

M. Alain DEQUIDT

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

Coordonnées

Tél	+33473407194
Mail	Alain.DEQUIDT@uca.fr (mailto:Alain%2EDEQUIDT%40uca%2Efr)

Thèmes de recherche

Physicien de formation, ma recherche porte sur les propriétés dynamiques de fluides complexes dont la relaxation est lente (liquides ioniques, polymères, cristaux liquides). Il s'agit essentiellement de modélisation moléculaire et de simulations. Les temps accessibles en simulation avec une résolution atomique sont souvent trop courts pour déduire les propriétés dynamiques avec précision. Une partie de ma recherche consiste donc en du développement de modèles gros grains par une approche multi-échelle. Ces modèles sont plus adaptés pour simuler des temps longs ou des systèmes spatialement hétérogènes à l'échelle nanométrique (lubrification, interfaces, hétérogénéités dynamiques).

Activités / CV

- 2001-2005 : normalien de l'École Normale Supérieure de Lyon.
- 2004 : agrégation de sciences physiques.
- 2005 : Master « Physique des liquides et matière molle », Université de Paris VI.
- 2005-2008 : doctorat de Physique, laboratoire de physique de l'École Normale Supérieure de Lyon.
- 2008-2011 : postdoc, laboratoire des polymères et matériaux avancés, unité mixte Rhodia-CNRS, Saint-Fons
- 2011-2016 : maître de conférences titulaire d'une chaire CNRS-Université Blaise Pascal, Institut de Chimie de Clermont-Ferrand.

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 Alain,DEQUIDT de la collection PRES_CLERMONT

2022

titre

[Insulin Adsorption onto PE and PVC Tubings](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03682647)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03682647)

auteur

Nicolas Tokhadzé, Meriem Sahnoune, Julien Devémy, Alain Dequidt, Florent Goujon, Philip Chennell, Valérie Sautou, Patrice Malfreyt

article

ACS Applied Bio Materials, ACS Publications, 2022, [10.1021/acsabm.2c00029](https://dx.doi.org/10.1021/acsabm.2c00029)(https://dx.doi.org/10.1021/acsabm.2c00029)



typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acsabm.2c00029](https://dx.doi.org/10.1021/acsabm.2c00029)(https://dx.doi.org/10.1021/acsabm.2c00029)

Accès au texte intégral et bibtex

 <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03682647/file/pub3-v4.pdf>  <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03682647/bibtex>

titre

[Heliconical-fluctuation-induced compensation point in the diluted cholesteric phase of mixtures containing the flexible dimer CB7CB](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03616332)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03616332>)

auteur

Patrick Oswald, Alain Dequidt

article

Physical Review E, American Physical Society (APS), 2022, 105 (2), pp.024707. [10.1103/PhysRevE.105.024707](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.105.024707)(<https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.105.024707>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1103/PhysRevE.105.024707](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.105.024707)(<https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.105.024707>)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03616332/file/Oswald_Dequidt_PRE2022.pdf) (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03616332/bibtex>)

titre

[Predicting Mechanical Constitutive Laws of Elastomers with Mesoscale Simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03579023)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03579023>)

auteur

Gérald Munoz, Alain Dequidt, Nicolas Martzel, Ronald Blaak, Armel Mbiakop-Ngassa, Julien Devémy, Benoit Latour, Sébastien Garruchet, Florent Goujon, Etienne Munch, Patrice Malfreyt

article

Macromolecules, American Chemical Society, 2022, 55, 5 (1487-1494), pp.acs.macromol.1c02076. [10.1021/acs.macromol.1c02076](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02076)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02076>)



typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.macromol.1c02076](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02076)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02076>)

Accès au texte intégral et bibtex

 (https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03579023/file/meso_macromolecules.pdf)  (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03579023/bibtex>)

titre

[Drug Interactions with Plasticized PVCs](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03682638)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03682638>)

auteur

Meriem Sahnoune, Nicolas Tokhadzé, Sarah Ech Cherif El Kettani, Julien Devémy, Florent Goujon, Philip Chennell, Alain Dequidt, Christelle Goutaudier, Valérie Sautou, Patrice Malfreyt

article

ACS Applied Polymer Materials, American Chemical Society, inPress, [10.1021/acsapm.2c00532](https://doi.org/10.1021/acsapm.2c00532)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsapm.2c00532>)



typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acsapm.2c00532](https://doi.org/10.1021/acsapm.2c00532)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsapm.2c00532>)

Accès au texte intégral et bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03682638/file/pub1-v7.pdf>)  (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03682638/bibtex>)

2021

titre

[Rheological properties of polymer chains at a copper oxide surface: Impact of the chain length, surface coverage, and grafted polymer shape](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03542591)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03542591>)

auteur

José Solano Canchaya, Germain Clavier, Sébastien Garruchet, Benoit Latour, Nicolas Martzel, Julien Devémy, Florent Goujon, Alain Dequidt, Ronald Blaak, Etienne Munch, Patrice Malfreyt

article

Physical Review E, American Physical Society (APS), 2021, 104 (2), pp.024501. [10.1103/PhysRevE.104.024501](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.104.024501)(<https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.104.024501>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1103/PhysRevE.104.024501](https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.104.024501)(<https://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.104.024501>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03542591/bibtex>)

titre

[Strain induced crystallization of polymers at and above the crystallization temperature by coarse-grained simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03264435)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03264435>)

auteur

Hemanth Nagaraj, Germain Clavier, Benoit Latour, Alain Dequidt, Julien Devémy, Sébastien Garruchet, Florent Goujon, Nicolas Martzel, Ronald Blaak, Étienne Munch, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2021, 154 (23), pp.234902. [10.1063/5.0050562](https://dx.doi.org/10.1063/5.0050562)(<https://dx.doi.org/10.1063/5.0050562>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/5.0050562](https://dx.doi.org/10.1063/5.0050562)(<https://dx.doi.org/10.1063/5.0050562>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03264435/bibtex>)

titre

[Understanding and characterizing the drug sorption to PVC and PE materials](https://hal.uca.fr/hal-03229994)(<https://hal.uca.fr/hal-03229994>)

auteur

Meriem Sahnoune, Nicolas Tokhadzé, Julien Devémy, Alain Dequidt, Florent Goujon, Philip Chennell, Valérie Sautou, Patrice Malfreyt

article

ACS Applied Materials & Interfaces, Washington, D.C. : American Chemical Society, 2021, 13, pp. 18594-18603. [10.1021/acsami.1c03284](https://doi.org/10.1021/acsami.1c03284)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsami.1c03284>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acsami.1c03284](https://doi.org/10.1021/acsami.1c03284)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsami.1c03284>)

Accès au texte intégral et bibtex

(<https://hal.uca.fr/hal-03229994/file/pub1-v8.pdf>) (<https://hal.uca.fr/hal-03229994/bibtex>)

titre

[Assessing the derivation of time parameters from branched polymer coarse-grain model](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03264450)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03264450>)

auteur

Germain Clavier, Ronald Blaak, Alain Dequidt, Florent Goujon, Julien Devémy, Benoit Latour, Sébastien Garruchet, Nicolas Martzel, Étienne Munch, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2021, 154 (12), pp.124901. [10.1063/5.0039843](https://doi.org/10.1063/5.0039843)(<https://dx.doi.org/10.1063/5.0039843>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/5.0039843](https://doi.org/10.1063/5.0039843)(<https://dx.doi.org/10.1063/5.0039843>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03264450/bibtex>)

titre

[Heterogeneity Effects in Highly Cross-Linked Polymer Networks](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03159245)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03159245>)

auteur

Gérald Munoz, Alain Dequidt, Nicolas Martzel, Ronald Blaak, Florent Goujon, Julien Devémy, Sébastien Garruchet, Benoit Latour, Etienne Munch, Patrice Malfreyt

article

Polymers, MDPI, 2021, 13 (5), pp.757. [10.3390/polym13050757](https://doi.org/10.3390/polym13050757)(<https://dx.doi.org/10.3390/polym13050757>)



typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.3390/polym13050757](https://doi.org/10.3390/polym13050757)(<https://dx.doi.org/10.3390/polym13050757>)

Accès au texte intégral et bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03159245/file/polymers-13-00757-v2.pdf>) (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03159245/bibtex>)

titre

[Thermomechanical effects in liquid crystals](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02990190)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02990190>)

auteur

Patrick Oswald, Alain Dequidt, Guilhem Poy

article

ISTE-Wiley. *Liquid Crystals New Perspectives*, 2021, 9781789450408

typdoc

Book sections

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02990190/bibtex>)

2020

titre

[Backbone oriented anisotropic coarse grains for efficient simulations of polymers](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03109519)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03109519>)

auteur

Florent Goujon, Nicolas Martzel, Alain Dequidt, Benoit Latour, Sébastien Garruchet, Julien Devémy, Ronald Blaak, Étienne Munch, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2020, 153 (21), pp.214901. [10.1063/5.0019945](https://doi.org/10.1063/5.0019945)(<https://dx.doi.org/10.1063/5.0019945>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/5.0019945](https://doi.org/10.1063/5.0019945)(<https://dx.doi.org/10.1063/5.0019945>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03109519/bibtex>)

titre

[Multi-scale modeling of the polymer–filler interaction](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02476474)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02476474>)

auteur

Kevin Kempfer, Julien Devémy, Alain Dequidt, Marc Couty, Patrice Malfreyt

article

Soft Matter, Royal Society of Chemistry, 2020, 16 (6), pp.1538-1547. [10.1039/C9SM01959F](https://doi.org/10.1039/C9SM01959F)(<https://dx.doi.org/10.1039/C9SM01959F>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C9SM01959F](https://doi.org/10.1039/C9SM01959F)(<https://dx.doi.org/10.1039/C9SM01959F>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02476474/bibtex>)

titre

[A Multiscale Modelling Approach for the Design of new Polymer Materials\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03109551\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03109551)

auteur

Alain Dequidt, Sébastien Garruchet, Benoit Latour, Nicolas Martzel, Ronald Blaak, Etienne Munch, Nicolas Seeboth, Patrice Malfreyt

article

30th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, pp.25-30, 2020, [10.1016/B978-0-12-823377-1.50005-7](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823377-1.50005-7)(<https://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-823377-1.50005-7>)

typdoc

Book sections

DOI

DOI : [10.1016/B978-0-12-823377-1.50005-7](https://doi.org/10.1016/B978-0-12-823377-1.50005-7)(<https://dx.doi.org/10.1016/B978-0-12-823377-1.50005-7>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03109551/bibtex>)

titre

[Grain Shape Dynamics for Molecular Simulations at the Mesoscale\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02918184\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02918184)

auteur

Nicolas Martzel, Alain Dequidt, Julien Devémy, Ronald Blaak, Sébastien Garruchet, Benoit Latour, Florent Goujon, Etienne Munch, Patrice Malfreyt

article

Advanced Theory and Simulations, Wiley, 2020, pp.2000124. [10.1002/adts.202000124](https://doi.org/10.1002/adts.202000124)(<https://dx.doi.org/10.1002/adts.202000124>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1002/adts.202000124](https://doi.org/10.1002/adts.202000124)(<https://dx.doi.org/10.1002/adts.202000124>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02918184/bibtex>)

2019

titre

[Modélisation multi-échelles de matériaux liquides\(https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-02392894\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-02392894)

auteur

Alain Dequidt



article

Chimie-Physique [physics.chem-ph]. École Doctorale des Sciences Fondamentales de l'Université Clermont Auvergne, 2019

typdoc

Habilitation à diriger des recherches

Accès au texte intégral et bibtex

 (https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-02392894/file/HDR_Dequidt.pdf)  (<https://hal.archives-ouvertes.fr/tel-02392894/bibtex>)

titre

[Development of a coarse-grain model for the description of the metal oxide-polymer interface from a bottom-up approach\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02265700\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02265700)

auteur

José Solano Canchaya, Alain Dequidt, Sébastien Garruchet, Benoit Latour, Nicolas Martzel, Julien Devémy, Florent Goujon, Ronald Blaak, Benoit Schnell, Etienne Munch, Nicolas Seeboth, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2019, 151 (6), pp.064703. [10.1063/1.5115148\(https://dx.doi.org/10.1063/1.5115148\)](https://doi.org/10.1063/1.5115148)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.5115148\(https://dx.doi.org/10.1063/1.5115148\)](https://doi.org/10.1063/1.5115148)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02265700/bibtex>)

titre

[Atomistic Descriptions of the cis -1,4-Polybutadiene/Silica Interfaces](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168484)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168484>)

auteur

K. Kempfer, J. Devémy, Alain Dequidt, M. Couty, P. Malfreyt

article

ACS Applied Polymer Materials, American Chemical Society, 2019, 1 (5), pp.969-981. [10.1021/acsapm.8b00274](https://doi.org/10.1021/acsapm.8b00274)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsapm.8b00274>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acsapm.8b00274](https://doi.org/10.1021/acsapm.8b00274)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsapm.8b00274>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168484/bibtex>)

titre

[Development of Coarse-Grained Models for Polymers by Trajectory Matching](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168492)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168492>)

auteur

Kévin Kempfer, Julien Devemy, Alain Dequidt, Marc Couty, Patrice Malfreyt

article

ACS Omega, ACS Publications, 2019, 4 (3), pp.5955-5967. [10.1021/acsomega.9b00144](https://doi.org/10.1021/acsomega.9b00144)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.9b00144>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acsomega.9b00144](https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.9b00144)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.9b00144>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168492/bibtex>)

titre

[Realistic Coarse-Grain Model of cis -1,4-Polybutadiene: From Chemistry to Rheology](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168489)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168489>)

auteur

K. Kempfer, J. Devémy, Alain Dequidt, M. Couty, P. Malfreyt

article

Macromolecules, American Chemical Society, 2019, 52 (7), pp.2736-2747. [10.1021/acs.macromol.8b02750](https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.8b02750)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.8b02750>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.macromol.8b02750](https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.8b02750)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.8b02750>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168489/bibtex>)

titre

[Lehmann rotation of cholesteric droplets driven by Marangoni convection](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168494)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168494>)

auteur

P. Oswald, J. Iignes-Mullol, Alain Dequidt

article

Soft Matter, Royal Society of Chemistry, 2019, 15 (12), pp.2591-2604. [10.1039/C8SM02574F](https://dx.doi.org/10.1039/C8SM02574F)(<https://dx.doi.org/10.1039/C8SM02574F>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C8SM02574F](https://dx.doi.org/10.1039/C8SM02574F)(<https://dx.doi.org/10.1039/C8SM02574F>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02168494/bibtex>)

2018

titre

[How Does the Surface Tension Depend on the Surface Area with Coarse-Grained Models?](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01790498)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01790498>)

auteur

Florent Goujon, Alain Dequidt, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Theory and Computation, American Chemical Society, 2018, 14 (5), pp.2644 - 2651. [10.1021/acs.jctc.8b00158](https://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00158)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00158>)


typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.jctc.8b00158](https://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00158)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00158>)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01790498/file/Goujon%20et%20al_2018_How%20does%20the%20surface%20tension%20depend%20on%20the%20surface%20area%20with%20coarse-grained.pdf) (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01790498/bibtex>)

2017

titre

[Acceleration and Homogenization of the Dynamics during Plastic Deformation](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02191773)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02191773>)

auteur

Luca Conca, Alain Dequidt, Paul Sotta, Didier Long

article

Macromolecules, American Chemical Society, 2017, 50 (23), pp.9456-9472. [10.1021/acs.macromol.7b01391](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.7b01391)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.7b01391>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.macromol.7b01391](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.7b01391)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.7b01391>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02191773/bibtex>)

titre

[Molecular understanding of pyridinium ionic liquids as absorbents with water as refrigerant for use in heat pumps](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01656063)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01656063>)

auteur

Pablo Sánchez, Mounir Traïkia, Alain Dequidt, Agilio A. H. Padua, Josefa García

article

AIChE Journal, Wiley, 2017, 63 (8), pp.3523 - 3531. [10.1002/aic.15690](https://doi.org/10.1002/aic.15690)(<https://dx.doi.org/10.1002/aic.15690>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1002/aic.15690](https://doi.org/10.1002/aic.15690)(<https://dx.doi.org/10.1002/aic.15690>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01656063/bibtex>)

titre

[ForConX: A forcefield conversion tool based on XML](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01647926)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01647926>)

auteur

Volker Lesch, Diddo Diddens, Carlos E. S. Bernardes, Benjamin Golub, Alain Dequidt, Veronika Zeindlhofer, Marcello Sega, Christian Schröder

article

Journal of Computational Chemistry, Wiley, 2017, 38 (9), pp.629 - 638. [10.1002/jcc.24708](https://doi.org/10.1002/jcc.24708)(<https://doi.org/10.1002/jcc.24708>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1002/jcc.24708](https://doi.org/10.1002/jcc.24708)(<https://doi.org/10.1002/jcc.24708>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01647926/bibtex>)

2016

titre

[Thermalized Drude Oscillators with the LAMMPS Molecular Dynamics Simulator](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01334815).(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01334815>)

auteur

Alain Dequidt, Julien Devémy, Agílio A. H. Pádua

article

Journal of Chemical Information and Modeling, American Chemical Society, 2016, 56, pp.260-268. [10.1021/acs.jcim.5b00612](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5b00612)(<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5b00612>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.jcim.5b00612](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5b00612)(<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5b00612>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01334815/bibtex>)

titre

[Development of DPD coarse-grained models: from bulk to interfacial properties.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01483579)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01483579)

auteur

José G. Solano Canchaya, Alain Dequidt, Florent Goujon, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2016, 145, pp.054107. [10.1063/1.4960114](https://doi.org/10.1063/1.4960114)(https://dx.doi.org/10.1063/1.4960114)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4960114](https://doi.org/10.1063/1.4960114)(https://dx.doi.org/10.1063/1.4960114)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01483579/bibtex>)

titre

[Generalized drift velocity of a cholesteric texture in a temperature gradient.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01483583)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01483583)

auteur

Alain Dequidt, Guilhem Poy, Patrick Oswald

article

Soft Matter, Royal Society of Chemistry, 2016, 12, pp.7529-7538. [10.1039/C6SM01359G](https://doi.org/10.1039/C6SM01359G)(https://dx.doi.org/10.1039/C6SM01359G)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C6SM01359G](https://doi.org/10.1039/C6SM01359G)(https://dx.doi.org/10.1039/C6SM01359G)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01483583/bibtex>)

2015

titre

[Role of Dynamical Heterogeneities on the Viscoelastic Spectrum of Polymers: A Stochastic Continuum Mechanics Model](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01515628)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01515628>)

auteur

Robin J. Masurel, Sabine Cantournet, Alain Dequidt, Didier R. Long, H el ene Montes, Fran ois Lequeux

article

Macromolecules, American Chemical Society, 2015, 48 (18), pp.6690-6702. [10.1021/acs.macromol.5b01138](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.5b01138)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.5b01138>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.macromol.5b01138](https://doi.org/10.1021/acs.macromol.5b01138)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.5b01138>)

Acc es au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01515628/bibtex>)

titre

[Bayesian parametrization of coarse-grain dissipative dynamics models.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01212243)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01212243>)

auteur

Alain Dequidt, Jose G. Solano Canchaya

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2015, 143, pp.084122. [10.1063/1.4929557](https://doi.org/10.1063/1.4929557)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4929557>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4929557](https://dx.doi.org/10.1063/1.4929557)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4929557>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01212243/bibtex>)

titre

[Confined KCl solution between two mica surfaces: equilibrium and frictional properties.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01216154)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01216154>)

auteur

Alain Dequidt, Julien Devémy, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry C, American Chemical Society, 2015, 119, pp.22080-22085. [10.1021/acs.jpcc.5b06880](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b06880)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b06880>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.jpcc.5b06880](https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b06880)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b06880>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01216154/bibtex>)

2014

titre

[Solvation of a cellulose microfibril in imidazolium acetate ionic liquids: Effect of a cosolvent.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01179925)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01179925>)

auteur

Sadiye Velioglu, Xun Yao, Julien Devémy, M. Goktug Ahunbay, S. Birgul Tantekin-Ersolmaz, Alain Dequidt, Margarida F. Costa Gomes, Agílio A. H. Pádua

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2014, 118, pp.14860-14869. [10.1021/jp508113a](https://doi.org/10.1021/jp508113a)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp508113a>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/jp508113a](https://dx.doi.org/10.1021/jp508113a)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp508113a>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01179925/bibtex>)

2013

titre

[Alloy hardening of a smectic A liquid crystal doped with gold nanoparticles](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00914132)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00914132>)

auteur

Patrick Oswald, Jonathan Milette, Sabrina Relaix, Linda Reven, Alain Dequidt, Lubor Lejcek

article

EPL - Europhysics Letters, European Physical Society/EDP Sciences/Società Italiana di Fisica/IOP Publishing, 2013, 103, pp.46004. [10.1209/0295-5075/103/46004](https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/103/46004)(<https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/103/46004>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1209/0295-5075/103/46004](https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/103/46004)(<https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/103/46004>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00914132/bibtex>)

titre

[Yield torque sliding anchoring in nematic liquid crystals](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00914129)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00914129>)

auteur

Patrick Oswald, Alain Dequidt

article

Europhysics Letters, 2013, 103, pp.26002. [10.1209/0295-5075/103/26002](https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/103/26002)(<https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/103/26002>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1209/0295-5075/103/26002](https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/103/26002)(<https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/103/26002>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00914129/bibtex>)

titre

[Mechanical Properties of Thin Confined Polymer Films Close to the Glass Transition in the Linear Regime of Deformation: Theory and Simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00914139)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00914139>)

auteur

Alain Dequidt, Didier R. Long, Paul Sotta, Olivier Sanséau

article

Macromolecules in Constrained Environments, Mar 2013, Les Houches, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00914139/bibtex>)

2012

titre

[Mechanical properties of thin confined polymer films close to the glass transition in the linear regime of deformation: theory and simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767680)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767680>)

auteur

Alain Dequidt, Didier R. Long, Paul Sotta, Olivier Sanséau

article

Broadband Dielectric Spectroscopy, Sep 2012, Leipzig, Germany

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767680/bibtex>)

titre

[Mechanical properties of thin confined polymer films close to the glass transition in the linear regime of deformation: theory and simulations.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767673)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767673>)

auteur

Alain Dequidt, Didier R. Long, Paul Sotta, Olivier Sanséau

article

European Physical Journal E: Soft matter and biological physics, EDP Sciences: EPJ, 2012, 35 (7), pp.61. [10.1140/epje/i2012-12061-6](https://dx.doi.org/10.1140/epje/i2012-12061-6)(<https://dx.doi.org/10.1140/epje/i2012-12061-6>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1140/epje/i2012-12061-6](https://dx.doi.org/10.1140/epje/i2012-12061-6)(<https://dx.doi.org/10.1140/epje/i2012-12061-6>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767673/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/m-alain-dequidt>(<https://iccf.uca.fr/annuaire/m-alain-dequidt>)