

Production Scientifique

1 Publications

D. Bousquet, E. Brémond, J. Sancho-Garcia, I. Ciofini, C. Adamo. "Non parametrized functionals with empirical dispersion corrections : a happy match?" *Theoretical Chemistry Accounts*, 134 (2015) 1602.

E. Brémond, M. Kalhor, D. Bousquet, P. Mignon, I. Ciofini, C. Adamo, P. Cortona, H. Chermette. "Assessing the performances of some recently proposed density functionals for the description of organometallic structures." *Theoretical Chemistry Accounts*, 132 (2013) 1401.

D. Bousquet, E. Brémond, J. C. Sancho-Garcia, I. Ciofini, C. Adamo. "Is There Still Room for Parameter Free Double Hybrids ? Performances of PBE0-DH and B2PLYP over Extended Benchmark Sets." *Journal of Chemical Theory and Computation*, 9 (2013) 3444.

D. Bousquet, R. Fukuda, P. Maitarad, D. Jacquemin, I. Ciofini, C. Adamo, M. Ehara. "Excited-State Geometries of Heteroaromatic Compounds : A Comparative TD-DFT and SAC-CI Study." *Journal of Chemical Theory and Computation*, 9 (2013) 2368.

E. Brémond, D. Pilard, I. Ciofini, H. Chermette, C. Adamo, P. Cortona. "Generalized gradient exchange functionals based on the gradient-regulated connection : a new member of the TCA family." *Theoretical Chemistry Accounts*, 131 (2012) 1184.

D. Bousquet, C. Peltier, C. Masselin, D. Jacquemin, C. Adamo, I. Ciofini. "A DFT study of magnetic interactions in photoswitchable systems." *Chemical Physics Letters*, 542 (2012) 13.

D. Bekermann, D. Pilard, R. Fischer, A. Devi, "Zinc Malonate Based Precursors for MOCVD of ZnO" *ECS Transactions* 25 (2009) 601.

2 Communications Orales

Journée des Doctorants de Chimie Paristech, "Comment prédire la couleur de manière théorique", jeune chercheur invité, 22 Mai 2014, Paris (30 minutes de présentation).

Communication dans le cadre d'un workshop, "Vertical and Relaxed Excited States : DFT *vs* SAC-CI" 1er Juin 2013, IMS Okasaki, Japon (40 minutes de présentation).

Communication dans le cadre d'un workshop, "Vertical and Relaxed Excited States : DFT *vs* SAC-CI" 28 Mai 2013, Université de Nagoya, Japon (30 minutes de présentation).

Journées de Modélisation "Utilisation de la DFT pour la description de diradicaux magnétiques : Symétrie Brisée et Approche dite Spin-Flip", 15-16 Juin 2012, Paris, France (20 minutes de présentation).

VI European Workshop on Molecular Magnetism, JUJOLS VI, "DFT for the description of magnetic diradicals : Broken Symmetry and Spin-Flip approach" 1-3 Février 2012, Séville, Espagne (30 minutes de présentation).

Holistic Computational Spectroscopy CoDECS Workshop, "DFT for the description of magnetic diradicals : Broken Symmetry and beyond" 16-18 Novembre 2011, Ecole Normale Supérieure, Pise, Italie (30 minutes de présentation).

3 Communications par Affiche

TDDFT Conference, "Excited-state geometries of π conjugated aromatic compounds with hetero atoms : TD-DFT *vs* SAC-CI", Nantes, France, 23-26 Avril 2013.

Congrès Molecules, Light and Life, "Excited-state geometries of π conjugated aromatic compounds with hetero atoms : TD-DFT *vs* SAC-CI", Jena, Allemagne, 12-14 Novembre 2012.