G. & D'Angelo, Y. (2013) Large eddy simulation of a meso-scale combustion chamber. European Combustion Meeting. Lund, Sweden.
11. Guedot, L., Lartigue, G. & Moureau, V. (2013) Design of high-order implicit filters on unstructured grids for the identification of large-scale features in large-eddy simulations. ERCOFTAC Direct and Large-Eddy Simulation 9. Dresden, Germany.
12. Duchaine, F., Maheu, N., Moureau, V. & Balarac, G. (2013) Large-eddy simulation and conjugate heat transfer around a low-mach turbine blade. ASME Turbo Expo,, vol. GT2013-94257. San Antonio, USA.

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

Famille Thématique : Physique des Matériaux

Porteur : Pierre-Emmanuel BERCHE

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 4 120

Aucune publication sur ce projet en 2013. Autre projet du même porteur : 2008001.

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

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

Porteur : Helena ZAPOLSKY

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 139 590

Publications de rang A

O. Kapikranian, H. Zapolsky, Ch. Domain, R. Patte, C. Pareige, B. Radiguet, P. Pareige, « Atomic density function modeling of atomic structure of grain boundaries », soumis à Physical Review B.

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

Christophe Domain (EDF).

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Luc BRUN

Laboratoire : UMR 6072 (Caen)

Heures.CPU produites 2013 : 141 570

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

1. Noyau de treelets appliqué aux graphes étiquettes et aux graphes de cycles. B Gaüzère, L Brun, D Villemin. Revue d'intelligence artificielle 27 (1).

Communications dans des congrès internationaux

1. A Comparison of Explicit and Implicit Graph Embedding Methods for Pattern Recognition. D Conte, JY Ramel, N Sidère, MM Luqman, B Gaüzère, J Gibert, L Brun, Mario Vento. Graph-Based Representations in Pattern Recognition 2013, pages 81-90.
2. Relevant Cycle Hypergraph Representation for Molecules. B Gaüzère, L Brun, D Villemin. Graph-Based Representations in Pattern Recognition 2013, pages 111-120.
3. Treelet Kernel Incorporating Chiral Information. P.A Grenier, L Brun, D Villemin. Graph-Based Representations in Pattern Recognition 2013, pages 132-141.

Communications dans des congrès nationaux

1. A new hypergraph molecular representation. B Gaüzère, L Brun, D Villemin. Actes des 6 ièmes Journées de la Chémoinformatique.
2. Chiral Kernel: Taking into account stereoisomerism. P.A Grenier, L Brun, D Villemin. Actes des 6 ièmes Journées de la Chémoinformatique.

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

- Application des méthodes à noyaux sur graphes pour la prédiction des propriétés des molécules. Benoit Gaüzère. Soutenue le 29 novembre 2013.

Thèses en cours sur le projet

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

Chapitre d'ouvrage en cours d'impression

- Quantitative Graph Theory: Mathematical Foundations and Applications, CRC Press, Matthias Dehmer and Frank Emmert-Streib. Chapter « Graph kernels in chemoinformatics »

Articles soumis

1. Treelet kernel incorporating cyclic, chiral and inter pattern information. B. Gaüzère, P.-A. Grenier, L. Brun et D. Villemin. Soumis à Pattern Recognition.
2. Graph kernel encoding substituents' relative positioning. B. Gaüzère, L. Brun et D. Villemin. Soumis à ICPR 2014.
3. A Graph Kernel incorporating molecule's stereoisomerism information. P.-A. Grenier, L. Brun et D. Villemin. Soumis à ICPR 2014.
4. Représentation des cycles d'une molécule sous forme d'hypergraphe. B. Gaüzère, L. Brun et D. Villemin. Soumis à RFIA 2014.
5. Un noyau sur graphe prenant en compte la stéréoisométrie des molécules. P.-A. Grenier, L. Brun et D. Villemin. Soumis à RFIA 2014.

41. Projet : 2013003**Intitulé : Optimisation des écoulements d'air et du transfert thermique autour d'un double embrayage de transmission automobile par la modélisation.**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Béatrice PATTE-ROULAND

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

Heures.CPU produites 2013 : 11 975

Thèses en cours sur le projet

- Anthony LEVILLAIN – Thèse CIFRE VALEO (15/05/2012-15/05/2015) intitulée « Optimisation des écoulements d'air et du transfert thermique autour d'un double embrayage de transmission automobile par la modélisation. »

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

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

Porteur : Arnaud METSUE

Laboratoire : Laboratoire des sciences de l'ingénieur pour l'environnement – Université de La Rochelle

Heures.CPU produites 2013 : 41 360

Publications de rang A

1. Contribution of the entropy on the thermodynamic equilibrium of vacancies in nickel, Arnaud Metsue, Abdelali Oudriss, Jamaa Bouhattate et Xavier Feugas, The Journal of chemical physics, révisé.

Communications dans des congrès nationaux

1. GDR modélisation des matériaux, Marseille, 21-22 février 2013, Etude de la formation et du champ de déformations des lacunes dans le nickel par calculs ab initio, Arnaud Metsue, Abdelali Oudriss, Jamaa Bouhattate et Xavier Feugas.
2. Colloque Plasticité, Paris, 17-19 avril 2013, Formation et diffusion des lacunes dans le nickel: calculs ab initio, Arnaud Metsue, Abdelali Oudriss, Jamaa Bouhattate et Xavier Feugas.

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

Famille Thématique : 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

Porteur : Hélène LAVANANT

Laboratoire : COBRA UMR CNRS 6014 (Mont Saint Aignan)

Heures.CPU produites 2013 : 15 477

Communications dans des congrès internationaux

1. Travelling Wave Ion Mobility Calibration with Phosphoric Acid Clusters, Helene Lavanant, Vincent Tognetti, Carlos Afonso, 61st Annual ASMS Conference on Mass Spectrometry and Allied Topics June 9 - 13, 2013, Minneapolis, MN, USA.

44. Projet : 2013006

Intitulé : Imagerie mathématique et analyse numérique

Famille Thématique : 6 Informatique, algorithmique et mathématiques

Porteur : Carole LE GUYADER

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

Heures.CPU produites 2013 : 88

Publications de rang A

1. H. Barucq, T. Chaumont-Frelet, J. Diaz and V. Péron. Upscaling for the Laplace problem using a discontinuous Galerkin method. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 240 :192-203, 2013.
2. C. Bonamy and C. Le Guyader. Split Bregman iteration and infinity Laplacian for image decomposition. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 240 :99-110, 2013.
3. R. Derfoul, S. Da Veiga, C. Gout, C. Le Guyader, and E. Tillier. Image processing tools for better incorporation of 4D seismic data into reservoir models. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 240 :111-122, 2013.
4. C. Le Guyader, C. Gout, A.-S. Macé, and D. Apprato. Gradient fields approximation : application to registration processes in image processing. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 240 : 135-147, 2013.
5. C. Le Guyader, D. Apprato, and C. Gout. Spline approximation of gradient fields : applications to wind velocity fields. *Mathematics and Computers in Simulation*, 97:260-279, 2014.
6. V. Salnikov, On numerical approaches to the analysis of topology of the phase space for dynamical integrability, *Chaos, Solitons & Fractals*, 2013(57): 155-161 .
7. V. Salnikov and T. Strobl, Dirac Sigma Models from Gauging, *Journal of High Energy Physics*, 2013(11).

Communications dans des congrès internationaux

1. R. Derfoul and C. Le Guyader. A Relaxed Problem of Registration Based on the Saint Venant-Kirchhoff Material Stored Energy for the Mapping of Mouse Brain Gene Expression Data to a Neuroanatomical Mouse Atlas. In *Mathematical Foundations of Computational Anatomy, Fourth MICCAI Workshop on Mathematical Foundations of Computational Anatomy*, 2013.
2. J. Doumergue, W. Salazar, C. Gout and E. Lenglard, Surface reconstruction from ship track data using a recursive method, *IEEE IGARSS 2013*.
3. N. Duggan, H. Schaeffer, C. Le Guyader, E. Jones, M. Glavin, and L. A. Vese. Boundary detection in echocardiography using a Split Bregman edge detector and a topology preserving level set approach. In *Biomedical Imaging (ISBI), 2013 IEEE 10th International Symposium on*, 2013.
4. C. Gout, C. Le Guyader, E. Lenglard and T. Roy, Wind velocity field approximation from sparse data, *IEEE IGARSS*, 2013.
5. O. Lalignant, C. Stolz and A. Zakharova. Depth reconstruction by means of defocused light from incomplete measurements. *CORESA 2013 (actes + communication)*, 28-29 novembre 2013.
6. V. Salnikov. International Workshop "Dynamics & Kinetic theory of self-gravitating systems" (IHP Gravasco trimester), Paris, France. (Communication orale).
7. V. Salnikov. Conference on Integrability, Topological Obstructions to Integrability and Interplay with Geometry (RP Geometry and Dynamics of Integrable Systems), Barcelona, Spain, 2013 (communication orale).
8. V. Salnikov. Thematic week "Integrability and the newtonian N-Body Problem", (IHP Gravasco trimester), Paris, France, (conférencier invité).

9. V. Salnikov. 2nd Conference on Finite Dimensional Integrable Systems, CIRM Luminy, France, 2013 (poster).
10. V. Salnikov. The 6th edition of the international conference Functional Equations in LIMoges, France, 2013 (communication orale).

Communications dans des congrès nationaux

1. S. Ozeré. Topology-preserving vector field correction for image-registration-related deformation fields. Congrès SMAI 2013.

Thèses soutenues en 2013 sur le projet

- Ratiba Derfoul, thèse CIFRE – LMI/IFPEN intitulée "Intégration de données de sismique 4D dans les modèles de réservoir et recalage d'images fondé sur l'élasticité non linéaire" et soutenue le 4 octobre 2013. Rapporteurs : Simon MASNOU, Professeur des Universités ; Gabriel PEYRE, Chargé de Recherche et Luminita VESE, Professeur des Universités.

Thèses en cours sur le projet

- Théophile Chaumont-Frelet (bourse INRIA – LMI/INRIA Magique 3D)
- Edson Miyaura (bourse MESR - LMI/LOFIMS)
- Solène Ozeré (bourse MESR - LMI)

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- IFP Energies nouvelles, Université Paris Ouest.

45. Projet : 2013007**Intitulé : Etude théorique du mécanisme d'électrodéposition d'alliages Cobalt-Nickel : modélisation et relation structure-propriétés par approche multi échelle**

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

Porteur : Frédéric BOHR

Laboratoire : LISM (Reims)

Heures.CPU produites 2013 : 2 486

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

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

Porteur : Helena ZAPOLSKY

Laboratoire : UMR CNRS 6634 (Saint Etienne du Rouvray)

Heures.CPU produites 2013 : 42

Voir autre projet du même porteur : 2006007

47. Projet : 2013009**Intitulé : Simulation de séparation en masse de haute résolution avec un plasma d'ions dans un piège de Penning**

Famille Thématique : 5. Physique théorique et physique des plasmas

Porteur : Pierre DUPRE

Laboratoire : CSNSM (Orsay)

Heures.CPU produites 2013 : 3 402

48. Projet : 2013013**Intitulé : Mésochallenge - équipe Abdellah**

Famille Thématique : 2a. Ecoulements non réactifs

Porteur : Abdellah HADJADJ

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

Heures.CPU produites 2013 : 1 109 894

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

- HPC magazine, vol.1 n°7, Octobre 2013, pp. 66-67.

Communications dans des congrès nationaux

Hadjadj, A., Georges-Picot, A., Moebs, G., Mouronval, A.-S., Bousquet-Melou, P. Propagation d'ondes de choc en milieux complexes. Journée Méso-challenges Equip@meso, GENCI, Institut Henri Poincaré, Paris (20/09/2013).

Collaborations (structures et chercheurs partenaires pour le projet)

- Ecole Centrale Paris
- Laboratoire Jean Laray, Université Nantes

49. Projet : 2013014**Intitulé : Simulations d'incendie**

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

Porteur : Hugues BESNARD

Laboratoire : LOMC (Le Havre)

Heures.CPU produites 2013 : 5 848

50. Projet : 2013016**Intitulé : Simulation par dynamique moléculaire de la croissance des précurseurs et agrégats produits par pulvérisation.**

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

Porteur : Khaled HASSOUNI

Laboratoire : LSPM (Villetaneuse)

Heures.CPU produites 2013 : 95

51. Projet : 2013017**Intitulé : Simulation de Protéines de la Matrice Extra-Cellulaire par Dynamique Moléculaire.**

Famille Thématique : 7. Dynamique moléculaire appliquée à la biologie

Porteur : Manuel DAUCHEZ

Laboratoire : SIRMA (Reims)

Heures.CPU produites 2013 : 10 514

Ressources mises à disposition de cette équipe rémoise en juillet 2013 pendant la coupure de service du Centre de Calcul Romeo de Champagne-Ardenne.

52. Projet : 2013019

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

Famille Thématique : 1. Environnement

Porteur : Lionel SOULHAC

Laboratoire : LMFA (Ecully)

Heures.CPU produites 2013 : 3 945

C. Réseau Normand pour la Modélisation Moléculaire

1. RNMM : SMS EA 3233

Intitulé : Sciences et Méthodes Séparatives

Responsable : Pr. COQUEREL Gérard

Laboratoire : Sciences et Méthodes Séparatives (SMS) UPRES EA 3233

IRCOF-Université de Rouen, 76821 Mont Saint-Aignan Cedex

Publications de rang A

1. Impact of Molecular Flexibility on Double Polymorphism, Solid Solutions and Chiral Discrimination during Crystallization of Diprophylline Enantiomers, C. Brandel, Y. Amharar, J. M. Rollinger, U. J. Griesser, Y. Cartigny, S. Petit, G. Coquerel, *Mol. Pharmaceutics*, 2013, 10 (10), 3850–3861.
2. Effect of the second coordination sphere on new contrast agents based on cyclodextrin scaffolds for MRI signals, H. Idriss, F. Estour, I. Zgani, C. Barbot, A. Biscotti, S. Petit, C. Galaup, M. Hubert-Roux, L. Nicol, P. Mulder; G. Gouhier, *RSC Advances*, 2013, 3, 4531-4534.
3. Access to single crystals of (\pm)-Form IV of Modafinil by crystallization in gels; comparisons between (\pm)-Forms I, III and IV and (-)-Form I. J. Mahieux, M. Sanselme, G. Coquerel, *Cryst. Growth Des.*, 2013, 13 (2), 908-917.
4. Preparative resolution of (\pm)-Bis-tetralone by means of Auto-Seeded Preferential Crystallization Induced by Solvent Evaporation (ASPreCISE), J. Mahieux, M. Sanselme, S. Harthong, C. Melan, C. Aronica, L. Guy, G. Coquerel, *Cryst. Growth Des.*, 2013, 13 (8), 3621-3631.
5. Monotropic transition mechanism of m-hydroxybenzoic acid investigated by Temperature Resolved Second Harmonic Generation, S. Clevers, F. Simon, M. Sanselme, V. Dupray, G. Coquerel, *Cryst. Growth Des.*, 2013, 13 (8), 3697-3704.
6. Characterization of the transition between the monohydrate and the anhydrous citric acid, A. Lafontaine, M. Sanselme, Y. Cartigny, P. Cardinael, G. Coquerel, *J. Therm. Anal. Cal.*, 2013, 112, 307-315.

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

1. Caractérisation thermodynamique de la transition de phase hydrate/anhydre : cas de l'acide citrique Y. Cartigny, A. Lafontaine, M. Sanselme, P. Cardinael, G. Coquerel, *Récents Progrès en Génie des Procédés*, 2013, 103, 3.1-3.8.
2. Mécanisme de formation d'inclusions fluides dans les cristaux organiques : influence des gaz sur la croissance cristalline, S. Petit, A. Waldschmidt, N. Couvrat, B. Berton, V. Dupray, G. Coquerel, *Récents Progrès en Génie des Procédés*, 2013, 103, 28.1-28.7.

Communications dans des congrès internationaux

1. Temperature-resolved second harmonic generation A tool designed to study solid-solid transitions S. Clevers, F. Simon, V. Dupray and G. Coquerel, ROSAM (ROuen Symposium on Advanced Materials), Rouen, June 2013, Abstract book p. 30.
2. Formation of Crystalline Hollow Whiskers as Relics of Organic Dissipative Structures, D. Martins, G. Coquerel, ROSAM (ROuen Symposium on Advanced Materials), Rouen, June 2013, Abstract book p. 61.
3. Second Harmonic Generation efficiency in binary eutectic mixtures, F. Simon, S. Clevers, N. Couvrat, V. Dupray, G. Coquerel, ROSAM (ROuen Symposium on Advanced Materials), Rouen, June 2013, Abstract book p. 73.
4. Crystal Growth Study of an Ionic Liquid: Polymorphism, Oiling Out and Complex Melting Behavior, C. Brandel, Y. Cartigny, F. Guillen, G. Gouhier, S. Petit, G. Coquerel, BIWIC-20, Odense (Denmark), September 2013.
5. Application of Preferential Crystallization to a Chiral API in an Unfavorable Situation: Molecular Aspects C. Brandel, Y. Amharar, Y. Cartigny, S. Petit, G. Coquerel BIWIC-20, Odense (Denmark), September 2013.
Molecular mechanisms of Subambient Solid-Solid Phase Transitions in Ciclopirox Crystals, C. Brandel, Y. Cartigny, S. Petit, G. Coquerel, BIWIC-20, Odense (Denmark), September 2013.

Communications dans des congrès nationaux

1. Stability of solid phases in the Dexamethasone Acetate / water system, S. Delage, N. Couvrat, M. Sanselme, Y. Cartigny, G. Coquerel, XXXIX èmes JEEP (Joint European days on Equilibrium between Phases), Nancy, Mars 2013, Abstract book, p. 107.
2. Temperature-resolved second harmonic generation : A tool designed to study solid-solid transitions, S. Clevers, F. Simon, V. Dupray, G. Coquerel, XXXIX èmes JEEP (Joint European days on Equilibrium between Phases), Nancy, Mars 2013, Abstract book, p. 36.
3. Caractérisation thermodynamique de la transition de phase hydrate/anhydre : cas de l'acide citrique, Y. Cartigny, A. Lafontaine, M. Sanselme, P. Cardinael, G. Coquerel, Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielle (CRISTAL-7), Toulouse-Albi, Mai 2013, Abstract book, p. 56.
4. Développement d'un nouvel appareil de diffraction des rayons X en mode réflexion $-\Theta/-\Theta$ pour des suivis de cristallisation in situ, A. Lafontaine, M. Sanselme, Y. Cartigny, G. Coquerel, Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielle (CRISTAL-7), Toulouse-Albi, Mai 2013, Abstract book, p. 74.
5. Mécanisme de formation d'inclusions fluides dans les cristaux organiques : influence des gaz sur la croissance cristalline, S. Petit, A. Waldschmidt, N. Couvrat, B. Berton, V. Dupray, G. Coquerel, Colloque Francophone de Cristallisation et de Précipitation Industrielle (CRISTAL-7), Toulouse-Albi, Mai 2013, Abstract book, p. 10 (conférence plénière).
6. Caractérisation thermodynamique de la transition de phase hydrate/anhydre : cas de l'acide citrique, Y. Cartigny, A. Lafontaine, M. Sanselme, P. Cardinael, G. Coquerel, JCAT (Journées de Calorimétrie et d'Analyse Thermique), Lyon, May 2013, Abstract book, p. O27.

Thèses (en cours ou achevées en 2013)

- Anaïs LAFONTAINE (2009 - 2013), Développement et validation d'un prototype de diffractomètre à rayons X in situ sur poudre, Directeur G. Coquerel.
- Clément BRANDEL (2011 - 2014), Pureté structurale et transitions solide-solide de composés moléculaires, Directeur S. Petit
- Julien MAHIEUX (2011 - 2014), Résolution chirale de congolomérats par cristallisation préférentielle, Directeur G. Coquerel

2. RNMM : Plateforme PISSARO**Intitulé : Plateforme Instrumentale en Sciences Séparatives et Analytiques de Rouen**

Responsable : JOUENNE Thierry

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

Laboratoires impliqués

- UMR6270 CNRS Université et INSA de Rouen, Laboratoire PBS : Polymères Biopolymères Surfaces
- U982 INSERM, Laboratoire DC2N : Différenciation & Communication Neuronale & Neuroendocrine, Place Emile Blondel, Faculté des Sciences et Techniques, 76821 Mont-Saint-Aignan Cedex
- U1073 INSERM, Nutrition, Inflammation et dysfonction de l'Axe Intestin-Cerveau, 22 Bd Gambetta, 76183 ROUEN Cedex
- EA4358, Laboratoire Glyco-MEV : Glycobiologie et Matrice Extracellulaire Végétale, Faculté des Sciences, bâtiment SCUEOR, IFRMP 23 Université de Rouen 76821 Mont-Saint-Aignan
- UMR6014 CNRS, Université et INSA de Rouen, Chimie Organique Bioorganique Réactivité Analyse (COBRA), IRCOF, rue Tesnières, 76131 Mont Saint Aignan Cedex
- U905 INSERM U.905 - Unité Inserm/Université de Rouen "Physiopathologie et biothérapies des maladies inflammatoires et autoimmunes", 22 Bd Gambetta, 76183 ROUEN Cedex

Publications

1. Fréret M, Drouot L, Obry A, Ahmed-Lacheheb S, Dauly C, Adriouch S, Cosette P, Authier FJ, and O. Boyer. Overexpression of MHC class I in muscle of lymphocyte-deficient mice causes a severe myopathy with induction of the unfolded protein response. Am J Pathol. 2013 Sep;183(3):893-904.

2. TABBENE, O., GHARBI, D., KARKOUCH, I., ELKAHOUI, S, Al feddy, M.N., COSETTE, P., JOUENNE, T. and F. LIMAM. Antioxidative and DNA protective effects of bacillomycin D-like lipopeptides produced by B38 strain" Appl. Biochem. Biotechnol., 2012, 168: 2245-2256
3. Michaux C, Martini C, Shioya K, Ahmed Lecheheb S, Budin-Verneuil A, Cosette P, Sanguinetti M, Hartke A, Verneuil N, and Giard JC. CspR, a cold shock RNA-binding protein involved in the long-term survival and the virulence of *Enterococcus faecalis*. J Bacteriol. 2012 Dec;194(24):6900-8.
4. DAKHLAOUI-DKHIL, S., COQUET, L., COSETTE, P., ELKAHOUI, S., CHAN TCHI SONG, P., VAUDRY, D., SAHLI HANNACHI, A., TRIFI, N., LIMAM, F. and T. JOUENNE. The Date Palm (*Phoenix dactylifera* L.) leaf proteome: identification of a gender biomarker to screen male parents. Plant Omics J. 2013, 194: 6900-6908
5. Bertrand J, Tennoune N, Marion-Letellier R, Goichon A, Chan P, Mbodji K, Vaudry D, Déchelotte P, and M. Coëffier. Evaluation of ubiquitinated proteins by proteomics reveals the role of the ubiquitin proteasome system in the regulation of Grp75 and Grp78 chaperone proteins during intestinal inflammation. Proteomics. 2013 Sep 9. doi: 10.1002.
6. Goichon A, Chan P, Lecleire S, Coquard A, Cailleux AF, Walrand S, Lerebours E, Vaudry D, Déchelotte P, and M. Coëffier. An enteral leucine supply modulates human duodenal mucosal proteome and decreases the expression of enzymes involved in fatty acid beta-oxidation. J Proteomics. 2013, 78:535-44
7. GHALI, W., VAUDRY, D., JOUENNE, T. and M.N. MARZOUKI. Assesments of cyto-protective, antiproliferative and antioxidant potential of medicinal plant *Jatropha poodagrica*. Indust Crops Prod. 2013, 44: 111-118.
8. MACHADO, I., COQUET, L., JOUENNE T and M.O. PEREIRA. Proteomic approach to *Pseudomonas aeruginosa* adaptive resistance to benzalkonium chloride. J. Proteomics, 2013, 89:273-279.
9. Mathieu-Rivet E, Scholz M, Arias C, Dardelle F, Schulze S, Le Mauff F, Teo G, Hochmal AK, Blanco-Rivero A, Loutelier-Bourhis C, Kiefer-Meyer MC, Fufezan C, Burel C, Lerouge P, Martinez F, Bardor M, and M. Hipple. Exploring the N-glycosylation pathway in *Chlamydomonas reinhardtii* unravels novel complex structures. Mol Cell Proteomics. 2013, 12(11):3160-83.
10. CONLON, J.M., REINERT, L.K., MECHKARSKA, M., PRAJEEP, M., MEETANI, M., COQUET, L., JOUENNE, T., HAYES, M.P. PADGETT-FLOHR G. and L.A. ROLLINS-SMITH. Evaluation of the skin peptide defenses of the Oregon spotted frog *Rana pretiosa* against infection by the chytrid fungus *Batrachochytrium dendrobatidis*. J. Chem. Ecol. 2013, 39: 797-805.
11. ALERON, L., KHEMIRI, A., KOUBAR, M., LACOMBE, C., COQUET, L., COSETTE, P., JOUENNE T. and J. FRERE. VBNC *Legionella pneumophila* cells are still able to produce virulence proteins. Wat. Res., 2013, 47:6606-6617.
12. Fourquez, M., Devez, A., Schaumann, A., Gueneugues, A., JOUENNE, T., Obernosterer, I., and S. Blain. Impacts of iron limitation on the carbon metabolism in oceanic and coastal heterotrophic bacteria. Limnol. Oceanograph., sous presse.
13. Khemiri, A., Ben Mlouka, A., Adrien Josso, A., Naudin, B., Franck, X., Chan Tchi Song, P., Jouenne, T. and P. Cosette. N-glycosidase treatment with 18O labeling and de novo sequencing argues for flagellin FliC glycopolymerism in *Pseudomonas aeruginosa*. Analytical and Bioanalytical Chemistry, sous presse
14. CONLON, J.M., PRAJEEP, M., MECHKARSKA, M., COQUET, L., LEPRINCE, J., JOUENNE, T., VAUDRY, H. and J.D. KING. Characterization of the host-defense peptides from skin secretions of Merlin's clawed frog *Pseudhymenochirus merlini*: insights into phylogenetic relationships among the Pipidae, Comp. Biochem. Physiol., part D: Genomics-Proteomics, 2013, 8: 352-357.
15. CHAHED, H., EZZINE, A., BEN MLOUKA, A., HARDOUIN, J., JOUENNE, T. and M.N. MARZOUKI. Biochemical characterization, molecular cloning, and structural modeling of an interesting β -1,4-glucanase from *Sclerotinia sclerotiorum*. Mol. Biotechnol., sous presse.
16. KHEMIRI, A., AHMED LECHEHEB, S., HAUDIN, B., JOUENNE, T. and P. COSETTE. Proteomic regulations during *Legionella pneumophila* biofilm development: decrease of virulence factors and enhancement of response to oxidative stress. J. Wat. Health., sous presse.

Brevet

- VITTECOQ O, COSETTE, P. et al. Combinaison de marqueurs protéique prédictifs de réponse à un traitement (Etanercept) pour des patients souffrant de polyarthrite rhumatoïde (numéro de dépôt EP13305778.6.)

Congrès Internationaux:

1. NAIT CHANANE, Y., JOUENNE, T. and E. DE. Decreasing *Acinetobacter baumannii* biofilm formation by inhibiting pili development. Biofilms 5 Congress, Paris, 10-12 décembre 2012.

Communications par affiches

1. BEN MLOUKA, A., COSETTE, P., DE, E. and T. JOUENNE. Characterization of a new system "BAC" invilved in biofilm formation and rhamnolipids secretion in *P. aeruginosa*. Biofilms 5 Congress, Paris, 10-12 décembre 2012
2. AHMED-LECHEHEB, S., KHEMIRI, A., HARDOUIN, J., JOUENNE, T. and P. COSETTE. Proteomic regulations during *L. pneumophila* biofilm development. Biofilms 5 Congress, Paris, 10-12 décembre 2012
3. NAIT CHABANE, Y., ALEXANDRE, S., JOUENNE T. and E. DÉ. Decreasing *Acinetobater baumannii* formation by inhibiting pili development/ Cologne, 19-21 juin 2013
4. Ouidir, T., Jarnier, F Cosette, P., Jouenne, T. and J. Hardouin. N-terminal acetylome of *Pseudomonas aeruginosa* PA14. European Proteomics Association 2013 Scientific meeting, Saint-Malo, 14-17 Octobre 2013.
5. Ouidir, T., Jarnier, F., Cosette, P., Jouenne, T. and J. Hardouin. Characterization of phosphoproteins involved in *Pseudomonas aeruginosa* PA14 adaptation. European Proteomics Association 2013 Scientific meeting, Saint-Malo, 14- 2013.
6. Porte, B., Obry, A., Jarnier, F., Hardouin, J., Hauchecorne, M., Dupré, N., Chatelain, C., Cosette, P., Gonzalez B.J. and P. Leroux. Proteomic analysis of mice brain microvessels between pups and adult: A way to unravel neonate vulnerability to injurious processes. European Proteomics Association 2013 Scientific meeting, Saint-Malo, 14-17 Octobre 2013.
7. Chatelain, C., Porte, B., Hardouin, J., Hauchecorne, M., Jarnier, F., Marret, S., Cosette P. and P. Leroux. Proteomic characterization of differentiation in neonate and adult micro-vascular endothelial cells. European Proteomics Association 2013 Scientific meeting, Saint-Malo, 14-17 Octobre 2013.
8. Lesouhaitier O, Rosay T, Blier AS, Hillion M, Jaouen T, Sergent JA, Cosette P, and M.G.J. Feuilloley. The natriuretic peptides, a family of mammalian hormones, enhance *Pseudomonas aeruginosa* PAO1 virulence: deciphering of intrabacterial pathway. ESF-EMBO Symposium Bacterial Networks, Pultusk, Poland, 16-21 March 2013.
9. Rosay T, Blier A-S, Barbey C, Decoin V., Cosette P, Ben Mlouka M, Hardouin J, Sergent J.A, Mijouin L, Hillion M, Hulen C, Feuilloley MGJ, and Lesouhaitier O.. AmiC could be a putative *Pseudomonas aeruginosa* sensor for the C-type natriuretic peptide, a mammalian hormone. 5th FEMS Congress of European Microbiologists. Leipzig, Germany, July 21-25th 2013.
10. Rosay T, Mijouin L, Hardouin J, Bazire A, Hoffmann B, Mooij M, O'Gara F, Vieillard J, Dufour A, Cosette P, Feuilloley MGJ and O. Lesouhaitier. AmiC : A putative bacterial sensor for the C-type natriuretic peptide(CNP), a eukaryotic hormone modulating *Pseudomonas aeruginosa* virulence. 14th International Conference on *Pseudomonas*. Lausanne, Switzerland, 7-11th September 2013.

Communications orales

1. OUIDIR, T., JARNIER, F., COSETTE, P., JOUENNE, T. et J. HARDOUIN. Characterization of phosphoproteins involved in *Pseudomonas aeruginosa* PA14 adaptation. 2ème Journée Scientifique de l'IRIB, Mont-Saint-Aignan, le 21 juin 2013.

Communications par affiches

1. ABBES, I., RIHOUEY, C., JOUENNE T. and S. ALEXANDRE. Study of the inner membrane lipids from *Pseudomonas aeruginosa* with the bac mutation . 2ème Journée Scientifique de l'IRIB, Mont-Saint-Aignan, le 21 juin 2013.
2. CHAN, P., COSETTE, P., MASSON, J., JARNIER, F., GORECKI, D., HARDOUIN, J., JOUENNE T. et D. VAUDRY. The Pissaro proteomic platform of Rouen: a network of expertise and technology resources for identification and quantification of biomolecules (peptides, hormones, ...) from small sample volumes. 2ème Journée Scientifique de l'IRIB, Mont-Saint-Aignan, le 21 juin 2013.
3. KHEMIRI, A., NAUDIN, B., FRANCK, X., TCHAN TCHI SONG, P., JOUENNE T. et P. COSETTE. Une approche combinée d'enrichissement, de marquage 18O et de séquençage de novo suggèrent un glycopolymorphisme de la flagelline FlhC chez *Pseudomonas aeruginosa*. 2ème Journée Scientifique de l'IRIB, Mont-Saint-Aignan, le 21 juin 2013.
4. SMINE, S., COSETTE, P., JOUENNE, T., LIMAM, F. et E. AOUANI. Protective effect of compound A in the obesity induced by a lipid enrich diet (HFD) using proteomic investigations. 2ème Journée Scientifique de l'IRIB, Mont-Saint-Aignan, le 21 juin 2013.

5. TNANI, H., LEBRUN, L., COSETTE, P. et T. JOUENNE. Effect of catechin on viral activity : chracterization of the phage T4 proteome under polyphenols exposure. 2ème Journée Scientifique de l'IRIB, Mont-Saint-Aignan, le 21 juin 2013.
6. ZEHLILA, A., COSETTE, P., DE, E., JOUENNE T. et M. AMRI. Role of proteins in the green alga *Ulva rigida* in antioxidant activities. 2ème Journée Scientifique de l'IRIB, Mont-Saint-Aignan, le 21 juin 2013.

3. RNMM : CERMN

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

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

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

UPRES EA4259, FR-CNRS 3038. Plateforme de Chémoinformatique

Publications de rang A

1. Assessment of the genotoxic and carcinogenic potentials of 3-aminothiophene derivatives using in vitro and in silico methodologies. Alban Lepailleur, Ronan Bureau, Marie-Pierre Halm-Lemeille, Michel Bouquet, Régis Pecquet, Christine Paris-Soubayrol, Jérémie Le. Goff, Véronique André, Yannick Lecluse, Pierre Lebailly, Marie-Aline Maire and Paule Vasseur. *Journal of applied toxicology*. DOI 10.1002/jat.2938.
2. Conformation Control of Abiotic alpha-Helical Foldamers. Perato, J. Fogha, M. Sebban, AS. Voisin-Chiret, J. Sopkova-de Oliveira Santos, H. Oulyadi, S. Rault . *J. Chem. Inf. Model.*, 2013, 53 (10), 2671-2680.
3. Acute toxicity of 8 antidepressants : what is their mode of action ? Minguez L., Farcy E., Ballandone C., Lepailleur A., Serpentine A., Lebel JM., Bureau R., Halm-Lemeille MP. *Chemosphere* , 2013, accepté.
4. Cheikh N., Villemin D., Bar N., Lohier J.-F., Choukchou-Braham N., Mostefa-Kara B., Sopkova J. A serendipitous conversion of enamino lactone nitriles with primary amines: a new synthesis of substituted 2-aminopyridine derivatives. *Tetrahedron*, 2013, 69(3), 1234-1247.
5. Jourdan J.-P., Rochais C., Legay R., Sopkova de Oliveira Santos J., Dallemagne P. An unusual boron tribromide-mediated, one-pot bromination/cyclization reaction. Application to the synthesis of a highly strained cyclopenta[1,3]cyclopropa[1,2-b]pyrrolizin-8-one. *Tetrahedron Letters*, 2013, 54, 1133-113
6. Genest D., Rochais C, Lecoutey C., Sopkova-de Oliveira Santos J., Ballandone C., Butt-Gueulle S., Legay R., Since M., and Patrick Dallemagne P. Design, Synthesis and Biological Evaluation of Novel Indano- and Thiaindano-Pyrazoles with Potential Interest in Alzheimer's Disease. *Med. Chem. Commun.*, 2013, 4, 925-931.

Articles dans des revues professionnelles spécialisées

1. Cuissart, B.; Poezevara, G.; Crémilleux, B.; Lepailleur, A.; Bureau, R. Emerging Patterns as Structural Alerts for Computational Toxicology. In *Contrast Data Mining: Concepts, Algorithms and Applications*, Dong, G. & Bailey, J., Eds.; Taylor & Francis Group, 2013, pp. 259-270.
2. Lepailleur, A.; Poezevara, G.; Bureau, R. Automated detection of structural alerts (chemical fragments) in (eco)toxicology (Revue). *Comput. Struct. Biotechnol. J.* 2013, 5, e201302013.

Communications dans des congrès internationaux

1. Schietgat, L.; Cuissart, B.; Lepailleur, A.; De Grave, K.; Crémilleux, B.; Bureau, R.; Ramon, J. Comparing chemical fingerprints for ecotoxicology. 6èmes Journées de la Société Française de Chémoinformatique (SFCi), Nancy (France), 10-11 Octobre 2013.
2. Minguez L; Serpentine A, Lebel JM, Bureau, R., Halm MP. Projet pharm@ecotox. Workshop résidus médicamenteux dans l'environnement. Albi 5-6 decembre 2013.
3. Minguez L., Halm-Lemeille MP., Bureau R., Lebel JM., Serpentine A. Immunotoxicity assessment of four antidepressant on primary cultures of abalone haemocytes (*Haliotis tuberculata*). Congrès Primo17, Faro, Portugal, 5-8 mai 2013
4. Inhibitors Design of Mcl-1 and BH3-only Interactions. Fogha J., Perato S., Voisin-Chiret A.-S, Rault S., Bureau R. and Sopkova-de Oliveira Santos J. XVIIIème congrès du GGMM, 21-23 mai 2013, Oléron, France.
5. Molecular basis of agonist docking in a human GPR103 homology model: site-directed mutagenesis and structure-activity relationship studies. Leprince J., Dulin F., Neveu C., Galas L., Lefranc B., Chuquet J.,

- Vaudry D., Bureau R., Sopkova-de Oliveira Santos J., Vaudry H. 2nd Annual Meeting of the GDR RCPG-Physiomed, Illkirch, France, October 14-16 2013 .
6. Molecular basis of agonist docking in a GPR103 homology model by site-directed mutagenesis and SAR studies. Neveu C., Dulin F., Lefranc B., Galas L., Calbrix C., Gach K., Bureau R., Chuquet J., Boutin J. A., Vaudry H., Vaudry D., Sopkova de-Oliveira Santos J. and Leprince J. 18ème Congrès du GFPP, 26-31 Mai 2013, Sète 2013.
 7. Conformational study of the human urotensin-II and Ull-related peptide. Sopkova-de Oliveira Santos J., Lepaillieur A., Milazzo-Segalas I., and Bureau R. Paris foldamers 2013 symposium, 10-12 Avril 2013, Paris, France.

Communications dans des congrès nationaux

1. F. Dulin, R. Bureau, MP Halm. 5e Journées scientifiques de l'UFR des Sciences pharmaceutiques. 7 Novembre 2013. Mise en évidence in silico de nouvelles molécules antiviro pour protéger les abeilles.
2. Comparative analysis of pharmacophores and its implication in drug design: Application to aminergic GPCR subtypes. Lepaillieur, A.; Rault, S.; Bureau, R. 2nd Annual Meeting of the GDR-3545: RCPG-Physio-Med, Strasbourg (France), 14-16 Octobre 2013.
3. Interactions between vasopressin and Arginine Vasopressin Receptor 2. Conformational analysis and docking studies. Jamous Delépée, C.; Sopkova de Oliveira Santos, J.; Dulin, F.; Lepaillieur, A.; Haensele, E.; Banting, L.; Clark, T.; Bureau, R. 6èmes Journées de la Société Française de Chémoinformatique (SFCi), Nancy (France), 10-11 Octobre 2013.
4. Définition d'un premier modèle global pour déterminer l'écotoxicité de substances chimiques sur les algues. Villain, J.; Lozano, S.; Halm, M.P.; Lepaillieur, A.; Durieu, G.; Bureau, R. 6èmes Journées de la Société Française de Chémoinformatique (SFCi), Nancy (France), 10-11 Octobre 2013.

Thèses (en cours ou achevées en 2013)

- Jade Fogha - 2011- 2014 - Oligopyridines, mimes d'hélice α .
- Jonathan Villain - 2012 - 2015 - Relations structure-activité en écotoxicologie.

4. RNMM : UMR 6014 COBRA**Intitulé : Equipe Groupe Matériaux organiques**

Responsable : Pr. G. Dupas

Laboratoire : Groupe Matériaux organiques, IRCOF-INSA de Rouen

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

Voir projet du même porteur : 2011005.

5. RNMM : UMR 6014 COBRA**Intitulé : Equipe Analyse et Modélisation**

Responsables : OULYADI Hassan - SEGALAS-MILAZZO Isabelle

Laboratoire : Equipe «Analyse et Modélisation»

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

Publications de rang A

1. F. Maire, G. Coadou, L. Cravello & C.M. Lange, Traveling Wave Ion Mobility Mass Spectrometry Study of Low Generation Polyamidoamine Dendrimers. J. Am. Soc. Mass Spectrom. (2013), 24, 238-48
2. S. Perato, J. Fogha, M. Sebban, A.-S. Voisin-Chiret, J. Sopkova-de Oliveira Santos, H. Oulyadi & S. Rault, Conformation Control of Abiotic α -Helical Foldamers, J. Chem. Inf. Model. (2013), 53, 2671-2680

Communications dans des congrès internationaux (par affiche)

1. J. Sopkova-de Oliveira Santos, A. Lepailleur, I. Ségalas-Milazzo & R. Bureau, Conformational study of the human urotensin-II and Ull-related peptide, Foldamers meeting, Paris (France), 9-12 avril 2013.
2. A. Marotte, L. Guilhaudis, P. Ganesan, C. Neveu, B. Lefranc, J. Leprince, H. Vaudry & I. Ségalas-Milazzo, Structural characterization of 26RFa fragments - Tools for the design of new ligands of GPR103, IS:CE-Chem, Final Event, Southampton (Royaume-Uni), 4-6 septembre 2013.

Thèses achevées en 2013

- Amélie Marotte – 2010-2013 – thèse soutenue le 13 décembre 2013, « Conception rationnelle de nouveaux ligands du GPR103, un récepteur couplé à une protéine G et cible du 26RFa ».