

# M. Julien DEVEMY

[Institut de Chimie de Clermont-Ferrand\(https://iccf.uca.fr/unite/presentation\)](https://iccf.uca.fr/unite/presentation)

[Conseil des membres associés\(https://www.uca.fr/universite/grands-projets/universite-clermont-auvergne-associes\)](https://www.uca.fr/universite/grands-projets/universite-clermont-auvergne-associes)

[Simatlab\(https://simatlab.com/francais/le-laboratoire/simatlab\)](https://simatlab.com/francais/le-laboratoire/simatlab)

## Coordonnées

Bâtiment Chimie 7 1er étage

7117

<b>Tél</b>	+33473405201
<b>Mail</b>	<a href="mailto:Julien.DEVEMY@uca.fr">Julien.DEVEMY@uca.fr(mailto:Julien%2EDEVEMY%40uca%2Efr)</a>

## Discipline(s)

INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE

## Activités / CV

- Membre de l'équipe Thermodynamique et Interactions Moléculaires (TIM)
- Membre élu du conseil d'Unité de l'ICCF en tant que représentant du personnel ITA/BIATSS
- Correspondant Formation (CoFo) du bâtiment Chimie 7

### SPÉCIALITÉS :

- Développement de codes de calcul (simulation, post-traitement)
- Administration systèmes Linux

## 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>)

## Corps

IR CNRS

## Informations complémentaires

Publications HAL de Julien,DEVEMY 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**

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

**titre**

[Enhancing the Thermostability of Engineered Laccases in Aqueous Betaine-Based Natural Deep Eutectic Solvents](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03726526)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03726526>)

**auteur**

Simona Varriale, Astrid Delorme, Jean-Michel Andanson, Julien Devemy, Patrice Malfreyt, Vincent Verney, Cinzia Pezzella

**article**

*ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, American Chemical Society, 2022, 10 (1), pp.572-581.  
[10.1021/acssuschemeng.1c07104](https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c07104)(<https://dx.doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c07104>)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1021/acssuschemeng.1c07104](https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c07104)(<https://dx.doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c07104>)

**Accès au bibtex**

—

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03726526/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://dx.doi.org/10.3390/polym13050757)(<https://dx.doi.org/10.3390/polym13050757>)



**typdoc**

Journal articles

**DOI**

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

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

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1063/5.0019945](https://dx.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**

[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**

[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>)

**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://doi.org/10.1063/1.5115148)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.5115148>)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

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

**Accès au bibtex**

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

**titre**

[Using hydrogenated and perfluorinated gases to probe the interactions and structure of fluorinated ionic liquids](#)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02125569>)

**auteur**

Luiz Fernando Lepre, Laure Pison, Ines Otero, Arnaud Gautier, Julien Devémy, Pascale Husson, Agílio Pádua, Margarida Costa Gomes

**article**

*Physical Chemistry Chemical Physics*, Royal Society of Chemistry, 2019, 21 (17), pp.8865-8873. [10.1039/c9cp00593e](https://doi.org/10.1039/c9cp00593e)(<https://dx.doi.org/10.1039/c9cp00593e>)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1039/c9cp00593e](https://dx.doi.org/10.1039/c9cp00593e)(<https://dx.doi.org/10.1039/c9cp00593e>)

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02125569/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://dx.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>)

2018

**titre**

[Investigation of Li + Cation Coordination and Transportation, by Molecular Modeling and NMR Studies, in a LiNTf2-Doped Ionic Liquid–Vinylene Carbonate Mixture](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02062204)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02062204>)

**auteur**

Ewelina Bolimowska, Franca Castiglione, Julien Devemy, H el ene Rouault, Andrea Mele, Ag ilio P adua, Catherine Santini

**article**

*Journal of Physical Chemistry B*, American Chemical Society, 2018, 122 (36), pp.8560-8569. [10.1021/acs.jpcc.8b05231](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b05231)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b05231>)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1021/acs.jpcc.8b05231](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b05231)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b05231>)

**Acc es au bibtex**

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-02062204/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 Dev emy, 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)(<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>)

**Acc es au bibtex**

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

**titre**

[Improving cellulose dissolution in ionic liquids by tuning the size of the ions: Impact of the length of the alkyl chains in tetraalkylammonium carboxylate.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01546305)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01546305>)

**auteur**

Xiangqian Meng, Julien Devemy, Vincent Verney, Arnaud Gautier, Pascale Husson, Jean-Michel Andanson

**article**

*ChemSusChem*, ChemPubSoc Europe/Wiley, 2017, 10, pp.1749-1760. [10.1002/cssc.201601830](https://dx.doi.org/10.1002/cssc.201601830)(<https://dx.doi.org/10.1002/cssc.201601830>)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1002/cssc.201601830](https://dx.doi.org/10.1002/cssc.201601830)(<https://dx.doi.org/10.1002/cssc.201601830>)

**Accès au bibtex**

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01546305/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://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.5b00612)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.5b00612>)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

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

**Accès au bibtex**

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

2015

**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://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>)

**titre**

[Understanding the Role of Co-solvents in the Dissolution of Cellulose in Ionic Liquids.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084934)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084934>)

**auteur**

Jean-Michel Andanson, Emilie Bordes, Julien Devémy, Fabrice Leroux, Agilio A. H. Padua, Margarida F Costa Gomes

**article**

*Green Chemistry*, Royal Society of Chemistry, 2014, 16, pp.2528-2538. [10.1039/C3GC42244E](https://dx.doi.org/10.1039/C3GC42244E)(<https://dx.doi.org/10.1039/C3GC42244E>)

**typdoc**

Journal articles

**DOI**

DOI : [10.1039/C3GC42244E](https://dx.doi.org/10.1039/C3GC42244E)(<https://dx.doi.org/10.1039/C3GC42244E>)

**Accès au bibtex**

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084934/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-julien-devemy>(<https://iccf.uca.fr/annuaire/m-julien-devemy>)