



Dumitru-Claudiu Sergentu

Cetățenie: română **Data nașterii:** 19/01/1989 **Număr de telefon:** (+40) 0757874367

E-mail: dumitru.sergentu@uaic.ro **E-mail:** claudiu.sergentu@gmail.com

Muncă: Bd. Carol 1, nr. 11 Facultatea de Chimie, Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași, 700506 Iași (România)

INTRODUCERE

Asistent Universitar Dr. | Chimie Teoretică | Cuantică | Computațională

Expert în chimie cuantică și computațională, sunt implicat în activități didactice și de cercetare care presupun modelarea și interpretarea legăturilor chimice metal-ligand, a spectrelor de absorbție în raze X și a proprietăților electrice și magnetice (NMR, EPR, MCD, EFG) în complecși ce conțin metale grele, în special lantanide și actinide. Autor a 35 de articole cotate ISI, publicate în reviste științifice de cel mai înalt prestigiu la nivel internațional, precum Nature, Nature Communications, Angewandte Chemie, Journal of The American Chemical Society și Chemical Science, și cu o experiență vastă în activități de cercetare științifică la nivel internațional, am o capacitate excelentă de a iniția, implementa și conduce proiecte de cercetare științifică.

EXPERIENȚA PROFESIONALĂ

Asistent universitar

Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași [01/09/2023 – În curs]

Localitatea: Iași | Țara: România

- Chimie-fizică generală (L1)
- Chimie cuantică (L2)
- Chimie computațională și modelare moleculară (L3)
- Dinamica și energetica sistemelor moleculare (M2)

Asistent de cercetare științifică (ACS)

Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași [01/09/2022 – În curs]

Localitatea: Iași | Țara: România

- Laboratorul RA-03 – ICI-RECENT AIR
- Studiul teoretic și computațional al unor procese și proprietăți fizico-chimice utilizând metode de chimie cuantică

Cercetător științific, postdoctorat

Université de Rennes [01/11/2022 – 22/12/2023]

Localitatea: Rennes | Țara: Franța

- MSCA Postdoctoral Fellow
- Echipa CTI, Institut des Sciences Chimiques de Rennes – ISCR, CNRS UMR-6226
- Grant de cercetare Marie Skłodowska-Curie BIENVENUE, acordat prin competiție internațională
- Dezvoltarea unor noi instrumente teoretice de calcul pentru studiul magneților unimoleculari

Cercetător științific, postdoctorat

State University of New York at Buffalo [15/01/2017 – 31/12/2021]

Localitatea: Buffalo NY | Țara: Statele Unite

- Chimie teoretică și computațională
- Proprietăți optice și magnetice în complecși cu lantanide și actinide

Cercetător științific, doctorand

Centre national de la recherche scientifique (CNRS) [01/10/2013 – 30/11/2016]

Localitatea: Nantes | Țara: Franța

- Departamentul de radiochimie SUBATECH Nantes & CEISAM Nantes (Université de Nantes)
- Studiul proprietăților fizice și chimice ale astatin-ului utilizând metode computaționale și mecanica cuantică relativistă

Cercetător științific, internship

Institut de Ciència Molecular - ICMOL (Universitat de València) [15/01/2013 – 31/05/2013]

Localitatea: València | Țara: Spania

- Studiul teoretic și computațional al mecanismului de emisie de fosforescență al moleculei de benzofenonă

EDUCAȚIE ȘI FORMARE PROFESIONALĂ

Doctor în Chimie (PhD)

Université de Nantes [01/11/2013 – 31/10/2016]

Localitatea: Nantes | Țara: Franța | Site de internet: <https://www.univ-nantes.fr/> | Domeniul (domeniile) de studiu: Științe naturale, matematică și statistică: • Chimie | Nivelul CEC: Nivelul 8 CEC | Lucrarea de diplomă: Geometries, electronic structures, and physico-chemical properties of astatine species: An application of relativistic quantum mechanics

Link: <https://theses.fr/2016NANT4024>

- Chimie teoretică, computațională
- Chimie cuantică, relativistă
- Proprietăți fizico-chimice ale astatin-ului
- Programare științifică

Master în chimie (MSC)

Rijksuniversiteit Groningen [01/09/2011 – 31/08/2013]

Localitatea: Groningen | Țara: Țările de Jos | Site de internet: <https://www.rug.nl/> | Domeniul (domeniile) de studiu: Științe naturale, matematică și statistică: • Chimie | Nivelul CEC: Nivelul 7 CEC | Lucrarea de diplomă: Revisiting the intersystem crossing in benzophenone

Link: <https://fse.studenttheses.ub.rug.nl/11195/>

- European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (EM-TCCM)
- Chimie teoretică și modelare computațională
- Programare științifică

Licențiat în Chimie (BSc)

Universitatea "Alexandru Ioan Cuza" din Iași [01/10/2008 – 31/07/2011]

Localitatea: Iași | Țara: România | Site de internet: <https://www.uaic.ro/> | Domeniul (domeniile) de studiu: Științe naturale, matematică și statistică: • Chimie | Nivelul CEC: Nivelul 6 CEC | Lucrarea de diplomă: Metode teoretice în chimia computațională

Tensorflow 2.0: Deep learning and artificial intelligence

Udemy [17/07/2023]

Localitatea: Online | Site de internet: <https://www.udemy.com/certificate/UC-8b631392-637a-4f6d-8139-c40e31fbbf59/> | Nivelul CEC: Nivelul 7 CEC

Deep Learning A-Z 2024: Neural Networks, AI & ChatGPT Prize

Udemy [18/05/2023]

Localitatea: Online | Site de internet: <https://www.udemy.com/certificate/UC-36ee7263-3f70-40f0-87a5-05ae060f0f8a/> | Nivelul CEC: Nivelul 7 CEC

Machine Learning A-Z: AI, Python & R

Udemy [25/05/2021]

Localitatea: Online | Site de internet: <https://www.udemy.com/certificate/UC-104bc554-81f8-4441-82cf-0f2793c7552d/> | Nivelul CEC: Nivelul 7 CEC

The Complete Python Bootcamp From Zero to Hero

Udemy [17/03/2021]

Localitatea: Online | Site de internet: <https://www.udemy.com/certificate/UC-84779ae3-3417-467b-9b0e-c7e9bb882d59/> | Nivelul CEC: Nivelul 7 CEC

The Complete Python Developer Certification Course

Udemy [12/05/2020]

Localitatea: Online | Site de internet: <https://www.udemy.com/certificate/UC-4285ff79-055e-4351-ae44-89f0577f5409/> | Nivelul CEC: Nivelul 7 CEC

COMPETENȚE LINGVISTICE

Limbă(i) maternă(e): română

Altă limbă (Alte limbi):

engleză

COMPREHENSIVNE ORALĂ C2 CITIT C2 SCRIS C2

EXPRIMARE SCRISĂ C2 CONVERSAȚIE C2

franceză

COMPREHENSIVNE ORALĂ B2 CITIT C1 SCRIS B1

EXPRIMARE SCRISĂ B1 CONVERSAȚIE B1

Niveluri: A1 și A2 Utilizator de bază B1 și B2 Utilizator independent C1 și C2 Utilizator experimentat

COMPETENȚE

Python (pandas, numpy) / Cunoștințe de programare în C/C++ / Bune competențe de scriere/editare în LATEX / Experiența Sistemelor de Operare Window/Linux/Mac OS / Python (Numpy, Pandas, matplotlib, scikit-learn) / Basics of machine learning

ACTIVITĂȚI DE TRAINING

[10/05/2023 – 11/05/2023]

The European Responsible Research and Innovation Event 2023 (ERRIE 2023), Brest, Franța

Training workshop: Women, Society and Science, How do Scientific Theories Arise, Environmental Ethics in Research, Data Security, From the Carbon Footprint of Research Activities to Science, Open Science: Issues, Tools and Recommendations, etc.

Link: <https://www.imt-atlantique.fr/en/events/errie-2023-european-research-and-responsible-innovation-event>

[15/07/2023]

Quantum Chemistry & Solvation Chemistry solutions, ZASTRA Innovations, Online

Training workshop organizat de ZASTRA Innovations Privet Limited în colaborare cu Turbomole și Biovia: Fast and robust quantum chemistry with Turbomole, A leading application in solvation chemistry with COSMOSuite, and Solvation chemistry: Predicting solutions.

[15/01/2020]

Molecular Sciences Software Institute (MOLSSI) : Best practices, Buffalo NY, SUA

Training workshop: Programming frameworks, Conda & Python, Git version control, GitHub workflows, online code repositories.

Link: <https://molssi.org/>

[28/09/2015 – 02/10/2015]

TALISMAN ThUL School, Karlsruher, Germania

Școală de training, de toamnă, organizată de Karlsruher Institute Für Technologie (Germania): Relativistic quantum chemistry of actinides, theoretical description of interfaces, spectroscopy for actinide research, molecular dynamics in actinide research

Link: https://www.ine.kit.edu/downloads/20150617_Poster_Thul_School_4Cjpg.pdf

[06/07/2014 – 18/07/2014]

13th Sostrup Summer School, Ry, Danemarca

Școală de training, de toamnă, organizată de Aarhus University, Departamentul de Chimie: Quantum chemistry and molecular properties

Link: <https://pure.au.dk/portal/en/activities/13th-sostrup-summer-school-quantum-chemistry-and-molecular-proper>

[01/09/2012 – 07/09/2012]

7th International Intensive Course of the TCCM European Master, Perugia, Italia

Curs intensiv organizat de EMTCCM - Erasmus Mundus Master la Universitatea din Perugia: quantum chemistry, electronic structure theory & ab initio approaches, computational chemistry with high performance computing clusters, massively-distributed computing, European GRID Infrastructure

Link: <https://www.emtccm.org/>

[11/06/2012 – 15/06/2012]

TCCM Summer School on Solid State Chemistry, Zaragoza, Spania

Școală de training, de toamnă, organizată de EMTCCM - Erasmus Mundus Master la ZCAM Zaragoza: solid state chemistry, theory & ab initio calculations

[11/06/2012 – 15/06/2012]

TCCM Summer School on Molecular Excited States, Zaragoza, Spain

Școală de training, de toamnă, organizată de EMTCCM - Erasmus Mundus Master la ZCAM Zaragoza: molecular excited states, theory & ab initio calculations

DISTINȚII ONORIFICE ȘI PREMII

[27/06/2024] Primăria și Consiliul Local Cluj-Napoca

Premiul I, cel mai bun cercetător din România cu vârsta sub 35 ani

Premiul „Tineri Cercetători în știință și inginerie” pentru recunoașterea tinerilor cercetători din domeniul științei și ingineriei. Concurs organizat de Primăria municipiului Cluj-Napoca, împreună cu prof. Rada Flavia Mihalcea (Universitatea Michigan, SUA).

Link: <https://primariaclužnapoca.ro/evenimente/tinerii-cercetatori-premiul-pentru-stiinta-si-inginerie/#c4aa8775190ead201>

PROIECTE

[10/09/2024 – 31/12/2025]

Magnetismul și luminiscenta elementelor din blocul f

Agenția de finanțare: Unitatea Executivă pentru Finanțarea Învățământului Superior, a Cercetării, Dezvoltării și Inovării (UEFISCDI)

Acronim și cod proiect: Flumag, PN-IV-P8-8.3-PM-RO-FR-2024-00-22

Descriere: Proiect de cercetare bilaterală România-Franța

Instituția parteneră: Institut des Sciences Chimiques de Rennes - CNRS UMR 6226 Univ Rennes

Buget: 14.870,00 RON

Echipa: D.-C. Sergentu (director de proiect), I. Humelnicu (membru proiect) și I. G. Bejan (membru proiect)

Link: <https://sites.google.com/view/flumag-project/pagina-de-pornire>

[01/11/2022 – 31/12/2023]

New tools for the rational design of lanthanide-based single molecule magnets by combined model and effective Hamiltonian approaches

Agenția de finanțare: UE prin programul Marie Skłodowska Curie (MSCA) - BIENVENUE COFUND

Acronim proiect: Newmag

Descriere: Proiect de cercetare în chimia teoretică a magnetismului molecular

Instituția: Institut des Sciences Chimiques de Rennes - CNRS UMR 6226 Univ Rennes

Buget: 4310 EURO / lună (brut) plus 200 EURO / lună fonduri de mobilitate

Echipa: D.-C. Sergentu (director de proiect), R. Maurice (mentor), B. Le Guennic (mentor)

Link: <https://bienvenue.bretagne.bzh/temoignage/dumitru-claudiu-sergentu-computational-chemist/>

[01/07/2019]

Chimia Coordinativă a Actinium-lui 225

Agenția de finanțare: Unitatea Executivă pentru Finanțarea Învățământului Superior, a Cercetării, Dezvoltării și Inovării (UEFISCDI)

Competiția: PD2019

Cod proiect: PN-IV-P8-8.3-PM-RO-FR-2024-00-22

Notă: Proiect câștigat cu cel mai mare punctaj la nivel național (98.6). Din cauza epidemiei de COVID și a contextului complicat din acea perioadă, am fost nevoit să renunț la semnarea contractului și implementarea proiectului finanțat.

SCIENTOMETRIE

H-Index

23 (Scholar), 20 (WoS)

Număr de citări

1749 (Scholar), 1382 (WoS)

ResearcherID

Y-4857-2019

ORCID

0000-0001-6570-5245

PUBLICAȚII ȘTIINȚIFICE (PE SCURT)

Nature (1)

Science (1)

Nature Communications (4)

Journal of the American Chemical Society (3)

Angewandte Chemie International Edition (3)

Chemical Science (3)

Inorganic Chemistry (5)

Physical Chemistry Chemical Physics (4)

Chemistry - A European Journal (3)

Journal of Computational Chemistry (3)

Journal of Chemical Physics (2)

Journal of Physical Chemistry Letters (1)

Scientific Reports (1)

Dalton Transactions (1)

Chemical Communications (1)

Journal of Chemical Theory and Computation (1)

PUBLICAȚII GRAFICE

Inorganic Chemistry (front cover, pubs.acs.org/IC, Vol. 61, No 9, 2022)

Chemistry - A European Journal (author cover profile, [10.1002/chem.202101162](https://doi.org/10.1002/chem.202101162))

Chemistry - A European Journal (front cover, [10.1002/chem.202101160](https://doi.org/10.1002/chem.202101160))

Chemical Science (frontispiece, [10.1039/c9sc01960j](https://doi.org/10.1039/c9sc01960j))

Chemistry - A European Journal (frontispiece, [10.1002/chem.202080862](https://doi.org/10.1002/chem.202080862))

Journal of The American Chemical Society (front cover, pubs.acs.org/JACS, Vol. 140, No. 13, 2018)

Chemistry - A European Journal (inside cover, [10.1002/chem.201600198](https://doi.org/10.1002/chem.201600198))

Physical Chemistry Chemical Physics (frontispiece, [10.1039/c6cp05028j](https://doi.org/10.1039/c6cp05028j))

Journal of Computational Chemistry (front cover, [10.1002/jcc.25103](https://doi.org/10.1002/jcc.25103))

ACTIVITATE PEER-REVIEW (SELECȚIE)

Nature Chemistry (1)

Nature Communications (1)

Physical Review Letters (2)

Physical Review A (2)

Physical Review B (3)

Physical Review Materials (1)

Physical Review Research (1)

Physical Chemistry Chemical Physics (5)

Chemical Communications (1)

Inorganic Chemistry (3)

Chemical Physics Letters (1)

Magnetochemistry (1)

ChemPhysChem (2)

Dalton Transactions (2)

Chemistry - A European Journal (2)

PUBLICAȚII

Inorg. Chem. 2025, 64, 5996

A. M. Toader, M. C. Buta, I. Humelnicu, W. Urland, M. Suta*, D.-C. Sergentu(*autor corespondent), F. Cimpoesu*, "Ab Initio Modeling of the Photoluminescence of $\text{SrCl}_2\text{:Eu}^{2+}$ —Direct Comparison between Density Functional and Wave Function Theory-Based Approaches"

Science 2025, 387, 974

D. R. Russo, A. N. Gaiser, A. N. Price, D.-C. Sergentu (*autor prim cu contribuții egale) and J. N. Wacker, N. Katzer, A. A. Peterson, J. A. Branson, X. Yu, S. N. Kelly, E. T. Ouellette, J. Arnold, J. R. Long, W. W. Lukens, S. J. Teat, R. J. Abergel, P. L. Arnold, J. Autschbach and S. G. Minasian, "Berkelium-carbon bonding in a tetravalent berkelocene"

J. Phys. Chem. Lett. 2018, 9, 5583

D.-C. Sergentu, T. J. Duignan and J. Autschbach, "Ab initio study of covalency in the ground versus core-excited states X-ray absorption spectra of actinide complexes"

J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 25640

J. A. Bronson, P. W. Smith, D.-C. Sergentu, D. R. Russo, H. Gupta, C. H. Booth, J. Arnold, E. J. Schelter, J. Autschbach and S. G. Minasian, "The Counterintuitive Relationship between Orbital Energy, Orbital Overlap, and Bond Covalency in CeF_6^{2-} and CeCl_6^{2-} "

Phys. Chem Chem. Phys. 2024, 26, 6844

D.-C. Sergentu, B. Le Guennic and R. Maurice, *"The resolution of the weak-exchange limit made rigorous, simple and general in binuclear complexes"*

J. Chem. Theory Comput. 2023, 19, 6933

G. Li Manni, I. F. Galván, ..., D.-C. Sergentu, ..., and R. Lindh, *"The OpenMolcas Web: A Community-Driven Approach to Advancing Computational Chemistry"*

Nature Commun. 2023, 14, 3134

A. Ramanathan, J. Kaplan, D.-C. Sergentu, J. A. Branson, M. Ozerov, A. I. Kolesnikov, S. G. Minasian, J. Autschbach, J. W. Freeland, Z. Jiang, M. Mourigal and H. S. La Pierre, *"Chemical design of electronic and magnetic energy scales in tetravalent praseodymium"*

Nature Commun. 2022, 13, 7192

Q. Meng, L. Abella, Y.-R. Yao, D.-C. Sergentu, W. Yang, X. Liu, J. Zhuang, L. Echegoyen, J. Autschbach, and N. Chen, *"UN@C₈₂: A U≡N triple bond captured inside fullerene cages"*

Chem. Sci. 2022, 13, 3194

D.-C. Sergentu and J. Autschbach, *"Covalency in actinide(IV) hexachlorides in relation to chlorine K-edge X-ray absorption structure"*

Dalton Trans. 2022, 51, 1754

D.-C. Sergentu and J. Autschbach, *"X-ray absorption spectra of f-element complexes: Insight from relativistic multiconfigurational wavefunction theory"*

Inorg. Chem. 2022, 61, 3821

D.-C. Sergentu, F. Gendron, E. D. Walter, S. Park, C. Capan, R. G. Surbella, C. Z. Soderquist, G. B. Hall, S. I. Sinkov, J. Autschbach, and H. Cho, *"Equatorial electronic structure in the uranyl ion: Cs₂UO₂Cl₄ and Cs₂UO₂Br₄"*

Inorg. Chem. 2021, 60, 17744

X. Yu, D.-C. Sergentu, R. Feng, and J. Autschbach, *"Covalency of Trivalent Actinide Ions with Different Donor Ligands : Do Density Functional and Multiconfigurational Wavefunction Calculations Corroborate the Observed "Breaks"?"*

Chem. Eur. J. 2021, 27, 7239

D.-C. Sergentu (*author correspondent), C. Booth and J. Autschbach, *"Probing multiconfigurational states by spectroscopy: The cerium XAS L3-edge puzzle"*

Chem. Commun. 2021, 57, 9562

Y. Qiao, G. Ganguly, C. H. Booth, J. A. Branson, A. S. Ditter, D. J. Lussier, L. M. Moreau, D. R. Russo, D.-C. Sergentu, D. K. Shuh, T. Sun, J. Autschbach and S. G. Minasian *"Enhanced 5f-δ bonding in [U(C₇H₇)₂]⁻: C K-edge XAS, magnetism, and ab initio calculations"*

Nat. Commun. 2021, 12, 1713

G. B. Panetti, [D.-C. Sergentu](#), M. R. Gau, J. Autschbach, P. J. Walsh, and E. J. Schelter, "Isolation and characterization of a covalent Ce^{IV}-aryl complex with an anomalous ¹³C chemical shift"

[Inorg. Chem. 2020, 59, 10138](#)

[D.-C. Sergentu](#), G. Kent, S. Staun, X. Yu, H. Cho, J. Autschbach and T. Hayton, "Probing the electronic structure of a thorium nitride complex by solid-state ¹⁵N NMR spectroscopy"

[J. Comput. Chem. 2020, 41, 2055](#)

C. G. Pech, Pi A. B. Haase, [D.-C. Sergentu](#), A. Borschevsky, J. Pilmé, N. Galland and R. Maurice, "Quantum chemical topology at the spin-orbit configuration interaction level: Application to astatine compounds"

[Nature, 2020, 583, 396](#)

J. M. Sperling, E. J. Warzecha, C. Celis-Barros, [D.-C. Sergentu](#), X. Wang, B. E. Klamm, C. J. Windorff, A. N. Gaiser, F. D. White, D. A. Beery, A. T. Chemey, M. A. Whitefoot, B. N. Long, K. Hanson, P. Kögerler, M. Speldrich, E. Zurek, J. Autschbach and T. E. Albrecht-Schönzart, "Compression of curium pyrrolidinedithiocarbamate enhances covalency"

[J. Chem. Phys. 2020, 152, 214117](#)

F. Aquilante, J. Autschbach, A. Baiardi, S. Battaglia, V. Borin, L. Chibotaru, I. Conti, L. De Vico, M. Delcey, I. Fdez. Galván, N. Ferré, L. Freitag, M. Garavelli, X. Gong, S. Knecht, E. Larsson, R. Lindh, M. Lundberg, P.-A. Malmqvist, A. Nenov, J. Norell, M. Odellius, M. Olivucci, T. Pedersen, L. Pedraza-González, Q. Phung, K. Pierloot, M. Reiher, I. Schapiro, J. Segarra-Martí, F. Segatta, L. Seijo, S. Sen, [D.-C. Sergentu](#), C. Stein, L. Ungur, M. Vacher, A. Valentini and V. Veryazov, "Modern quantum chemistry with [Open]Molcas"

[Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 13586](#)

J. Sears, [D.-C. Sergentu](#), T. Baker, W. Brennessel J. Autschbach and M. Neidig, "The exceptional diversity of homoleptic uranium-methyl complexes"

[Chem. Eur. J. 2020, 26, 1776](#)

G. Ganguly, [D.-C. Sergentu](#) (*autor prim cu contribuție egală), and J. Autschbach, "Ab initio analysis of metal-ligand bonding in An(COT)₂ with An = Th, U in their ground and core-excited states"

[J. Am. Chem. Soc. 2019, 141, 20249](#)

J. Zhuang (*equal contribution), L. Abella (*equal contribution), [D.-C. Sergentu](#) (*equal contribution), Y.-R. Yao, M. Jin, W. Yang, X. Zhang, X. Li, D. Zhang, Y. Zhao, Xi. Li, S. Wang, L. Echegoyen, J. Autschbach and N. Chen, "Diuranium(IV) carbide cluster U₂C₂ stabilized inside fullerene cages"

[Inorg. Chem. 2019, 58, 12654](#)

M. K. Assefa, [D.-C. Sergentu](#), L. A. Seaman, G. Wu, J. Autschbach and T. W. Hayton "Synthesis, characterization, and electrochemistry of the homoleptic f element ketimide complexes [Li]₂[M(N=C^tBuPh)₆] (M = Ce, Th)"

[Chem. Sci. 2019, 10, 6431](#)

S. Staun, [D.-C. Sergentu](#), G. Wu, J. Autschbach and T. W. Hayton, "Use of ¹⁵N NMR spectroscopy to probe covalency in a thorium nitride"

Angew. Chem. Int. Ed. **2019**, **58**, 10266

N. J. Wolford, [D.-C. Sergentu](#), W. Brennessel, J. Autschbach and M. Neidig, "*Homoleptic aryl complexes of uranium(IV)*"

Phys. Chem. Chem. Phys. **2019**, **21**, 5586

Y. Heit (*equal contribution), [D.-C. Sergentu](#) (*equal contribution), and J. Autschbach, "*Magnetic circular dichroism spectra of transition metal complexes calculated from restricted active space wavefunctions*"

Nat. Commun. **2018**, **9**, 2753

X. Zhang, W. Li, L. Feng, X. Chen, A. Hansen, S. Grimme, S. Fortier, [D.-C. Sergentu](#), T. J. Duignan, J. Autschbach, S. Wang, Y. Wang, G. Velkos, A. A. Popov, N. Aghdassi, S. Duhm, X. Li, J. Li, L. Echegoyen, W. H. E. Schwarz and N. Chen, "*A diuranium carbide cluster stabilized inside a C₈₀ fullerene cage*"

Chem. Sci. **2018**, **9**, 6292

[D.-C. Sergentu](#), F. Gendron and J. Autschbach, "*Similar ligand-metal bonding for transition metals and actinides? 5f¹ U(C₇H₇)₂⁻ versus 3dⁿ metallocenes*"

J. Am. Chem. Soc. **2018**, **140**, 4588

Y. Quao (*equal contribution), [D.-C. Sergentu](#) (*equal contribution), H. Yin, A. V. Zabula, T. Cheisson, A. Mc Skimming, B. C. Manor, P. J. Carroll, J. A. Anna, J. Autschbach and E. J. Schelter, "*Understanding and controlling the emission brightness and color of molecular cerium luminophores*"

J. Comput. Chem. **2017**, **38**, 2753

M. Amaouch, [D.-C. Sergentu](#), D. Steinmetz, R. Maurice, N. Galland, R. Maurice and J. Pilmé, "*The bonding picture in hypervalent XF₃ (X = Cl, Br, I, At) fluorides revisited with quantum chemical topology*"

Sci. Rep. **2017**, **7**, 2579

D. Teze, [D.-C. Sergentu](#), V. Kalichuk, J. Barbet, D. Deniaud, N. Galland, R. Maurice and G. Montavon, "*Targeted radionuclide therapy with astatine-211: Oxidative dehalogenation of astatobenzoate conjugates*"

Angew. Chem. **2016**, **55**, 15369

N. Guo, [D.-C. Sergentu](#), D. Teze, R. Maurice, J. Champion, N. Galland and G. Montavon, "*The heaviest possible ternary trihalogen species, AtIBr⁻, evidenced in aqueous solution: An experimental effort driven by computations*"

Phys. Chem. Chem. Phys. **2016**, **18**, 32703

[D.-C. Sergentu](#), F. Réal, G. Montavon, N. Galland and R. Maurice, "*Unravelling the hydration-induced ground-state change of AtO⁺ by relativistic and multiconfigurational wave-function-based methods*"

J. Comput. Chem. **2016**, **37**, 1345

[D.-C. Sergentu](#), G. David, G. Montavon, R. Maurice and N. Galland, "*Scrutinizing "invisible" astatine: A challenge for modern density functionals*"

Chem. Eur. J. **2016**, **22**, 2964

D.-C. Sergentu, D. Teze, A. Sabatié-Gogova, C. Alliot, N. Guo, F. Basal, I. Da Silva, D. Deniaud, R. Maurice, J. Champion, N. Galland and G. Montavon, "Advances on the determination of the astatine Pourbaix diagram: Predomination of $\text{AtO}(\text{OH})_2^-$ over At^- in basic conditions"

J. Chem. Phys. 2015, 143, 114306

D.-C. Sergentu, M. Amaouch, J. Pilmé, N. Galland and R. Maurice, "Electronic structures and geometries of the XF_3 ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{At}$) fluorides"

Phys. Chem. Chem. Phys. 2014, 16, 25393

D.-C. Sergentu, R. Maurice, R. W. A. Havenith, R. Broer and D. Roca-Sanjuán, "Computational determination of the dominant triplet population mechanism in photoexcited benzophenone"

CONFERINȚE ȘI SEMINARE

[13/03/2025] Sala Senatului, Universitatea „Alexandru Ioan Cuza” din Iași, România

RECENTly-AIRed Rare Bonds: The Road to Berkelocene Science

PERFECT RECENT AIR – serie de prelegeri; prezentare susținută în fața unui public larg

Link: <https://recent-air.uaic.ro/cercetare.php>

[12/12/2024 – 13/12/2024] "Alexandru Ioan Cuza" University of Iași, Iași, România

Recent Advances in Natural Sciences Yield the Future for the European Citizens and Society

D.-C. Sergentu "Electronic structure and metal-ligand bonding in tetravalent cerium complexes: Computational chemistry experiments" (oral presentation)

[11/09/2024 – 13/11/2024] Petru Poni Institute for Macromolecular Chemistry, Iași, Romania

PolyChar World Forum on Advanced Materials (POLY CHAR'30)

D.-C. Sergentu, I. Humelnicu și J. Autschbach „Insights Into Electronic Structure and Metal-Ligand Bonding in f-Element Systems Through Computational X-ray Absorption Spectroscopy" (oral presentation)

[27/06/2024] Online event, Babeș-Bolyai University, Cluj-Napoca, Romania

The MolMod Lectures 2023-2024

D.-C. Sergentu, "Newmag: New tools for the rational design of single molecular magnets by combined model and effective Hamiltonian approaches" (oral presentation)

[14/05/2024 – 16/05/2024] University of Rennes, Rennes, France

CoFRO: Coordination Chemistry between France and Romania

D.-C. Sergentu, I. Humelnicu și J. Autschbach "Tetravalent cerium coordination: Understanding the L3-edge X-ray absorption structure in organocerium complexes" (oral presentation)

[13/11/2023 – 16/11/2023] Mittelwihr, France

Journées de l'Association française de Magnétisme Moléculaire (JAM2-2023)

D.-C. Sergentu, B. Le Guennic, R. Maurice "Simple resolution of the standard multispin Hamiltonian in the weak exchange regime" (oral presentation)

[25/09/2023 – 27/09/2023] Romanian Academy, Bucharest, Romania

International Conference of Physical Chemistry (ROMPHYSICHEM 17)

D.-C. Sergentu, B. Le Guennic, R. Maurice *"Simple resolution of the standard multispin Hamiltonian in binuclear complexes"* (oral presentation)

[26/06/2023 – 01/07/2023] Bratislava, Slovakia

17th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC2023)

D.-C. Sergentu, B. Le Guennic and R. Maurice *"The resolution of the weak-exchange limit made rigorous, simple and general in binuclear complexes: A theoretical feat"* (oral presentation)

[10/05/2023 – 11/05/2023] IMT Atlantique, Brest, France

European Responsible Research and Innovation Event 2023 (ERRIE 2023)

D.-C. Sergentu *"NewMag: New tools for the rational design of single molecule magnets by model and effective Hamiltonian approaches"* (poster presentation)

[03/09/2018 – 07/09/2018] Oviedo, Spain

2nd European Symposium on Chemical Bonding (ESCB2)

D.-C. Sergentu and J. Autschbach, *"X-ray absorption spectroscopy: Chemical bonding in actinide complexes from ab initio multireference wavefunction approaches"* (poster presentation)

[27/06/2016 – 30/06/2016] Le Havre, France

7th International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (IMAMPC)

D.-C. Sergentu, F. Réal, N. Galland and R. Maurice, *"The peculiar electronic structure of AtO⁺ in water"* (poster presentation)

[28/09/2015 – 02/10/2015] Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Germany

TALISMAN ThUL School in Actinide Chemistry

D.-C. Sergentu, N. Galland and R. Maurice, *"Ground-state reversal induced by solvation: Electronic structure of AtO⁺ in water"* (poster presentation)

[31/08/2015 – 04/09/2015] Debrecen, Hungary

2nd European Symposium on Density Functional Theory and its Applications

D.-C. Sergentu, N. Galland and R. Maurice, *"Electronic structures of the XF₃ (X = Cl, Br, I, At) fluorides and topology of their potential energy surfaces"* (oral presentation)

[06/07/2014 – 18/07/2014] Ry, Denmark

SOSTRUP Summer School : Quantum Chemistry and Molecular Properties

D.-C. Sergentu, J. Champion, A. Sabatié-Gogova, J.-Y. Le Questel, R. Maurice, G. Montavon and N. Galland, *"Investigation of the AtO(OH)⁻ hydrolysed species: Relativistic calculations"* (poster presentation)

[02/09/2013 – 06/09/2013] Sopron, Hungary

9th European Conference on Computational Chemistry (EUCCO-CC)

D.-C. Sergentu, D. Roca-Sanjuán, R. W. A. Havenith and R. Braam-Broer, *"Revisiting the intersystem crossing in benzophenone"* (oral presentation)

[25/11/2022] ISCR CNRS UMR-6226, Rennes, France

Group Seminar

D.-C. Sergentu and J. Autschbach, "*Electronic structure and metal-ligand bonding in f-element systems: Lessons learned from ab initio X-ray absorption structure (XAS) calculations*"

[15/12/2023] ISCR CNRS UMR-6226, Rennes, France

Group Seminar

D.-C. Sergentu, B. Le Guennic and R. Maurice, "*NewMag: New tools for the rational design of SMMs by combined model and effective Hamiltonian approaches*"

[25/11/2024] ISCR CNRS UMR-6226, Rennes, France

Wide-Public Seminar

D.-C. Sergentu, B. Le Guennic and R. Maurice, "*A New Route to Computing Crystal Field Parameters and Magnetic Coupling Constants Involving f-Orbitals*"

[25/09/2019] SUNY Buffalo, Buffalo NY, USA

Group Seminar

D.-C. Sergentu, "*²²⁵Actinium (coordination) chemistry*"

[20/11/2018] SUNY Buffalo, Buffalo NY, USA

Group Seminar

D.-C. Sergentu, "*Actinide chemical bonding from ab initio X-ray absorption spectroscopy (XAS)*"

[06/2015] Le Mans, France

Journées de l'Ecole Doctorale 3MPL

D.-C. Sergentu, R. Maurice and N. Galland, "*Investigating AtO⁺-(OH)_n complexes at the molecular scale using quantum mechanical methods*" (oral presentation)

[06/2014] Nantes, France

Journées de l'Ecole Doctorale 3MPL

D.-C. Sergentu, J. Champion, A. Sabatié-Gogova, J.-Y. Le Questel, R. Maurice, G. Montavon and N. Galland, "*Theoretical investigation of the AtO⁺ hydrolysed species in ligand-exchange reactions including solvation effects*" (poster presentation)

[04/2014] University of Groningen, Groningen, The Netherlands

Group Seminar

D.-C. Sergentu, R. Maurice and N. Galand, "*Pseudo Jahn-Teller effect, spin-orbit coupling and electron correlation in the XF₃ (X = Cl, Br, I, At) series*"

[03/2013] IFW Dresden, Dresden, Germany

Group Seminar

D.-C. Sergentu, R. Maurice, R. W. A. Havenith, R. Broer and D. Roca-Sanjuán, "*Revisiting the intersystem crossing in benzophenone*"
