M. Julien DEVEMY

Institut de Chimie de Clermont-Ferrand(https://iccf.uca.fr/unite/presentation)
Conseil des membres associés(https://www.uca.fr/universite/grands-projets/universite-clermont-auvergne-associes)
Simatlab(https://simatlab.com/francais/le-laboratoire/simatlab)

Coordonnées

Bâtiment Chimie 7 1er étage

7117

Tél	+33473405201
Mail	Julien.DEVEMY@uca.fr(mailto:Julien%2EDEVEMY%40uca%2Efr)

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)

Corps

IR CNRS

Informations complémentaires

Publications HAL de Julien,DEVEMY de la collection PRES_CLERMONT
2024

titre

Leaching of plasticizers from PVC medical devices: A molecular interpretation of experimental migration data(https://uca.hal.science/hal-04406616)

auteur

Meriem Sahnoune Millot, Julien Devémy, Philip Chennell, Jérémy Pinguet, Alain Dequidt, Valérie Sautou, Patrice Malfreyt

article

Journal of Molecular Liquids, 2024, 396, pp.123965. 10.1016/j.molliq.2024.123965(https://dx.doi.org/10.1016/j.molliq.2024.123965)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1016/j.molliq.2024.123965(https://dx.doi.org/10.1016/j.molliq.2024.123965)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://uca.hal.science/hal-04406616/bibtex)

titre

Development of anisotropic force fields for homopolymer melts at the mesoscale(https://hal.science/hal-04455468)

auteur

Roland Leonel Nkepsu Mbitou, Alain Dequidt, Florent Goujon, Benoit Latour, Julien Devémy, Nicolas Martzel, Patrice Hauret, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, 2024, 160 (6), pp.064910. 10.1063/5.0187040(https://dx.doi.org/10.1063/5.0187040)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1063/5.0187040(https://dx.doi.org/10.1063/5.0187040)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://hal.science/hal-04455468/file/main.pdf) (https://hal.science/hal-04455468/bibtex)

2023

titre

Impact of the Force Field on the Calculation of Density and Surface Tension of Epoxy–Resins(https://uca.hal.science/hal-04049687)

auteur

Mathilde Orselly, Cécile Richard, Julien Devémy, Agathe Bouvet-Marchand, Alain Dequidt, Cédric Loubat, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry B, 2023, 127 (11), pp.2617-2628. 10.1021/acs.jpcb.2c09087(https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcb.2c09087)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1021/acs.jpcb.2c09087(https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcb.2c09087)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://uca.hal.science/hal-04049687/file/pub3_JPCB%20%281%29.pdf) (https://uca.hal.science/hal-04049687/bibtex)

titre

Energetic and Structural Characterizations of the PET–Water Interface as a Key Step in Understanding Its Depolymerization(https://uca.hal.science/hal-04065631)

auteur

Pierre Fayon, Julien Devémy, Constance Emeriau-Viard, Karine Ballerat-Busserolles, Florent Goujon, Alain Dequidt, Alain Marty, Patrice Hauret, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry B, 2023, 10.1021/acs.jpcb.3c00600(https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcb.3c00600)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1021/acs.jpcb.3c00600(https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcb.3c00600)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://uca.hal.science/hal-04065631/file/PET_article_red.pdf) (https://uca.hal.science/hal-04065631/bibtex)

2022

titre

Molecular Simulations of Thermo-Mechanical Properties of Epoxy-Amine Resins(https://uca.hal.science/hal-03759439)

auteur

Mathilde Orselly, Julien Devemy, Agathe Bouvet-Marchand, Alain Dequidt, Cédric Loubat, Patrice Malfreyt

article

ACS Omega, 2022, 10.1021/acsomega.2c03071(https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.2c03071)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1021/acsomega.2c03071(https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.2c03071)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://uca.hal.science/hal-03759439/file/acsomega.2c03071.pdf) (https://uca.hal.science/hal-03759439/bibtex)

titre

Investigation of the Complexation between 4-Aminoazobenzene and Cucurbit[7]uril through a Combined Spectroscopic, Nuclear Magnetic Resonance, and Molecular Simulation Studies(https://hal.science/hal-03762887)

auteur

Sabine Sarraute, Anne-Sophie Biesse-Martin, Julien Devemy, Alain Dequidt, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

article

ACS Omega, 2022, 7, pp.25013 - 25021. 10.1021/acsomega.2c00499(https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.2c00499)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1021/acsomega.2c00499(https://dx.doi.org/10.1021/acsomega.2c00499)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://hal.science/hal-03762887/file/sarraute2022.pdf) (https://hal.science/hal-03762887/bibtex)

titre

Molecular interactions at the metal-liquid interfaces(https://uca.hal.science/hal-03759055)

auteur

Mathilde Orselly, Julien Devémy, Agathe Bouvet-Marchand, Alain Dequidt, Cedric Loubat, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, 2022, 156 (3), 10.1063/5.0095872(https://dx.doi.org/10.1063/5.0095872)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1063/5.0095872(https://dx.doi.org/10.1063/5.0095872)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://uca.hal.science/hal-03759055/file/pub2-v2.pdf) (https://uca.hal.science/hal-03759055/bibtex)

titre

Insulin Adsorption onto PE and PVC Tubings(https://hal.science/hal-03682647)

auteur

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

article

ACS Applied Bio Materials, 2022, 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)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://hal.science/hal-03682647/file/pub3-v4.pdf) (https://hal.science/hal-03682647/bibtex)

titre

Predicting Mechanical Constitutive Laws of Elastomers with Mesoscale Simulations(https://hal.science/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, 2022, 55, 5 (1487-1494), pp.acs.macromol.1c02076. 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://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02076)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://hal.science/hal-03579023/file/meso_macromolecules.pdf) (https://hal.science/hal-03579023/bibtex)

titre

Enhancing the Thermostability of Engineered Laccases in Aqueous Betaine-Based Natural Deep Eutectic Solvents(https://hal.science/hal-03726526)

auteur

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

article

ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2022, 10 (1), pp.572-581. 10.1021/acssuschemeng.1c07104(https://dx.doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c07104)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1021/acssuschemeng.1c07104(https://dx.doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c07104)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://hal.science/hal-03726526/file/Enhancing%20the%20thermostability%20of%20engeneered%20laccases%20in%20aqueous%20betaine-based%20natural%20deep%20eutectic%20solvents.pdf) (https://hal.science/hal-03726526/bibtex)

titre

Drug Interactions with Plasticized PVCs(https://hal.science/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, In press, 10.1021/acsapm.2c00532(https://dx.doi.org/10.1021/acsapm.2c00532)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1021/acsapm.2c00532(https://dx.doi.org/10.1021/acsapm.2c00532)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://hal.science/hal-03682638/file/pub1-v7.pdf) (https://hal.science/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.science/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 , 2021, 104 (2), pp.024501. 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)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-03542591/bibtex)

titre

Strain induced crystallization of polymers at and above the crystallization temperature by coarse-grained simulations(https://hal.science/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, 2021, 154 (23), pp.234902. 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)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-03264435/bibtex)

titre

Understanding and characterizing the drug sorption to PVC and PE materials(https://uca.hal.science/hal-03229994)

auteur

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

article

ACS Applied Materials & Interfaces, 2021, 13, pp.18594-18603. 10.1021/acsami.1c03284(https://dx.doi.org/10.1021/acsami.1c03284)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1021/acsami.1c03284(https://dx.doi.org/10.1021/acsami.1c03284)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://uca.hal.science/hal-03229994/file/pub1-v8.pdf) (https://uca.hal.science/hal-03229994/bibtex)

titre

Assessing the derivation of time parameters from branched polymer coarse-grain model(https://hal.science/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, 2021, 154 (12), pp.124901. 10.1063/5.0039843(https://dx.doi.org/10.1063/5.0039843)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1063/5.0039843(https://dx.doi.org/10.1063/5.0039843)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-03264450/bibtex)

titre

Heterogeneity Effects in Highly Cross-Linked Polymer Networks(https://hal.science/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, 2021, 13 (5), pp.757. 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)

Accès au texte intégral et bibtex

(https://hal.science/hal-03159245/file/polymers-13-00757-v2.pdf) (https://hal.science/hal-03159245/bibtex)

2020

titre

Backbone oriented anisotropic coarse grains for efficient simulations of polymers(https://hal.science/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, 2020, 153 (21), pp.214901. 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)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-03109519/bibtex)

titre

Multi-scale modeling of the polymer–filler interaction(https://hal.science/hal-02476474)

auteur

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

article

Soft Matter, 2020, 16 (6), pp.1538-1547. 10.1039/C9SM01959F(https://dx.doi.org/10.1039/C9SM01959F)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1039/C9SM01959F(https://dx.doi.org/10.1039/C9SM01959F)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-02476474/bibtex)

titre

Grain Shape Dynamics for Molecular Simulations at the Mesoscale(https://hal.science/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, 2020, pp.2000124. 10.1002/adts.202000124(https://dx.doi.org/10.1002/adts.202000124)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1002/adts.202000124(https://dx.doi.org/10.1002/adts.202000124)

Accès au bibtex

(https://hal.science/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.science/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, 2019, 151 (6), pp.064703. 10.1063/1.5115148(https://dx.doi.org/10.1063/1.5115148)

typdoc

Journal articles

DOI

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

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-02265700/bibtex)

titre

Using hydrogenated and perfluorinated gases to probe the interactions and structure of fluorinated ionic liquids(https://hal.science/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, 2019, 21 (17), pp.8865-8873. 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)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-02125569/bibtex)

titre

Development of Coarse-Grained Models for Polymers by Trajectory Matching(https://hal.science/hal-02168492)

auteur

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

article

ACS Omega, 2019, 4 (3), pp.5955-5967. 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)

Accès au bibtex

(https://hal.science/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.science/hal-02062204)

auteur

Ewelina Bolimowska, Franca Castiglione, Julien Devemy, Hélène Rouault, Andrea Mele, Agílio Pádua, Catherine Santini

article

Journal of Physical Chemistry B, 2018, 122 (36), pp.8560-8569. 10.1021/acs.jpcb.8b05231(https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcb.8b05231)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : 10.1021/acs.jpcb.8b05231(https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcb.8b05231)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-02062204/bibtex)

titre

Calculations of potential of mean force: application to ion-pairs and host–guest systems(https://hal.science/hal-01849616)

auteur

Ludovic Garnier, Julien Devémy, Christine Bonal, Patrice Malfreyt

article

Molecular Physics, 2018, 116 (15-16), pp.1998 - 2008. 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://dx.doi.org/10.1080/00268976.2018.1442593)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-01849616/bibtex)

2017

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.science/hal-01546305)

auteur

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

article

ChemSusChem, 2017, 10, pp.1749-1760. 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)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-01546305/bibtex)

2016

titre

Thermalized Drude Oscillators with the LAMMPS Molecular Dynamics Simulator.(https://hal.science/hal-01334815)

auteur

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

article

Journal of Chemical Information and Modeling, 2016, 56, pp.260-268. 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)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-01334815/bibtex)

2015

titre

Confined KCl solution between two mica surfaces: equilibrium and frictional properties.(https://hal.science/hal-01216154)

auteur

Alain Dequidt, Julien Devémy, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry C, 2015, 119, pp.22080-22085. 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)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-01216154/bibtex)

2014

titre

Solvation of a cellulose microfibril in imidazolium acetate ionic liquids: Effect of a cosolvent.(https://hal.science/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, 2014, 118, pp.14860-14869. 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)

Accès au bibtex

(https://hal.science/hal-01179925/bibtex)

titre

Understanding the Role of Co-solvents in the Dissolution of Cellulose in Ionic Liquids.(https://hal.science/hal-01084934)

auteur

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

article

Green Chemistry, 2014, 16, pp.2528-2538. 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)

Accès au bibtex

(https://hal.science/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)