

# Christine BONAL

[UFR de Chimie\(https://chimie.uca.fr/contacts-et-plan-dacces\)](https://chimie.uca.fr/contacts-et-plan-dacces)

## Coordonnées

<b>Tél</b>	+33473407165
<b>Fax</b>	+33 4 73 40 71 85
<b>Mail</b>	<a href="mailto:Christine.BONAL@uca.fr">Christine.BONAL@uca.fr</a> (mailto:Christine%2EBONAL%40uca%2Efr)

## Activités / CV

### Fonctions à l'ICCF

- Membre de l'équipe [Thermodynamique et Interactions Moléculaires \(TIM\)](https://iccf.uca.fr/recherche/thermodynamique)(https://iccf.uca.fr/recherche/thermodynamique)
- Membre de la thématique [Architecture Moléculaires aux Interfaces \(AMI\)](https://iccf.uca.fr/recherche/thermodynamique/architectures-aux-interfaces)(https://iccf.uca.fr/recherche/thermodynamique/architectures-aux-interfaces)

## Corps

MC UCA

## Informations complémentaires

Publications HAL de Christine,BONAL de la collection PRES\_CLERMONT

2020

titre

[Molecular Description of Grafted Supramolecular Assemblies on Gold Surfaces: Effect of Grafting Points and Chain Lengths](https://hal.uca.fr/hal-03028749)(<https://hal.uca.fr/hal-03028749>)

**auteur**

Ludovic Garnier, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*ACS Omega*, ACS Publications, 2020, 5 (27), pp.16628-16634. [10.1021/acsomega.0c01453](https://doi.org/10.1021/acsomega.0c01453)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.0c01453>)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1021/acsomega.0c01453](https://doi.org/10.1021/acsomega.0c01453)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.0c01453>)

**Accès au texte intégral et bibtex**

(<https://hal.uca.fr/hal-03028749/file/pub14-v4.pdf>) (<https://hal.uca.fr/hal-03028749/bibtex>)

2019

**titre**

[Thermodynamics of Supramolecular Associations with Macrocyclic Water-Soluble Hosts](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02407118)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02407118>)

**auteur**

Ludovic Garnier, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*ACS Omega*, ACS Publications, 2019, 4 (16), pp.16899-16905. [10.1021/acsomega.9b02136](https://doi.org/10.1021/acsomega.9b02136)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.9b02136>)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1021/acsomega.9b02136](https://doi.org/10.1021/acsomega.9b02136)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.9b02136>)

**Accès au bibtex**

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02407118/bibtex>)

2018

**titre**

[Associations of Water-Soluble Macrocyclic Hosts with 4-Aminoazobenzene: Impact of pH](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02407186)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02407186)

**auteur**

Ludovic Garnier, Sabine Sarraute, Yaël Israëlï, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Journal of Physical Chemistry B*, American Chemical Society, 2018, 122 (50), pp.11953-11961.

[10.1021/acs.jpcc.8b09127](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b09127)(https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b09127)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1021/acs.jpcc.8b09127](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b09127)(https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b09127)

**Accès au bibtex**

 (https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02407186/bibtex)

**titre**

[Calculations of potential of mean force: application to ion-pairs and host-guest systems](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01849616)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01849616)

**auteur**

Ludovic Garnier, Julien Devémy, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Molecular Physics*, Taylor & Francis, 2018, 116 (15-16), pp.1998 - 2008. [10.1080/00268976.2018.1442593](https://doi.org/10.1080/00268976.2018.1442593)

[2018.1442593](https://doi.org/10.1080/00268976.2018.1442593)(https://dx.doi.org/10.1080/00268976.2018.1442593)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1080/00268976.2018.1442593](https://doi.org/10.1080/00268976.2018.1442593)(https://dx.doi.org/10.1080/00268976.2018.1442593)

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01849616/bibtex>)

2014

**titre**

[Host-Guest Complexation in the Ferrocenyl Alkanethiols-Thio -Cyclodextrin Mixed Self-Assembled Monolayers](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00987570)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00987570>)

**auteur**

Gaëlle Filippini, Florent Goujon, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Journal of Physical Chemistry C*, American Chemical Society, 2014, 118, pp.3102-3109. [10.1021/jp4114128](https://doi.org/10.1021/jp4114128)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp4114128>)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1021/jp4114128](https://doi.org/10.1021/jp4114128)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp4114128>)

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00987570/bibtex>)

2013

**titre**

[Atomistic and energetic descriptions of self-assembled monolayers of differently endgroup-functionalized alkanethiols adsorbed on the gold substrate by using molecular simulations.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00950521)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00950521>)

**auteur**

Gaëlle Filippini, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Soft Matter*, Royal Society of Chemistry, 2013, 9, pp.5099-5109

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00950521/bibtex>)

2012

**titre**

[Methodological approaches for the free energy calculations in electroactive SAMs](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00789521)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00789521>)

**auteur**

Gaëlle Filippini, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Molecular Physics*, Taylor & Francis, 2012, pp.1081-1095

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00789521/bibtex>)

**titre**

[Energetic Competition Effects on Thermodynamic Properties of Association between beta-CD and Fc Group: A Potential of Mean Force Approach](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00786116)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00786116>)

**auteur**

Gaëlle Filippini, Florent Goujon, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Journal of Physical Chemistry C*, American Chemical Society, 2012, 116, pp.22350-22358

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

—

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00786116/bibtex>)

**titre**

[Why is the association of supramolecular assemblies different under homogeneous and heterogeneous conditions?](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00789520)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00789520>)

**auteur**

Gaëlle Filippini, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Physical Chemistry Chemical Physics*, Royal Society of Chemistry, 2012, 14, pp.10122-10124

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00789520/bibtex>)

2010

**titre**

[Connection Between Electrochemistry and Molecular Simulation : Application to the Chain Length Effect on Redox Reactions of SAMs](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477637)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477637>)

**auteur**

Christine Bonal, Yaël Israëli, Florent Goujon, Benoit Limoges, Patrice Malfreyt

**article**

*Langmuir*, American Chemical Society, 2010

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477637/bibtex>)

**titre**

[Molecular Dynamics Simulations of Ferrocene-Terminated Self-Assembled Monolayers](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477608)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477608)

**auteur**

F. Goujon, Christine Bonal, Benoit Limoges, Patrice Malfreyt

**article**

*Journal of Physical Chemistry B*, American Chemical Society, 2010, sous presse

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477608/bibtex>)

**titre**

[Toward a Prediction of the Redox Properties of Electroactive SAMs : a Free Energy Calculation by Molecular Simulation](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477625)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477625)

**auteur**

Gaëlle Filippini, F. Goujon, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Journal of Physical Chemistry B*, American Chemical Society, 2010

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477625/bibtex>)

2009

**titre**

[Study of self-assembled monolayers of gold of ferrocene-terminated thiols](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477713)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477713)

**auteur**

Florent Goujon, Benoit Limoges, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Thermodynamics 2009*, Sep 2009, Londres, United Kingdom

**typdoc**

Conference papers

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477713/bibtex>)

**titre**

[Calculation of the long range interactions for interfacial properties](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00515064)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00515064>)

**auteur**

Florent Goujon, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Molecular Simulation*, Taylor & Francis, 2009, 35 (07), pp.538-546. [10.1080/08927020802600727](https://doi.org/10.1080/08927020802600727)(<https://dx.doi.org/10.1080/08927020802600727>)



**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1080/08927020802600727](https://doi.org/10.1080/08927020802600727)(<https://dx.doi.org/10.1080/08927020802600727>)

**Accès au texte intégral et bibtex**

 ([https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00515064/file/PEER\\_stage2\\_10.1080%20252F08927020802600727.pdf](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00515064/file/PEER_stage2_10.1080%20252F08927020802600727.pdf))  (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00515064/bibtex>)

**titre**

[Calculation of the long range interactions for interfacial properties](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00341501)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00341501>)

**auteur**



F. Goujon, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Molecular Simulation*, Taylor & Francis, 2009, 35, pp.538

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00341501/bibtex>)

**titre**

[Description of Ferrocenylalkylthiol SAMs on Gold by Molecular Dynamics Simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359047)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359047>)

**auteur**

Florent Goujon, Christine Bonal, Benoit Limoges, Patrice Malfreyt

**article**

*Langmuir*, American Chemical Society, 2009, 25, pp.9164

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359047/bibtex>)

2008

**titre**

[Calculation of the long range interactions for interfacial properties](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00341504)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00341504>)

**auteur**

Florent Goujon, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*CCP5 annual meeting "Surfaces and Interfaces"*, Sep 2008, London, United Kingdom

**typdoc**

Conference papers

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00341504/bibtex>)

**titre**

[Molecular simulations of grafted metal-chelating monolayers: methodology, structure and energy](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00513214)  
(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00513214>)

**auteur**

Florent Goujon, Christine Bonal, Benoit Limoges, Patrice Malfreyt

**article**

*Molecular Physics*, Taylor & Francis, 2008, 106 (11), pp.1397-1411. [10.1080/00268970802235557](https://doi.org/10.1080/00268970802235557)  
(<https://dx.doi.org/10.1080/00268970802235557>)



**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1080/00268970802235557](https://dx.doi.org/10.1080/00268970802235557)(<https://dx.doi.org/10.1080/00268970802235557>)

**Accès au texte intégral et bibtex**

 ([https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00513214/file/PEER\\_stage2\\_10.1080%252F00268970802235557.pdf](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00513214/file/PEER_stage2_10.1080%252F00268970802235557.pdf))  (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00513214/bibtex>)

**titre**

[Molecular simulations of monolayers of metal-chelating ligands grafted to electrodes](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293985)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293985>)

**auteur**

Christine Bonal, F. Goujon, Benoit Limoges, Patrice Malfreyt

**article**

*ESAT 2008*, 2008, Cannes, France. pp.231

**typdoc**

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293985/bibtex>)

**titre**

[Molecular Dynamics Description of Grafted Monolayers: Effect of the Surface Coverage](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00341494)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00341494>)

**auteur**

F. Goujon, Christine Bonal, Benoit Limoges, Patrice Malfreyt

**article**

*Journal of Physical Chemistry B*, American Chemical Society, 2008, 112, pp.14221

**typdoc**

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00341494/bibtex>)

**titre**

[Molecular simulations of grafted metal-chelating monolayers: methodology, structure and energy.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293501)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293501>)

**auteur**

F. Goujon, Christine Bonal, Benoit Limoges, Patrice Malfreyt

**article**

*Molecular Physics*, Taylor & Francis, 2008, 106, pp.1397

**typdoc**

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293501/bibtex>)

**titre**

[Simulation moléculaire de ligands immobilisés à la surface d'une électrode](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293944)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293944>)

**auteur**

Christine Bonal, Pierre Fayon, F. Goujon, Benoit Limoges, Patrice Malfreyt

**article**

*Journées d'électrochimie 2007*, Jul 2007, Lyon, France. pp.70

**typdoc**

Conference papers

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293944/bibtex>)

**titre**

[Computational and Experimental Investigations of Supramolecular assemblies of p-Sulfonatocalix\[4\]arene Organized by Weak Forces](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293450)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293450>)

**auteur**

Aziz Ghoufi, Laure Pison, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

**article**

*Journal of Physical Chemistry B*, American Chemical Society, 2007, 111 (11478-11485), 7 p

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293450/bibtex>)

**titre**

[Molecular simulations of monolayers of metal-chelating ligands grafted to electrode](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293962)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293962>)

**auteur**

F. Goujon, Christine Bonal, Benoit Limoges, Patrice Malfreyt

**article**

*Thermodynamics 2007*, 2007, France. pp.207

**typdoc**

Conference papers

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00293962/bibtex>)

2006

**titre**

[Thermodynamics of Complexation of Tetraalkylammonium and Rare-earth Cations with two Sulfonatocalix\[4\]arenes \(n=4 and 6\) in Aqueous Solution](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359044)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359044>)

**auteur**

Christine Bonal, Patrice Malfreyt, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers

**article**

*Supramolecular Chemistry*, Taylor & Francis: STM, Behavioural Science and Public Health Titles, 2006, 18 (3), pp.183-190

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359044/bibtex>)

**titre**

[Thermodynamics of complexation of tetraalkylammonium and rare-earth cations with two sulfonatocalix\[n\]arenes \(n=4 and 6\) in aqueous solution.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159707)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159707>)

**auteur**

Christine Bonal, Patrice Malfreyt, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers

**article**

*Supramolecular Chemistry*, Taylor & Francis: STM, Behavioural Science and Public Health Titles, 2006, 18 (3), pp.183-190

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159707/bibtex>)

2004

**titre**

[Gibbs free energy perturbation calculations: an application to the binding of alkylammonium cations by a water-soluble calixarene.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159714)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159714>)

**auteur**

Aziz Ghoufi, Christine Bonal, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers, Patrice Malfreyt

**article**

*Journal of Physical Chemistry B*, American Chemical Society, 2004, 108 (31), pp.11744-11752

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159714/bibtex>)

**titre**

[Structures and energetics of complexes of the p-sulfonatocalix\[4\]arene with ammonium, alkylammonium and tetraalkylammonium cations in water using molecular dynamics simulations.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159716)(  
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159716>)

**auteur**

Aziz Ghoufi, Christine Bonal, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers, Patrice Malfreyt

**article**

*Journal of Physical Chemistry B*, American Chemical Society, 2004, 108 (16), pp.5095-5104

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159716/bibtex>)

2002

**titre**

[Complexation of the La\(III\) cation by p-sulfonatocalix\[4\]arene. A <sup>139</sup>La NMR study.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319213)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319213>)

**auteur**

Yaël Israëlï, Christine Bonal, Christian Detellier, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers

**article**

*Canadian Journal of Chemistry*, NRC Research Press, 2002, 80, pp.163-168

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319213/bibtex>)

**titre**

[Molecular dynamics simulations of p-sulfonatocalix\[4\]arene complexes with inorganic and organic cations in water: a structural and thermodynamic study.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315503)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315503>)

**auteur**

Alexandre Mendes, Christine Bonal, Nicole Morel-Desrosiers, Jean-Pierre Morel, Patrice Malfreyt

**article**

*Journal of Physical Chemistry B*, American Chemical Society, 2002, 106, pp.4516-4524

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315503/bibtex>)

2001

**titre**

[Binding of inorganic and organic cations by p-sulfonatocalix\[4\]arene in water: a thermodynamic study](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319214)(  
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319214>)

**auteur**

Christine Bonal, Yaël Israëlî, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers

**article**

*J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2*, 2001, pp.1075-1078

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319214/bibtex>)

1998

**titre**

[Interactions between lanthanide cations and nitrate anion in water. Part 2.- Microcalorimetric  
determination of the Gibbs energies, enthalpies and entropies of complexation of Y<sup>3+</sup> and trivalent  
lanthanide cations.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319216)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319216>)

**auteur**



Christine Bonal, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers

**article**

*Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions*, Royal Society of Chemistry, 1998, 94, pp. 1431-1436

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319216/bibtex>)

**titre**

[Competitive complexation of lanthanide cations by xylitol and nitrate anion in aqueous solution: a microcalorimetric investigation](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319217)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319217>)

**auteur**

Christine Bonal, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers

**article**

*Journal of Solution Chemistry*, Springer Verlag (Germany), 1998, 27, pp.361-372

**typdoc**

Journal articles

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00319217/bibtex>)

Rechercher

```
/**/ body ul.objets li { width: 48%; display: inline-block; vertical-align: top;} body ul.objets li:nth-child(odd){ margin-right:1em;} /**/
```

<https://iccf.uca.fr/annuaire/christine-bonal>(<https://iccf.uca.fr/annuaire/christine-bonal>)