

M. Patrice MALFREYT

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

Coordonnées

| | |
|-------------|--|
| Tél | +33473407204 |
| Fax | +33 4 73 40 71 85 |
| Mail | Patrice.MALFREYT@uca.fr(mailto:Patrice%2EMALFREYT%40uca%2Efr) |

Activités / CV

Fonctions à l'ICCF

- Responsable 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

PR UCA

Informations complémentaires

Publications HAL de Patrice,MALFREYT 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://doi.org/10.1021/acsabm.2c00029)(<https://dx.doi.org/10.1021/acsabm.2c00029>)



typdoc

Journal articles

DOI

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

[Interfacial tension of the graphene-water solid-liquid interface: how to handle the electrostatic interactions?](https://hal.uca.fr/hal-03288474)(<https://hal.uca.fr/hal-03288474>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Molecular Physics, Taylor & Francis, 2021, 119 (19-20), [10.1080/00268976.2021.1948121](https://doi.org/10.1080/00268976.2021.1948121)(<https://dx.doi.org/10.1080/00268976.2021.1948121>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1080/00268976.2021.1948121](https://dx.doi.org/10.1080/00268976.2021.1948121)(<https://dx.doi.org/10.1080/00268976.2021.1948121>)

Accès au texte intégral et bibtex

(<https://hal.uca.fr/hal-03288474/file/pub46-v4.pdf>) (<https://hal.uca.fr/hal-03288474/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

[Associated molecular liquids at the graphene monolayer interface](https://hal.uca.fr/hal-03166486)(<https://hal.uca.fr/hal-03166486>)

auteur

Florent Goujon, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2021, 154 (10), [10.1063/5.0042438](https://doi.org/10.1063/5.0042438)(<https://dx.doi.org/10.1063/5.0042438>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/5.0042438](https://doi.org/10.1063/5.0042438)(<https://dx.doi.org/10.1063/5.0042438>)

Accès au texte intégral et bibtex

(<https://hal.uca.fr/hal-03166486/file/JCP20-AR-FIN2020-05194.pdf>) (<https://hal.uca.fr/hal-03166486/bibtex>)

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

[Multiscale modelling of polymer materials](https://hal.uca.fr/hal-03127808).(<https://hal.uca.fr/hal-03127808>)

auteur

Patrice Malfreyt

article

Séminaire "Computational Fluid Dynamics", Dec 2020, Total, Belgium

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.uca.fr/hal-03127808/bibtex>)

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>)

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

Accès au bibtex

—

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

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

Accès au bibtex

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

[Contact angle and surface tension of water on a hexagonal boron nitride monolayer: a methodological investigation](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01868083)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01868083>)

auteur

Ilham Essafri, Jean-Christophe Le Breton, Arnaud Saint-Jalmes, Armand Soldera, Anthony Szymczyk, Patrice Malfreyt, Aziz Ghoufi

article

Molecular Simulation, Taylor & Francis, 2019, 45 (4-5), pp.454-461. [10.1080/08927022.2018.1502427](https://doi.org/10.1080/08927022.2018.1502427)
(<https://dx.doi.org/10.1080/08927022.2018.1502427>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1080/08927022.2018.1502427](https://doi.org/10.1080/08927022.2018.1502427)(<https://dx.doi.org/10.1080/08927022.2018.1502427>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01868083/bibtex>)

titre

[Calculation of the interfacial tension of the graphene-water interaction by molecular simulations](https://hal-univ-rennes1.archives-ouvertes.fr/hal-01996694)(
<https://hal-univ-rennes1.archives-ouvertes.fr/hal-01996694>)

auteur

Thibaud Dreher, Claire Lemarchand, Nicolas Pineau, Emeric Bourasseau, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2019, 150 (1), pp.014703. [10.1063/1.5048576](https://doi.org/10.1063/1.5048576)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.5048576>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.5048576](https://doi.org/10.1063/1.5048576)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.5048576>)

Accès au bibtex

 (<https://hal-univ-rennes1.archives-ouvertes.fr/hal-01996694/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 Israëli, 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)

[10.1080/00268976.2018.1442593](https://dx.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>)

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://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://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>)

2016

titre

[CAN WE APPROACH THE GAS--LIQUID CRITICAL POINT USING SLAB SIMULATIONS OF TWO
COEXISTING PHASES?\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01371385\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01371385)

auteur

Florent Goujon, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2016, 145 (12), pp.124702. [10.1063/1.4962820](https://doi.org/10.1063/1.4962820)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4962820>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4962820](https://doi.org/10.1063/1.4962820)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4962820>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01371385/bibtex>)

titre

[Spotlights:Physics behind Water Transport through Nanoporous Boron Nitride and Graphene](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01372970)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01372970>)

auteur

Garnier Ludovic, Anthony Szymczyk, Patrice Malfreyt, Aziz Ghoufi

article

Journal of Physical Chemistry Letters, American Chemical Society, 2016, 7 (17), pp.3534. [10.1021/acs.jpcllett.6b01911](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b01911)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b01911>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.jpcllett.6b01911](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b01911)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b01911>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01372970/bibtex>)

titre

[Physics behind Water Transport through Nanoporous Boron Nitride and Graphene](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01354194)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01354194>)

auteur

Garnier Ludovic, Anthony Szymczyk, Patrice Malfreyt, Aziz Ghoufi

article

Journal of Physical Chemistry Letters, American Chemical Society, 2016, 7 (17), pp.3371-3376.
[10.1021/acs.jpcllett.6b01365](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b01365)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b01365>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.jpcclett.6b01365](https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.6b01365)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcclett.6b01365>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01354194/bibtex>)

titre

[Ultrafast diffusion of Ionic Liquids Confined in Carbon Nanotubes](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01337482)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01337482>)

auteur

Aziz Ghoufi, Anthony Szymczyk, Patrice Malfreyt

article

Scientific Reports, Nature Publishing Group, 2016, 6 (1), pp.28518. [10.1038/srep28518](https://doi.org/10.1038/srep28518)(<https://dx.doi.org/10.1038/srep28518>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1038/srep28518](https://doi.org/10.1038/srep28518)(<https://dx.doi.org/10.1038/srep28518>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01337482/bibtex>)

titre

[Physical Properties and Hydrogen-Bonding Network of Water–Ethanol Mixtures from Molecular Dynamics Simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01260211)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01260211>)

auteur

Aziz Ghoufi, Franck Artzner, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2016, 120 (4), pp.793-802. [10.1021/acs.jpccb.5b11776](https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.5b11776)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpccb.5b11776>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.jpcc.5b11776](https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b11776)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b11776>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01260211/bibtex>)

titre

[Computer modelling of the surface tension of the gas-liquid and liquid-liquid interface](https://hal-univ-rennes1.archives-ouvertes.fr/hal-01259512)(<https://hal-univ-rennes1.archives-ouvertes.fr/hal-01259512>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt, Dominic J Tildesley

article

Chemical Society Reviews, Royal Society of Chemistry, 2016, 15 (5), [10.1039/c5cs00736d](https://dx.doi.org/10.1039/c5cs00736d)(<https://dx.doi.org/10.1039/c5cs00736d>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/c5cs00736d](https://dx.doi.org/10.1039/c5cs00736d)(<https://dx.doi.org/10.1039/c5cs00736d>)

Accès au bibtex

(<https://hal-univ-rennes1.archives-ouvertes.fr/hal-01259512/bibtex>)

titre

[Monte Carlo simulations of the static friction between two grafted polymer brushes.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01334856)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01334856>)

auteur

Ana C. F. Mendonça, Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Physical Chemistry Chemical Physics, Royal Society of Chemistry, 2016, 18, pp.6164-6174. [10.1039/C5CP07374J](https://dx.doi.org/10.1039/C5CP07374J)(<https://dx.doi.org/10.1039/C5CP07374J>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C5CP07374J](https://dx.doi.org/10.1039/C5CP07374J)(<https://dx.doi.org/10.1039/C5CP07374J>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01334856/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://dx.doi.org/10.1063/1.4960114)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4960114>)

typdoc

Journal articles

DOI

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

2015

titre

[Surface Tension and Long Range Corrections of Cylindrical Interfaces](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01238678)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01238678>)

auteur

Emeric Bourasseau, Patrice Malfreyt, Aziz Ghoufi

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2015, 143 (23), pp.234708. [10.1063/1.4937924](https://doi.org/10.1063/1.4937924)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4937924>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4937924](https://doi.org/10.1063/1.4937924)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4937924>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01238678/bibtex>)

titre

[Controlling the long-range corrections in atomistic Monte Carlo simulations of two-phase systems](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01193130)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01193130>)

auteur

Florent Goujon, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Journal of Chemical Theory and Computation, American Chemical Society, 2015, 11 (10), pp.4573-4585. [10.1021/acs.jctc.5b00377](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00377)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00377>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.jctc.5b00377](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00377)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00377>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01193130/bibtex>)

titre

[Coarse-graining the liquid-liquid interfaces with the MARTINI force field : how is the interfacial tension reproduced ?](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01173978)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01173978>)

auteur

Mathar Ndao, Devemy Julien, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Theory and Computation, American Chemical Society, 2015, 11 (8), pp.3818-3828. [10.1021/acs.jctc.5b00149](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00149)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00149>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.jctc.5b00149](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00149)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00149>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01173978/bibtex>)

titre

[Interfacial Structure of Toluene at an Ionic Liquid/Vapor Interface: A Molecular Dynamics Simulation Investigation](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01144890)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01144890>)

auteur

Francois Delaunay, Alfredo-Santiago Rodriguez-Castillo, Annabelle Couvert, Abdeltif Amrane, Pierre-Francois Biard, Anthony Szymczyk, Patrice Malfreyt, Aziz Ghoufi

article

Journal of Physical Chemistry C, American Chemical Society, 2015, 119 (18), pp.9966-9972. [10.1021/acs.jpcc.5b02081](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b02081)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b02081>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/acs.jpcc.5b02081](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b02081)(<https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b02081>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01144890/bibtex>)

titre

[Calculation of structural and thermomechanical properties of polymers from multiscale simulations.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01212258)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01212258>)

auteur

Gaëtan Maurel, Florent Goujon, Benoit Schnell, Patrice Malfreyt

article

RSC Advances, Royal Society of Chemistry, 2015, 5, pp.14065-14073. [10.1039/C4RA16417B](https://doi.org/10.1039/C4RA16417B)(<https://dx.doi.org/10.1039/C4RA16417B>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C4RA16417B](https://doi.org/10.1039/C4RA16417B)(<https://dx.doi.org/10.1039/C4RA16417B>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01212258/bibtex>)

titre

[Structure and rheology of star polymers in confined geometries: a mesoscopic simulation study.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01277150)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01277150>)

auteur

Feiwo Zheng, Florent Goujon, Ana C. F. Mendonça, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Soft Matter, Royal Society of Chemistry, 2015, 11 pp.8590-8598. [10.1039/C5SM01799H](https://doi.org/10.1039/C5SM01799H)(<https://dx.doi.org/10.1039/C5SM01799H>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C5SM01799H](https://doi.org/10.1039/C5SM01799H)(<https://dx.doi.org/10.1039/C5SM01799H>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01277150/bibtex>)

titre

[Response to "Comment on 'The gas-liquid surface tension of argon: a reconciliation between experiment and simulation'".\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01388699\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01388699)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2015, 142, pp.107102. [10.1063/1.4914150](https://doi.org/10.1063/1.4914150)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4914150>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4914150](https://doi.org/10.1063/1.4914150)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4914150>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01388699/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://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>)

titre

[Superpermittivity of nanoconfined water.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01212247)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01212247>)

auteur

Richard Renou, Anthony Szymczyk, Guillaume Maurin, Patrice Malfreyt, Aziz Ghoufi

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2015, 142 (18), pp.184706. [10.1063/1.4921043](https://doi.org/10.1063/1.4921043)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4921043>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4921043](https://doi.org/10.1063/1.4921043)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4921043>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01212247/bibtex>)

2014

titre

[Slab thickness dependence of the surface tension: Toward a criterion of liquid sheets stability](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01078715)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01078715>)

auteur

Gaëlle Filippini, E. Bourasseau, Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2014, 141, pp.081103. [10.1063/1.4894399](https://doi.org/10.1063/1.4894399)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4894399>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4894399](https://doi.org/10.1063/1.4894399)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4894399>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01078715/bibtex>)

titre

[Concentration Dependence of the Dielectric Permittivity, Structure and Dynamics of Aqueous NaCl Solutions: Comparison between the Drude Oscillator and Electronic Continuum Models.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00967974)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00967974>)

auteur

Richard Renou, Minxia Ding, Haochen Zhu, Anthony Szymczyk, Patrice Malfreyt, Aziz Ghoufi

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2014, 118 (14), pp.3931-3940. [10.1021/jp4118419](https://doi.org/10.1021/jp4118419)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp4118419>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/jp4118419](https://doi.org/10.1021/jp4118419)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp4118419>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00967974/bibtex>)

titre

[How does the electronic continuum model perform in the prediction of the surface tension of salt solutions?](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00965746)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00965746>)

auteur

Jean-Claude Neyt, Aurélie Wender, Véronique Lachet, Anthony Szymczyk, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Chemical Physics Letters, Elsevier, 2014, 595-596, pp.209-213. [10.1016/j.cplett.2014.02.014](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2014.02.014)(<https://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2014.02.014>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1016/j.cplett.2014.02.014](https://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2014.02.014)(<https://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2014.02.014>)

Accès au texte intégral et bibtex

 (https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00965746/file/How_does_the_electronic_continuum_final.pdf) .

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00965746/bibtex>)

titre

[Surface tension of spherical drops from surface of tension](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00932843)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00932843>)

auteur

Ahmed-Amine Homman, Emeric Bourasseau, Gabriel Stoltz, Patrice Malfreyt, Loic Strafella, Aziz Ghoufi

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2014, 140 (3), pp.034110. [10.1063/1.4862149](https://dx.doi.org/10.1063/1.4862149)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4862149>)



typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4862149](https://dx.doi.org/10.1063/1.4862149)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4862149>)

Accès au texte intégral et bibtex

 (https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00932843/file/Goufi_al_JCP.pdf)  (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00932843/bibtex>)

titre

[How does the dehydration change the host-guest association process in homogeneous and heterogeneous conditions?](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084812)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084812>)

auteur

G. Filippini, C. Bonal, Patrice Malfreyt

article

Physical Chemistry Chemical Physics, Royal Society of Chemistry, 2014, 16, pp.8667-8674. [10.1039/C4CP00108G](https://dx.doi.org/10.1039/C4CP00108G)(<https://dx.doi.org/10.1039/C4CP00108G>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C4CP00108G](https://dx.doi.org/10.1039/C4CP00108G)(<https://dx.doi.org/10.1039/C4CP00108G>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084812/bibtex>)

titre

[Crossover in structure and dynamics of a primary alcohol induced by hydrogen-bonds dilution](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01121808)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01121808>)

auteur

Leila Hennous, Abdel Razzak Abdel Hamid, Ronan Lefort, Denis Morineau, Patrice Malfreyt, Aziz Ghoufi

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2014, 141, pp.204503. [10.1063/1.4902012](https://dx.doi.org/10.1063/1.4902012)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4902012>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4902012](https://dx.doi.org/10.1063/1.4902012)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4902012>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01121808/bibtex>)

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>)

titre

[Quantitative prediction of the interface tension of liquid-liquid interfaces through atomistic and coarse-grained models.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01080216)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01080216>)

auteur

Jean-Claude Neyt, Aurélie Wender, Véronique Lachet, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Theory and Computation, American Chemical Society, 2014, 10, pp.1887-1899. [10.1021/ct500053c](https://doi.org/10.1021/ct500053c)(<https://dx.doi.org/10.1021/ct500053c>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/ct500053c](https://doi.org/10.1021/ct500053c)(<https://dx.doi.org/10.1021/ct500053c>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01080216/bibtex>)

titre

[The gas-liquid surface tension of argon : a reconciliation between experiment and simulation.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084928)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084928>)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2014, 140, pp.244710. [10.1063/1.4885351](https://doi.org/10.1063/1.4885351)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4885351>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4885351](https://doi.org/10.1063/1.4885351)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4885351>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084928/bibtex>)

titre

[Calculation of the surface tension of planar interfaces by molecular simulations: from Lennard-Jones fluids to binary mixtures.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00987586)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00987586>)

auteur

Patrice Malfreyt

article

Molecular Simulation, Taylor & Francis, 2014, 40, pp.106-114. [10.1080/08927022.2013.840891](https://doi.org/10.1080/08927022.2013.840891)(<https://dx.doi.org/10.1080/08927022.2013.840891>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1080/08927022.2013.840891](https://doi.org/10.1080/08927022.2013.840891)(<https://dx.doi.org/10.1080/08927022.2013.840891>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00987586/bibtex>)

titre

[Calculation of the surface tension of pure tin from atomistic simulations of liquid-vapour systems.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084903)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084903>)

auteur

E. Bourasseau, G. Filippini, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Molecular Physics, Taylor & Francis, 2014, 112, pp.2654-2657. [10.1080/00268976.2014.901666](https://doi.org/10.1080/00268976.2014.901666)(
<https://dx.doi.org/10.1080/00268976.2014.901666>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1080/00268976.2014.901666](https://doi.org/10.1080/00268976.2014.901666)(<https://dx.doi.org/10.1080/00268976.2014.901666>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01084903/bibtex>)

titre

[Bulk and Liquid-Vapor Interface of Pyrrolidinium-Based Ionic Liquids: A Molecular Simulation Study.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00987583)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00987583>)

auteur

Xavier Paredes, Josefa Fernández, Agilio A. H. Padua, Patrice Malfreyt, Friedrich Malberg, Barbara Kirchner, Alfonso S. Pensado

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2014, 118, pp.731-742. [10.1021/jp406651f](https://doi.org/10.1021/jp406651f)(
<https://dx.doi.org/10.1021/jp406651f>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/jp406651f](https://doi.org/10.1021/jp406651f)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp406651f>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00987583/bibtex>)

titre

[Microscopic insight into the nanocoalescence of a water droplet on a water bath](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00921482)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00921482>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

EPL - Europhysics Letters, European Physical Society/EDP Sciences/Società Italiana di Fisica/IOP Publishing, 2013, 104 (4), pp.46004. [10.1209/0295-5075/104/46004](https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/104/46004)(<https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/104/46004>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1209/0295-5075/104/46004](https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/104/46004)(<https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/104/46004>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00921482/bibtex>)

titre

[Molecular modeling of the liquid-vapor interfaces of a multi-component mixture: Prediction of the coexisting densities and surface tensions at different pressures and gas compositions](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00844526)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00844526>)

auteur

Jean-Claude Neyt, Aurélie Wender, Véronique Lachet, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2013, 139 (2), pp.024701. [10.1063/1.4811679](https://dx.doi.org/10.1063/1.4811679)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4811679>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.4811679](https://dx.doi.org/10.1063/1.4811679)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.4811679>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00844526/bibtex>)

titre

[Calculation of the surface tension of liquid copper from atomistic Monte Carlo simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00875765)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00875765>)

auteur

Emeric Bourasseau, Ahmed-Amine Homman, Olivier Durand, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

The European Physical Journal B: Condensed Matter and Complex Systems, Springer-Verlag, 2013, 86, pp.251. [10.1140/EPJB/E2013-40226-9](https://dx.doi.org/10.1140/EPJB/E2013-40226-9)(<https://dx.doi.org/10.1140/EPJB/E2013-40226-9>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1140/EPJB/E2013-40226-9](https://dx.doi.org/10.1140/EPJB/E2013-40226-9)(<https://dx.doi.org/10.1140/EPJB/E2013-40226-9>)

Accès au texte intégral et bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00875765/file/BourasseauEPJ.pdf>)  (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00875765/bibtex>)

titre

[Prediction of the concentration dependence of the surface tension and density of salt solutions : atomistic simulations with polarizable and nonpolarizable models.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00828145)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00828145>)

auteur

Jean-Claude Neyt, Aurélie Wender, Véronique Lachet, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Physical Chemistry Chemical Physics, Royal Society of Chemistry, 2013, 2013 (15), pp.11679-11690. [10.1039/C3CP50904D](https://dx.doi.org/10.1039/C3CP50904D)(<https://dx.doi.org/10.1039/C3CP50904D>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C3CP50904D](https://dx.doi.org/10.1039/C3CP50904D)(<https://dx.doi.org/10.1039/C3CP50904D>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00828145/bibtex>)

titre

[Nanoconfined Electrolyte Solutions in porous Hydrophilic Silica Membranes](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00828106).(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00828106>)

auteur

Richard Renou, Aziz Ghoufi, Anthony Szymczyk, H. Zhu, Jean-Claude Neyt, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry C, American Chemical Society, 2013, 117 (21), pp.11017-11027.

[10.1021/jp403450x](https://dx.doi.org/10.1021/jp403450x)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp403450x>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/jp403450x](https://dx.doi.org/10.1021/jp403450x)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp403450x>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00828106/bibtex>)

titre

[Local description of surface tension through thermodynamic and mechanical definitions](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00828294).(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00828294>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Molecular Simulation, Taylor & Francis, 2013, 39 (8), pp.603-611. [10.1080/08927022.2012.755529](https://dx.doi.org/10.1080/08927022.2012.755529)(<https://dx.doi.org/10.1080/08927022.2012.755529>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1080/08927022.2012.755529](https://dx.doi.org/10.1080/08927022.2012.755529)(<https://dx.doi.org/10.1080/08927022.2012.755529>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00828294/bibtex>)

titre

[The kinetic friction coefficient of neutral and charged polymer brushes.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00806197)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00806197>)

auteur

Florent Goujon, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Soft Matter, Royal Society of Chemistry, 2013, 9 (10), pp.2966-2972. [10.1039/C3SM27641D](https://dx.doi.org/10.1039/C3SM27641D)(<https://dx.doi.org/10.1039/C3SM27641D>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C3SM27641D](https://dx.doi.org/10.1039/C3SM27641D)(<https://dx.doi.org/10.1039/C3SM27641D>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00806197/bibtex>)

titre

[Novel ionic lubricants for amorphous carbon surfaces : a molecular modelling of the structure and friction.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00950517)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00950517>)

auteur

Ana Catarina Fernandes Mendonça, Yu. D. Fomin, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua

article

Soft Matter, Royal Society of Chemistry, 2013, 9, pp.10606-10616

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00950517/bibtex>)

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>)

titre

[Nonequilibrium Molecular Simulations of New Ionic Lubricants at Metallic Surfaces: Prediction of the Friction](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00945113)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00945113>)

auteur

Ana Catarina Fernandes Mendonça, Agilio A. H. Padua, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Theory and Computation, American Chemical Society, 2013, 9, pp.1600-1610

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00945113/bibtex>)

titre

[Recent advances in Many Body Dissipative Particles Dynamics simulations of liquid-vapor interfaces.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01072051)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01072051>)

auteur

Aziz Ghoufi, Janine Emile, Patrice Malfreyt

article

European Physical Journal E: Soft matter and biological physics, EDP Sciences: EPJ, 2013, 36, 10,
12 pp. [10.1140/epje/i2013-13010-7](https://doi.org/10.1140/epje/i2013-13010-7)(<https://dx.doi.org/10.1140/epje/i2013-13010-7>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1140/epje/i2013-13010-7](https://doi.org/10.1140/epje/i2013-13010-7)(<https://dx.doi.org/10.1140/epje/i2013-13010-7>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01072051/bibtex>)

2012

titre

[Molecular Simulation of new ionic liquids at metallic surfaces: structure, dynamics and friction](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767122)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767122>)

auteur

Ana Catarina F. Mendonça, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua

article

EUCHEM 2012 - Molten Salts and Ionic Liquids XXIV, Aug 2012, Celtic Manor, Wales, United
Kingdom

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

—

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767122/bibtex>)

titre

[Multiscale Modeling Approach toward the Prediction of Viscoelastic Properties of Polymers](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00786125)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00786125>)

auteur

Gaëtan Maurel, B. Schnell, Florent Goujon, M. Couty, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Theory and Computation, American Chemical Society, 2012, 8, pp.4570-4579

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00786125/bibtex>)

titre

[Interactions and Ordering of Ionic Liquids at a Metal Surface](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00754957)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00754957>)

auteur

Ana Catarina F. Mendonça, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua

article

Journal of Chemical Theory and Computation, American Chemical Society, 2012, 8 (9), pp.3348-3355. [10.1021/ct300452u](https://doi.org/10.1021/ct300452u)(<https://dx.doi.org/10.1021/ct300452u>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/ct300452u](https://doi.org/10.1021/ct300452u)(<https://dx.doi.org/10.1021/ct300452u>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00754957/bibtex>)

titre

[Using molecular simulation to understand the structure of \[C2C1im\]+ - alkylsulfate ionic liquids: bulk and liquid-vapor interfaces](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767317)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767317>)

auteur

Xavier Paredes, Josefa Fernandez, Agilio A. H. Padua, Patrice Malfreyt, F. Malberg, Barbara Kirchner, Alfonso S. Pensado

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2012, 116, pp.14159-14170

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767317/bibtex>)

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

[Frictional forces in polyelectrolyte brushes: effects of sliding velocity, solvent quality and salt](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711757)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711757>)

auteur

Florent Goujon, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt, D. J. Tildesley

article

Soft Matter, Royal Society of Chemistry, 2012, 8 (17), pp.4635-4644. [10.1039/C2SM07450H](https://doi.org/10.1039/C2SM07450H)(<https://dx.doi.org/10.1039/C2SM07450H>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C2SM07450H](https://doi.org/10.1039/C2SM07450H)(<https://dx.doi.org/10.1039/C2SM07450H>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711757/bibtex>)

titre

[Calculation of the surface tension and pressure components from a non-exponential perturbation method of the thermodynamic route.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00688052)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00688052>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2012, 136, pp.024104. [10.1063/1.3676056](https://doi.org/10.1063/1.3676056)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3676056>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.3676056](https://doi.org/10.1063/1.3676056)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3676056>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00688052/bibtex>)

titre

[2D or not 2D: Structural and charge ordering at the solid-liquid interface of the 1-\(2-hydroxyethyl\)-3-methylimidazolium tetrafluoroborate ionic liquid](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00660510)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00660510>)

auteur

Karina Shimizu, Alfonso S. Pensado, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua, José N. Canongia Lopes

article

Faraday Discussions, Royal Society of Chemistry, 2012, 154, pp.155-169. [10.1039/c1fd00043h](https://dx.doi.org/10.1039/c1fd00043h)(<https://dx.doi.org/10.1039/c1fd00043h>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/c1fd00043h](https://dx.doi.org/10.1039/c1fd00043h)(<https://dx.doi.org/10.1039/c1fd00043h>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00660510/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

[Coarse grained simulations of the electrolytes at the water-air interface from Many Body Dissipative Particle Dynamics](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00786130)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00786130>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Theory and Computation, American Chemical Society, 2012, 8, pp.787-791.

[10.1021/ct200833s](https://doi.org/10.1021/ct200833s)(<https://dx.doi.org/10.1021/ct200833s>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/ct200833s](https://doi.org/10.1021/ct200833s)(<https://dx.doi.org/10.1021/ct200833s>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00786130/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>)

titre

[Modeling the Pressure Dependence of Acid Gas plus n-Alkane Interfacial Tensions Using Atomistic Monte Carlo Simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711738)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711738>)

auteur

Jean-Claude Neyt, Aurélie Wender, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry C, American Chemical Society, 2012, 116, pp.10563-10572. [10.1021/jp212004c](https://doi.org/10.1021/jp212004c)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp212004c>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/jp212004c](https://doi.org/10.1021/jp212004c)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp212004c>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711738/bibtex>)

2011

titre

[Local pressure components and surface tension of spherical interfaces. Thermodynamic versus mechanical definitions. I. A mesoscale modeling of droplets](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00714090)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00714090>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2011, 135 (10), pp.4105. [10.1063/1.3632991](https://doi.org/10.1063/1.3632991)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3632991>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.3632991](https://doi.org/10.1063/1.3632991)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3632991>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00714090/bibtex>)

titre

[Molecular simulation of new ionic lubricants](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00766982)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00766982)

auteur

Ana Catarina F. Mendonça, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua

article

3rd European Conference on Tribology, ECOTRIB 2011, Jun 2011, Vienna, Austria

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00766982/bibtex>)

titre

[Molecular simulation of new ionic liquid lubricants for metal surfaces](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767004)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767004)

auteur

Ana Catarina F. Mendonça, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua

article

Congress On Ionic Liquids COIL-4, May 2011, Washington, United States

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00767004/bibtex>)

titre

[Mesoscale modeling of the water liquid-vapor interface : A surface tension calculation](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00713078)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00713078)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Physical Review E : Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, American Physical Society, 2011, 83 (5), pp.051601. [10.1103/PHYSREVE.83.051601](https://dx.doi.org/10.1103/PHYSREVE.83.051601)(<https://dx.doi.org/10.1103/PHYSREVE.83.051601>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1103/PHYSREVE.83.051601](https://dx.doi.org/10.1103/PHYSREVE.83.051601)(<https://dx.doi.org/10.1103/PHYSREVE.83.051601>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00713078/bibtex>)

titre

[Tracking the Structural Dynamics of Hybrid Layered Double Hydroxides](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00823208)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00823208>)

auteur

Julien Pisson, Nicole Morel-Desrosiers, Jean-Pierre Morel, André de Roy, Fabrice Leroux, Christine Taviot-Gueho, Patrice Malfreyt

article

Chemistry of Materials, American Chemical Society, 2011, 23 (6), pp.1482-1490

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00823208/bibtex>)

titre

[Molecular simulations of confined liquids: An alternative to the grand canonical Monte Carlo simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00607878)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00607878>)

auteur

Aziz Ghoufi, Denis Morineau, Ronan Lefort, Ivanne Hureau, Leita Hennous, Haochen Zhu, Anthony Szymczyk, Patrice Malfreyt, Guillaume Maurin

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2011, 134 (7), pp.074104. [10.1063/1.3554641](https://doi.org/10.1063/1.3554641)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3554641>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.3554641](https://doi.org/10.1063/1.3554641)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3554641>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00607878/bibtex>)

titre

[Surface tension of water-alcohol mixtures from Monte Carlo simulations.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711644)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711644>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2011, 134 (4), pp.044709. [10.1063/1.3544926](https://doi.org/10.1063/1.3544926)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3544926>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.3544926](https://doi.org/10.1063/1.3544926)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3544926>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711644/bibtex>)

titre

[Configurational temperature and local properties of the anisotropic Gay-Berne liquid crystal model: applications to the isotropic liquid/vapor interface and isotropic/nematic transition.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711631)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711631>)

auteur

Aziz Ghoufi, Denis Morineau, Ronan Lefort, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2011, 134 (3), pp.034116. [10.1063/1.3516519](https://doi.org/10.1063/1.3516519)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3516519>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.3516519](https://doi.org/10.1063/1.3516519)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3516519>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00711631/bibtex>)

titre

[Prediction of the Surface Tension of the LiquidVapor Interface of Alcohols from Monte Carlo Simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00713070)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00713070>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry C, American Chemical Society, 2011, 115 (17), pp.8670-8683. [10.1021/jp1117213](https://doi.org/10.1021/jp1117213)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp1117213>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/jp1117213](https://doi.org/10.1021/jp1117213)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp1117213>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00713070/bibtex>)

titre

[Effect of alkyl chain length and hydroxy group functionalization on the surface properties of imidazolium ionic liquids](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00660503)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00660503>)

auteur

Alfonso S. Pensado, Margarida F Costa Gomes, José N. Canongia Lopes, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua

article

Physical Chemistry Chemical Physics, Royal Society of Chemistry, 2011, 13, pp.13518-13526.

[10.1039/c1cp20563c](https://dx.doi.org/10.1039/c1cp20563c)(<https://dx.doi.org/10.1039/c1cp20563c>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/c1cp20563c](https://dx.doi.org/10.1039/c1cp20563c)(<https://dx.doi.org/10.1039/c1cp20563c>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00660503/bibtex>)

titre

[Adsorption of n-alkane vapours at the water surface](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00713133)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00713133>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Physical Chemistry Chemical Physics, Royal Society of Chemistry, 2011, 13, pp.11308-11316.

[10.1039/C0CP02511A](https://dx.doi.org/10.1039/C0CP02511A)(<https://dx.doi.org/10.1039/C0CP02511A>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/C0CP02511A](https://dx.doi.org/10.1039/C0CP02511A)(<https://dx.doi.org/10.1039/C0CP02511A>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00713133/bibtex>)

titre

[Toward a better understanding of hybrid LDH interlayer structure and dynamics](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477687)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477687>)

auteur

Julien Pisson, Nicole Morel-Desrosiers, Jean-Pierre Morel, André de Roy, Fabrice Leroux, Christine Taviot-Gueho, Patrice Malfreyt

article

Chemistry of Materials, American Chemical Society, 2011, 23, pp.1482-1490

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477687/bibtex>)

2010

titre

[Calculation of the surface tension of water-gas mixtures from Monte Carlo Simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00482011)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00482011>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

PPEPPD, Properties and Phase Equilibria for Product and Process Design, May 2010, Suzhou, China

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00482011/bibtex>)

titre

[Structure and properties of task specific ionic liquids: A molecular simulation overview](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00479701)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00479701>)

auteur

Alfonso S. Pensado, Margarida F Costa Gomes, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua

article

American Chemical Society National Meeting, Mar 2010, San Francisco, United States

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00479701/bibtex>)

titre

[Numerical evidence of the formation of a thin microscopic film of methane at the water surface: a free energy calculation.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01072094)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01072094>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Physical Chemistry Chemical Physics, Royal Society of Chemistry, 2010, 12, pp.5203--5205. [10.1039/b924886b](https://doi.org/10.1039/b924886b)(<https://dx.doi.org/10.1039/b924886b>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1039/b924886b](https://dx.doi.org/10.1039/b924886b)(<https://dx.doi.org/10.1039/b924886b>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-01072094/bibtex>)

titre

[Mesoscale modeling of polyelectrolyte brushes with salt](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477685)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477685>)

auteur

Cyrille Ibergay, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2010, 114 (7274-7285), sous presse

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477685/bibtex>)

titre

[Toward a Coarse Graining/All Atoms Force Field \(CG/AA\) from a Multiscale Optimization Method: An Application to the MCM-41 Mesoporous Silicates](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477686)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477686>)

auteur

Aziz Ghoufi, Denis Morineau, Ronan Lefort, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Theory and Computation, American Chemical Society, 2010, 6 (10), pp.3212-3222. [10.1021/ct100169r](https://dx.doi.org/10.1021/ct100169r)(<https://dx.doi.org/10.1021/ct100169r>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/ct100169r](https://dx.doi.org/10.1021/ct100169r)(<https://dx.doi.org/10.1021/ct100169r>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477686/bibtex>)

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 Israëlï, 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

[Calculation of the surface tension of alcohol + water mixtures from Monte Carlo simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00481117)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00481117>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2010, 134 (4), pp.044709

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00481117/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

[Interactions between polymer brushes and a polymer solution: mesoscale modelling of the structural and frictional properties](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477766)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477766>)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Soft Matter, Royal Society of Chemistry, 2010, sous presse

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477766/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>)

titre

[Monte Carlo calculation of the methane-water interfacial tension at high pressures\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00665475\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00665475)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2009, 131 (12), pp.124707. [10.1063/1.3236390\(https://dx.doi.org/10.1063/1.3236390\)](https://doi.org/10.1063/1.3236390)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.3236390\(https://dx.doi.org/10.1063/1.3236390\)](https://doi.org/10.1063/1.3236390)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00665475/bibtex>)

titre

[Polymers at interface: simulation of competitive adsorption with surfactant using dissipative particle dynamics\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477764\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477764)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Thermodynamics 2009, Sep 2009, Londres, United Kingdom

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477764/bibtex>)

titre

[Interactions of ionic liquids with solutes, nanoparticles and interfaces\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00479676\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00479676)

auteur

Alfonso S. Pensado, José N. Canongia Lopes, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua

article

Thermodynamics 2009, Sep 2009, London, United Kingdom

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00479676/bibtex>)

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

[Vacuum-liquid and solid-liquid interfaces of ionic liquids: A molecular dynamics study\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00405083\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00405083)

auteur

Alfonso S. Pensado, Karina Shimizu, José N. Canongia Lopes, Margarida F Costa Gomes, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua

article

24th European Symposium on Applied Thermodynamics, ESAT-2009, Jun 2009, Santiago de Compostela, Spain

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00405083/bibtex>)

titre

[Mesoscopic simulation of entangled polymer brushes under shear: compression and rheological properties](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359031)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359031>)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Macromolecules, American Chemical Society, 2009, 42, pp.4310

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359031/bibtex>)

titre

[Calculation of the surface tension from Monte Carlo simulations: does the model impact on the finite-size effects?](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00665326)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00665326>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2009, 130 (18), pp.184710. [10.1063/1.3132708](https://doi.org/10.1063/1.3132708)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3132708>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.3132708](https://dx.doi.org/10.1063/1.3132708)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.3132708>)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00665326/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://dx.doi.org/10.1080/08927020802600727)(<https://dx.doi.org/10.1080/08927020802600727>)



typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1080/08927020802600727](https://dx.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%252F08927020802600727.pdf](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00515064/file/PEER_stage2_10.1080%20252F08927020802600727.pdf)) (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00515064/bibtex>)

titre

[Monte Carlo calculations of the methane-water interfacial tension at high pressures](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477635)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477635>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2009, 131, pp.124707

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477635/bibtex>)

titre

[Mesoscale modelling of the polyelectrolyte brushes : surface coverage, separation distance, fraction of charge](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477751)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477751>)

auteur

Cyrille Ibergay, Dominic J. Tildesley, Patrice Malfreyt

article

Thermodynamics 2009, 2009, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477751/bibtex>)

titre

[Electrostatic interactions in dissipative particle dynamics : toward a mesoscale modeling of the polyelectrolyte brushes](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477683)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477683>)

auteur

Cyrille Ibergay, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Journal of Chemical Theory and Computation, American Chemical Society, 2009, 5, pp.3245-3259

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477683/bibtex>)

titre

[Calculation of the surface tension of cyclic and aromatic hydrocarbons from Monte Carlo simulaitons using the Anisotropic United Atom model\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359033\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359033)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Physical Chemistry Chemical Physics, Royal Society of Chemistry, 2009, 111, pp.6132-6147

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359033/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

[Calculation of the surface tension from Monte Carlo simulations: does the model impact on the finite-size effects ?\(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359035\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359035)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2009, 130, pp.184710

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00359035/bibtex>)

titre

[Monte Carlo simulations of the pressure dependence of the water-acid gas interfacial tensions.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477644)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477644>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2009, 113, pp.14277-14290

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477644/bibtex>)

titre

[Molecular dynamic simulations of the liquid surface of the ionic liquid 1-hexyl-3-methylimidazolium bis \(trifluoromethanesulfonyl\)amide: Structure and surface tension](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00404599)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00404599>)

auteur

Alfonso S. Pensado, Patrice Malfreyt, Agilio A. H. Padua

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2009, 113, pp.14708-14718. [10.1021/jp905585e](https://doi.org/10.1021/jp905585e)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp905585e>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1021/jp905585e](https://doi.org/10.1021/jp905585e)(<https://dx.doi.org/10.1021/jp905585e>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00404599/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>)

titre

[Calculation of the surface tension of binary mixtures at high pressures from Monte Carlo simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477760)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477760>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Thermodynamics 2009, 2009, Londres, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477760/bibtex>)

2008

titre

[Calculation of the surface tension of water-acid gases binary mixtures from Monte Carlo simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342640)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342640>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

First Congress of the Federation of Environmental research,, Oct 2008, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342640/bibtex>)

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>)

auteur

Florent Goujon, Christine Bonal, Benoit Limoges, Patrice Malfreyt

article

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

titre

[Mesoscopic simulation of entanglements using dissipative particle dynamics: application to polymer brushes](#) (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315981>)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic Tildesley

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2008, 129 (3), pp.034902. [10.1063/1.2954022](https://dx.doi.org/10.1063/1.2954022) (<https://dx.doi.org/10.1063/1.2954022>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1063/1.2954022](https://dx.doi.org/10.1063/1.2954022)(<https://dx.doi.org/10.1063/1.2954022>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315981/bibtex>)

titre

[DPD simulations of polymer brushes : friction and compression.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477770)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477770>)

auteur

Patrice Malfreyt

article

CECAM Workshop, Dissipative particle dynamics : addressing deficiencies and establishing new frontiers., Jul 2008, Lausanne, Switzerland

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477770/bibtex>)

titre

[Calculation of the surface tension of water-CO2 and water-H2S binary mixtures from Monte Carlo simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342645)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342645>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

23 rd European Symposium on Applied Thermodynamics, May 2008, Cannes, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342645/bibtex>)

titre

[Compression of entangled polymer brushes using dissipative particle dynamics](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315984)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315984)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic Tildesley

article

ESAT2008 - 23rd European Symposium on Applied Thermodynamics, May 2008, Cannes, France.
pp.38

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315984/bibtex>)

titre

[Simulation numérique de matériaux aux échelles moléculaires et mésoscopiques](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342629)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342629)

auteur

Patrice Malfreyt

article

GDR 2922, MHOM Matériaux Hybrides Organisés Multifonctionnels, May 2008, Murol, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342629/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

[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

[Multiple Histogram Reweighting method for the surface tension calculation.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00295150)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00295150>)

auteur

Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2008, 128, pp.154718

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00295150/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

[Surface tensions of linear and branched alkanes from Monte Carlo simulations using the Anisotropic United Atom \(AUA\) model](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342620)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342620>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2008, 112, pp.13885-13897

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342620/bibtex>)

titre

[Molecular modeling of the structure and dynamics of the interlayer species of ZnAlCl layered double hydroxide.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315489)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315489>)

auteur

Julien Pisson, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers, Christine Taviot-Gueho, Patrice Malfreyt

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2008, 112, pp.7856-7864

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00315489/bibtex>)

titre

[Expressions for local contributions to the surface tension from the virial route](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00295146)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00295146>)

auteur

Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Physical Review E : Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, American Physical Society, 2008, 77, pp.031601

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00295146/bibtex>)

titre

[Surface tension of water and acid gazes from Monte Carlo simulations](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00295151)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00295151>)

auteur

Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2008, 128, pp.154716

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00295151/bibtex>)

2007

titre

[Simulation de type mésoscopique de brosses de polymères avec calcul des charges électrostatiques](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00316000)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00316000>)

auteur

C. Ibergay, Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic Tildesley

article

9èmes Journées Francophones des jeunes Physico-Chimistes, Oct 2007, Maubuisson, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00316000/bibtex>)

titre

[Electrostatic interactions in dissipative particle dynamics simulations of polymer brushes](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00316009)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00316009>)

auteur

C. Ibergay, Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic Tildesley

article

Thermodynamics 2007, Sep 2007, Rueil-Malmaison, France. pp.P

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00316009/bibtex>)

titre

[Mesoscopic simulations of entanglements in polymer brushes using dissipative particle dynamics](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00316004)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00316004>)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic Tildesley

article

Thermodynamics 2007, Sep 2007, Rueil-Malmaison, France. pp.O

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00316004/bibtex>)

titre

[Calculation of the surface tension and its long range corrections](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342637)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342637>)

auteur

Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Thermodynamics, Sep 2007, Rueil-Malmaison, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

—

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342637/bibtex>)

titre

[Multiple Histogram Reweighting for the surface tension calculation](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342644)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342644>)

auteur

Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Thermodynamics 2007, Sep 2007, Rueil-Malmaison, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342644/bibtex>)

titre

[Surface tension calculation of alkanes and alkylbenzenes using the anisotropic united atom model](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342643)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342643>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Véronique Lachet, Patrice Malfreyt

article

Thermodynamics 2007, Sep 2007, Rueil-Malmaison, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342643/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

[Simulation numérique de matériaux aux échelles moléculaire et mésoscopique.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477765)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477765>)

auteur

Patrice Malfreyt

article

GDR 2922, MHOM, Matériaux Hybrides Organisés Multifonctionnels, May 2007, Murol, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00477765/bibtex>)

titre

[Calcul de tensions interfaciales d'hydrocarbures à l'aide de simulations de type Monte-Carlo](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342638)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342638>)

auteur

Frédéric Biscay, Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Patrice Malfreyt

article

9èmes Journées Francophones des Jeunes Physico-Chimistes, May 2007, Maubuisson, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342638/bibtex>)

titre

[Methodology for the calculation of the potential of mean force for a cation-pi complex in water](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00187793)(
<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00187793>)

auteur

Aziz Ghoufi, P. Archirel, Jean-Pierre Morel, Nicole Morel-Desrosiers, A. Boutin, Patrice Malfreyt

article

ChemPhysChem, Wiley-VCH Verlag, 2007, 8 (11), pp.1648-1656

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00187793/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 the n-alkane liquid-vapor interface : interfacial properties and their long range corrections](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00145222)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00145222>)

auteur

C. Ibergay, Aziz Ghoufi, F. Goujon, P. Ungerer, A. Boutin, B. Rousseau, Patrice Malfreyt

article

Physical Review E : Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, American Physical Society, 2007, 75, pp.051602

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00145222/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>)

titre

[Molecular simulations of the n-alkane liquid-vapor interface : interfacial properties and their long range corrections](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00152854)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00152854>)

auteur

C. Ibergay, Aziz Ghoufi, F. Goujon, P. Ungerer, A. Boutin, B. Rousseau, Patrice Malfreyt

article

Physical Review E : Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, American Physical Society, 2007, 75, pp.051602

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00152854/bibtex>)

2006

titre

[Methodology for the calculation of the absolute and relative thermodynamic properties \(hydration, binding\)](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342642)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342642>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Seventh Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, May 2006, Lednice, Czech Republic

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342642/bibtex>)

titre

[Calculation of the surface tension of n-alkanes using molecular simulations: operational expressions and long range corrections.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342636)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342636)

auteur

Cyrille Ibergay, Aziz Ghoufi, Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Philippe Ungerer, Anne Boutin, Bernard Rousseau, Alain H. Fuchs

article

Molecular simulation of equilibrium properties, A seminar celebrating the 10 th anniversary of the GIBBS Software, Mar 2006, Rueil-Malmaison, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342636/bibtex>)

titre

[Calculation of the potential of mean force from molecular dynamics simulations using different methodologies: An application to the determination of the binding thermodynamic properties of an ion-pair](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00137022)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00137022)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Molecular Physics, Taylor & Francis, 2006, 104, pp.3787-3799

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00137022/bibtex>)

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

[Entropy and enthalpy calculations from the Perturbation and Integration Thermodynamics methods using molecular dynamics simulations: Applications to the calculation of hydration and association thermodynamic properties](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342612)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342612>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Molecular Physics, Taylor & Francis, 2006, 104, pp.2929-2943

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342612/bibtex>)

titre

[Calculation of the absolute thermodynamic properties of association of host-guest systems from the intermolecular potential of mean force](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342614)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342614>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2006, 125, pp.224503-1

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342614/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>)

2005

titre

[Nouvelles approches dans les méthodes de perturbation et de potentiel de force moyenne pour le calcul de grandeurs thermodynamiques d'association.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342634)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342634>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

8ème Journées Francophones des Jeunes Physico-Chimistes, Sep 2005, Marly le Roi, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342634/bibtex>)

titre

[Simulation par dynamique dissipative de la compression de brosses de polymères sous cisaillement](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342633)
(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342633>)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic J. Tildesley

article

Quatrième journée de Modélisation Moléculaire des Polymères et Matériaux Amorphes, Jun 2005,
Clermont-Ferrand, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342633/bibtex>)

titre

[Calculating \$rG^\circ\$, \$rH^\circ\$ and \$rS^\circ\$ from molecular simulations: Applications to the binding of inorganic cations by a macrocycle](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342632)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342632>)

auteur

Aziz Ghoufi, Patrice Malfreyt

article

Thermodynamics, Apr 2005, Coimbra, Portugal

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342632/bibtex>)

titre

[Calcul des grandeurs d'association par la méthode du potentiel de forces moyennes: application à la complexation d'un calixarène par les ions lanthane et tétraalkylammonium](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00011231)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00011231)

auteur

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

article

Journées du GDR PRACTIS "Physicochimie des actinides et autres radioéléments en solutions et aux interfaces", 2005, Avignon, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00011231/bibtex>)

titre

[Étude de la dégradation des matériaux en contact avec un arc électrique ou un plasma.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084539)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084539)

auteur

Emmanuel Duffour, Pascal André, William Bussiere, David Rochette, Gérard Velleaud, M'Hammed Abbaoui, André Lefort, Thierry Latchimy, Patrice Malfreyt

article

1er Symposium en Sciences des Matériaux. Projet Matériaux Avancés, Synthèse, Caractérisation : de l'Innovation aux Fonctionnalités (MASCIF)., 2005, Clermont Ferrand, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084539/bibtex>)

titre

[MD simulations of the binding of alcohols and diols by a calixarene in water: connections between microscopic and macroscopic properties.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159711)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159711)

auteur

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

article

Journal of Physical Chemistry B, American Chemical Society, 2005, 109 (49), pp.23579-23587

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00159711/bibtex>)

titre

[The compression of polymer brushes under shear: the friction coefficient as a function of compression, shear rate and the properties of the solvent](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342385)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342385)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic Tildesley

article

Molecular Physics, Taylor & Francis, 2005, 103, pp.2675-2685. [10.1080/00268970500134706](https://dx.doi.org/10.1080/00268970500134706)(<https://dx.doi.org/10.1080/00268970500134706>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1080/00268970500134706](https://dx.doi.org/10.1080/00268970500134706)(https://dx.doi.org/10.1080/00268970500134706)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342385/bibtex>)

titre

[MD simulations of the collision between a copper ion and a polyethylene surface: an application to the plasma-insulating material interaction](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00019412)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00019412)

auteur

Emmanuel Duffour, Patrice Malfreyt

article

Polymer, Elsevier, 2004, 45, pp.4565-4575. [10.1016/j.polymer.2004.04.014](https://dx.doi.org/10.1016/j.polymer.2004.04.014)(https://dx.doi.org/10.1016/j.polymer.2004.04.014)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1016/j.polymer.2004.04.014](https://dx.doi.org/10.1016/j.polymer.2004.04.014)(https://dx.doi.org/10.1016/j.polymer.2004.04.014)

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00019412/bibtex>)

titre

[Interaction plasma-isolant. Travail théorique : étude de l'interaction ions cuivre - polyéthylène par dynamique moléculaire.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084532)(https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084532)

auteur

Emmanuel Duffour, Pascal André, Patrice Malfreyt, Jacques Aubreton, Marie-Françoise Elchinger

article

Groupement d'intérêt scientifique : Programme Matériaux Massif Central : matériaux innovants (GIS P2MC), 2004, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084532/bibtex>)

titre

[Monte Carlo versus molecular dynamics simulations in heterogeneous systems: an application to the n-pentane liquid-vapor interface](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342617)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342617>)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Jean Marc Simon, Anne Boutin, Bernard Rousseau, Alain H. Fuchs

article

Journal of Chemical Physics, American Institute of Physics, 2004, 121, pp.12559-12571

typdoc

Journal articles

Accès au bibtex

(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342617/bibtex>)

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>)

titre

[Dissipative particle dynamics simulations in the grand canonical ensemble: Applications to polymer brushes](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342383)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342383>)

auteur

Florent Goujon, Patrice Malfreyt, Dominic Tildesley

article

ChemPhysChem, Wiley-VCH Verlag, 2004, 5, pp.457-464. [10.1002/cphc.200300901](https://dx.doi.org/10.1002/cphc.200300901)(<https://dx.doi.org/10.1002/cphc.200300901>)

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1002/cphc.200300901](https://dx.doi.org/10.1002/cphc.200300901)(<https://dx.doi.org/10.1002/cphc.200300901>)

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00342383/bibtex>)

2003

titre

[Étude théorique de l'interaction plasma isolant : dynamique moléculaire](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084523)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084523>)

auteur

Emmanuel Duffour, Patrice Malfreyt, Jacques Aubreton, Marie-Françoise Elchinger

article

6èmes journées d'études sur les fluctuations des arcs, 2003, Clermont Ferrand, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084523/bibtex>)

titre

[Interaction plasma paroi. Etudes théoriques et expérimentales.](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084524)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084524>)

auteur

Emmanuel Duffour, Pascal André, William Bussiere, Damien Vacher, Patrice Malfreyt, Jacques Aubreton, Marie-Françoise Elchinger

article

Groupement d'intérêt scientifique : Programme Matériaux Massif Central : matériaux innovants (GIS P2MC), 2003, Clermont Ferrand, France

typdoc

Conference papers

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00084524/bibtex>)

2002

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>)

titre

[Structure and thermodynamic properties from molecular dynamics simulations of the polyethylene crystal](https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00019413)(<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00019413>)

auteur

Emmanuel Duffour, Patrice Malfreyt

article

Polymer, Elsevier, 2002, 43, pp.6341-6349. [10.1016/S0032-3861\(02\)00412-3](https://dx.doi.org/10.1016/S0032-3861(02)00412-3)([https://dx.doi.org/10.1016/S0032-3861\(02\)00412-3](https://dx.doi.org/10.1016/S0032-3861(02)00412-3))

typdoc

Journal articles

DOI

DOI : [10.1016/S0032-3861\(02\)00412-3](https://dx.doi.org/10.1016/S0032-3861(02)00412-3)([https://dx.doi.org/10.1016/S0032-3861\(02\)00412-3](https://dx.doi.org/10.1016/S0032-3861(02)00412-3))

Accès au bibtex

 (<https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00019413/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-patrice-malfreyt>(<https://iccf.uca.fr/annuaire/m-patrice-malfreyt>)