

FIȘA DE EVALUARE GENERALĂ A STANDARDELOR UNIVERSITĂȚII

I. Evaluarea contribuțiilor profesionale și de cercetare

CRITERII	DESCRIPTORI	PUNCTAJE ACORDATE
I.1. ACTIVITATEA DE CERCETARE (70%)	1. Articole științifice publicate <i>in extenso</i> în reviste cotate <i>Web of Science</i> cu factor de impact	(60 puncte x factor de impact + 25) / număr autori
	2. Articole științifice publicate <i>in extenso</i> în reviste indexate fără factor de impact	20 puncte / număr autori
	3. Articole științifice publicate <i>in extenso</i> în reviste indexate BDI	15 puncte / număr autori
	4. Articole științifice publicate <i>in extenso</i> în volumele conferințelor	indexate ISI: 30 puncte / număr autori
		indexate în BDI: 15 puncte / număr autori
		alte categorii: 5 puncte / număr autori
	5. Cărți științifice publicate (doar prima ediție)	edituri academice internaționale: 100 puncte la 100 pagini / număr autori
		alte edituri internaționale: 70 puncte la 100 pagini / număr autori
		edituri academice naționale: 50 puncte la 100 pagini / număr autori
		alte edituri naționale: 20 puncte la 100 pagini / număr autori
	6. Cărți științifice traduse și publicate în edituri din străinătate	100 puncte la 100 pagini / număr autori
	7. Coordonarea și editarea de volume, traduceri și antologii	edituri academice internaționale: 60 puncte / număr autori
		alte edituri internaționale: 40 puncte / număr autori
		edituri academice naționale: 30 puncte / număr autori
		alte edituri naționale: 15 puncte / număr autori
	8. Articole publicate în dicționare și enciclopedii	edituri academice internaționale: 30 puncte / număr autori
		alte edituri internaționale: 20 puncte / număr autori
		edituri academice naționale: 15 puncte / număr autori
		alte edituri naționale: 5 puncte / număr autori
	9. Contracte de cercetare științifică în instituții academice (universități, institute ale Academiei Române, institute naționale de cercetare, institute de cercetare din străinătate, alte categorii de institute academice)	contracte internaționale – director: 100 puncte pentru fiecare 100.000 Euro
		contracte internaționale – membru: 100 puncte pentru fiecare 100.000 Euro / numărul membrilor echipei de cercetare
		contracte naționale – director: 50 puncte pentru fiecare 500.000 lei
		contracte naționale – membru: 50 puncte pentru fiecare 500.000 lei / numărul membrilor echipei de cercetare
	10. Contracte de cercetare în mediul de afaceri și sectorul public	organizații internaționale: 100 puncte pentru fiecare 100.000 Euro
		firmе multinaționale: 100 puncte



CRITERII	DESCRIPTORI	PUNCTAJE ACORDATE
		pentru fiecare 100.000 Euro
		firme naționale: 50 puncte pentru fiecare 500.000 Euro
		organizații administrative naționale: 40 puncte pentru fiecare 500.000 Euro
		alte organizații publice de nivel național: 30 puncte pentru fiecare 500.000 Euro
	11. Brevete	internationale: 100 puncte / număr de autori
		naționale: 30 puncte / număr autori
	12. Citări și recenzii ale lucrărilor științifice	reviste de specialitate din străinătate: $(10 + 20 \times \text{factor de impact})$ / număr autori, pentru fiecare citare
		reviste de specialitate din țară: $(5 + 10 \times \text{factor de impact})$ / număr autori, pentru fiecare citare
		monografii academice din străinătate: 50 puncte / număr autori, pentru fiecare citare
		monografii academice din țară: 25 puncte / număr autori, pentru fiecare citare
	13. Lucrări susținute în calitate de invitat la manifestări științifice (conferințe, congrese, simpozioane, seminarii și ateliere de lucru)	străinătate: 25 puncte pentru fiecare activitate
		țară: 10 puncte pentru fiecare activitate
	14. Profesor/cercetător invitat la universități/institute de cercetare	străinătate: 25 puncte pentru fiecare activitate
		țară: 10 puncte pentru fiecare activitate
	15. Editor/Membru în <i>Editorial Board & Advisory Board</i>	reviste cotate <i>Web of Science</i> : editor, 30 puncte pentru fiecare revistă; membru, 20 puncte pentru fiecare revistă
		reviste internaționale și alte reviste ale Universității: editor, 15 puncte pentru fiecare revistă; membru, 10 puncte pentru fiecare revistă
	16. Premii internaționale obținute printr-un proces de selecție	100 puncte / categorie / număr persoane
	17. Premii ale Academiei Române	50 puncte/categorie, indiferent de nr. de autori (HS nr. 7/27.03.2014)
	18. Alte premii naționale ale instituțiilor culturale	20 puncte / categorie / număr persoane
	19. Participări la manifestări științifice	internationale: președinte comitet organizare/consiliu științific, 25 puncte pentru fiecare activitate; membru comitet organizare/consiliu științific, 15 puncte pentru fiecare activitate; moderator de panel, 15 puncte pentru fiecare activitate; raportor pe secțiuni/paneluri, 10 puncte pentru fiecare activitate



CRITERII	DESCRIPTORI	PUNCTAJE ACORDATE
		naționale: președinte comitet organizare/consiliu științific, 15 puncte pentru fiecare activitate; membru comitet organizare/consiliu științific, 5 puncte pentru fiecare activitate; moderator de panel, 5 puncte pentru fiecare activitate; raportor pe secțiuni/paneluri, 2 puncte pentru fiecare activitate
I.2. ACTIVITATEA DIDACTICĂ (30%)	1. Tratate și manuale universitare	30 puncte la 100 pagini / număr de autori
	2. Proiecte didactice (înființare/dotare laboratoare licență, master, săli workshop, biblioteci proprii facultăților, departamentelor, laboratoarelor și grupurilor de cercetare)	40 puncte pentru fiecare activitate
	3. Materiale suport curs, seminar, lucrări practice și programe analitice detaliate	10 puncte pentru fiecare activitate
	4. Organizare de aplicații și practică de specialitate	5 puncte pentru fiecare activitate



CRITERIUL	DESCRIPTORI	PUNCTAJUL ACORDAT
II. Evaluarea prestației didactice și de consiliere a studenților (se face de către studenți conform fișei din anexa 2, din regulament)	Evaluare studenți - date preluate din Decanat	
III. Evaluarea gradului de îndeplinire a obligațiilor didactice și a respectării, prevederilor esențiale ale Cartei referitoare la prestigiul și interesele Universității și ale comunității academice universitare;	Director departament	
IV. Evaluarea gradului de îndeplinire a unor obiective specifice, stabilite în acord cu misiunea și obiectivele Universității, ale facultății sau departamentului.	a) inițierea, conducerea sau participarea la elaborarea și derularea unor programe și activități de interes major pentru Universitate sau facultate;	15 puncte pentru fiecare activitate
	b) contribuții specifice la realizarea misiunii și obiectivelor Universității, facultății sau departamentului;	b).1. comisii elaborare subiecte pentru Concursul de Chimie “Magda Petrovanu” – 20 pct. b).2. comisii supraveghere pentru Concursul de Chimie “Magda Petrovanu” – 10 pct. b).3. comisii orar, alte comisii – 15 pct. b).4. depunerea unui contract de cercetare (eligibil) – 30 pct.
	c) participarea la jurii sau comisii de specialitate, în țară și străinătate;	15 puncte – internaționale 5 puncte - naționale
	d) activități ca membru în asociații științifice și profesionale, din țară și străinătate;	10 puncte – internaționale 5 puncte - naționale



	e) inițierea, coordonarea sau participarea la programe de cooperare internațională (<i>TEMPUS, SOCRATES, COPERNICUS</i> etc.);	e).1. inițierea de programe – 15 puncte e).2. coordonarea de programe – 10 puncte e).3. participarea la programe – 5 puncte
	f) activități ca membru în colectivul de redacție al unor reviste științifice din țară sau din străinătate;	15 puncte – internaționale 5 puncte - naționale
	g) organizarea de congrese, conferințe sau alte manifestări științifice;	15 puncte – internaționale 5 puncte - naționale
	h) contribuții la obținerea unor rezultate performante de către personalul didactic și studenți într-un domeniu de mare interes pentru Universitate sau Facultate.	15 puncte – internaționale 10 puncte - naționale

Total Criteriul I: **3487.54**

Total Criteriul II: **0**

Total Criteriul III: **0**

Total Criteriul IV: **0**

Total general: **3487.54**

Data: 3 Iunie 2019

Semnătura: DUMITRU CLAUDIU SERGENTU

FIȘĂ DE AUTOEVALUARE

în conformitate cu prevederile fișei de evaluare generală a standardelor Universității

ANEXA 1

CRIT.	DESCRIPTORI	PUNCTAJ
ACTIVITATEA DE CERCETARE ȘI DIDACTICĂ	1. Articole științifice publicate în extenso în reviste cotate Web of Science cu factor de impact	1114.59
	2. Articole științifice publicate în extenso în reviste indexate fără factor de impact	0
	3. Articole științifice publicate în extenso în reviste indexate BDI	0
	4. Articole științifice publicate în extenso în volumele conferințelor	0
	5. Cărți științifice publicate (doar prima ediție)	0
	6. Cărți științifice traduse și publicate în edituri din străinătate	0
	7. Coordonarea și editarea de volume, traduceri și antologii	0
	8. Articole publicate în dicționare și enciclopedii	0
	9. Contracte de cercetare științifică în instituții academice (universități, institute ale Academiei Române, institute naționale de cercetare, institute de cercetare din străinătate, alte categorii de institute academice)	0
	10. Contracte de cercetare în mediul de afaceri și sectorul public	0
	11. Brevete	0
	12. Citări și recenzii ale creației de autor	2172.95
	13. Lucrări susținute în calitate de invitat la manifestări științifice (conferințe, congrese, simpozioane, seminarii și ateliere de lucru)	0
	14. Profesor/cercetător invitat la universități/institute de cercetare	100
	15. Editor, membru în Editorial Board la reviste și edituri recunoscute	0
	16. Premii internaționale obținute printr-un proces de selecție	0
	17. Premii ale Academiei Române	0
	18. Alte premii naționale ale instituțiilor culturale	0
	19. Participări la manifestări științifice	100
	CERCETARE	3487.54
	1. Tratatate și manuale universitare	
	2. Proiecte didactice (înfăințare/dotare laboratoare licență, master, săli workshop, 0 biblioteci proprii facultăților, departamentelor, laboratoarelor și grupurilor de cercetare)	
	3. Materiale suport curs, seminar, lucrări practice și programe analitice detaliate	0
	4. Organizare de aplicații și practică de specialitate	0
	DIDACTIC	0
TOTAL		3487.54

LISTĂ DETALIATĂ

ACTIVITATEA DE CERCETARE

Total CERCETARE: 3113.86 puncte

1. Articole științifice publicate în extenso în reviste cotate Web of Science cu factor de impact	
Total: 1114.59 puncte	
1. "Homoleptic aryl complexes of uranium(IV)", N. J. Wolford, D.-C. Sergentu , W. Brennessel, J. Autschbach and M. Neidig, <i>Angew. Chem. (IF=12.102)</i> , 2019, DOI: 10.1002/anie.201905423.	(60x12.102+25)/5 = 150.22
2. "Magnetic circular dichroism spectra of transition metal complexes calculated from restricted active space wavefunctions", Y. Heit, D.-C. Sergentu and J. Autschbach, <i>Phys. Chem. Chem. Phys. (IF=3.906)</i> , 2019, 21, 5586. (<i>signed as first author</i>)	(60x3.906+25)/3 = 86.45
3. "Ab initio study of covalency in the ground versus core-excited states X-ray absorption spectra of actinide complexes", D.-C. Sergentu , T. J. Duignan and J. Autschbach, <i>J. Phys. Chem. Lett. (IF=8.709)</i> , 2018, 9, 5583.	(60x8.709+25)/3 = 182.51
4. "A diuranium carbide cluster stabilized inside a C ₈₀ fullerene cage", 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, <i>Nat. Commun. (IF=12.353)</i> , 2018, 9, 2753.	(60x12.353+25)/2 = 38.31
5. "Similar ligand-metal bonding for transition metals and actinides? 5f ¹ U(C ₇ H ₇) ²⁻ versus 3d ⁿ metallocenes", D.-C. Sergentu , F. Gendron and J. Autschbach, <i>Chem. Sci. (IF=9.063)</i> , 2018, 9, 6292.	(60x9.063+25)/3 = 189.59
6. "Understanding and Controlling the Emission Brightness and Color of Molecular Cerium Luminophores", Y. Quao, D.-C. Sergentu , 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, <i>J. Am. Chem. Soc. (IF=14.357)</i> , 2018, 140, 4588. (<i>signed as first author</i>)	(60x14.357+25)/1 = 80.58
7. "The bonding picture in hypervalent XF ₃ (X = Cl, Br, I, At) fluorides revisited with quantum chemical topology", M. Amaouch, D.-C. Sergentu , D. Steinmetz, R. Maurice, N. Galland, R. Maurice and J. Pilmé, <i>J. Comput. Chem. (IF=3.221)</i> , 2017, 38, 2753.	(60x3.221+25)/7 = 31.18
8. "Targeted radionuclide therapy with astatine-211: Oxidative dehalogenation of astatobenzoate conjugates", D. Teze, D.-C. Sergentu , V. Kalichuk, J. Barbet, D. Deniaud, N. Galland, R. Maurice and G. Montavon, <i>Sci. Rep. (IF=4.122)</i> , 2017, 7, 2579.	(60x4.122+25)/8 = 34.04
9. "The heaviest possible ternary trihalogen species, AtI ⁺ Br ⁻ , evidenced in aqueous solution: An experimental effort driven by computations", N. Guo, D.-C. Sergentu , D. Teze, R. Maurice, J. Champion, N. Galland and G. Montavon, <i>Angew. Chem. (IF=12.102)</i> , 2016, 55, 15369.	(60x12.102+25)/7 = 107.3
10. "Unravelling the hydration-induced ground-state change of AtO ⁺ by relativistic and multiconfigurational wave-function-based methods", D.-C. Sergentu , F. Réal, G. Montavon, N. Galland and R. Maurice, <i>Phys. Chem. Chem. Phys. (IF=3.906)</i> , 2016, 18, 32703.	(60x3.906+25)/5 = 51.87
11. "Scrutinizing "invisible" astatine: A challenge for modern density functionals", D.-C. Sergentu , G. David, G. Montavon, R. Maurice and N. Galland, <i>J. Comput. Chem. (IF=3.221)</i> , 2016, 37, 1345.	(60x3.221+25)/5 = 43.65
12. "Advances on the determination of the astatine Pourbaix diagram: Predominance of [AtO(OH) ₂] ⁻ over At ⁻ in basic conditions", 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, <i>Chem. Eur. J. (IF=5.160)</i> , 2016, 22, 2964.	(60x5.160+25)/12 = 27.88
13. "Electronic structures and geometries of the XF ₃ (X = Cl, Br, I, At) fluorides", D.-C. Sergentu , M. Amaouch, J. Pilmé, N. Galland and R. Maurice, <i>J. Chem. Phys. (IF=2.843)</i> , 2015, 143, 114306.	(60x2.843+25)/5 = 39.12
14. "Computational determination of the dominant triplet population mechanism in photoexcited benzophenone", D.-C. Sergentu , R. Maurice, R. W. A. Havenith, R. Broer and D. Roca-Sanjuán, <i>Phys. Chem. Chem. Phys. (IF=3.906)</i> , 2014, 16, 25393.	(60x3.906+25)/5 = 51.87

12. Citări și recenzii ale lucrărilor științifice	
Total: 2172.95 puncte	
I. Lucrarea proprie: "Magnetic circular dichroism spectra of transition metal complexes calculated from restricted active space wavefunctions", Y. Heit, D.-C. Sergentu and J. Autschbach, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> (IF=3.906), 2019, 21, 5586. (signed as first author), este citata în:	(20 x IF+10)/3
1. Sun, S.; Williams-Young, D.; Li, X. An Ab Initio Linear Response Method for Computing Magnetic Circular Dichroism Spectra with Nonperturbative Treatment of Magnetic Field. <i>J. Chem. Theory Comput.</i> (IF=5.399) 2019, 15 (5), 3162–3169. https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00095 .	39.33
2. Jin, Q.; Chen, S.; Sang, Y.; Guo, H.; Dong, S.; Han, J.; Chen, W.; Yang, X.; Li, F.; Duan, P. Circularly Polarized Luminescence of Achiral Open-Shell π -Radicals. <i>Chem. Commun.</i> (IF=6.290) 2019. https://doi.org/10.1039/C9CC03281A .	45.27
II. Lucrarea proprie: "A diuranium carbide cluster stabilized inside a C ₈₀ fullerene cage", 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, <i>Nat. Commun.</i> (IF=12.353), 2018, 9, 2753, este citata în:	(20 x IF+10)/2 0
1. Cai, W.; Abella, L.; Zhuang, J.; Zhang, X.; Feng, L.; Wang, Y.; Morales-Martínez, R.; Esper, R.; Boero, M.; Metta-Magaña, A.; et al. Synthesis and Characterization of Non-Isolated-Pentagon-Rule Actinide Endohedral Metallofullerenes U@C ₁ (17418)-C ₇₆ , U@C ₁ (28324)-C ₈₀ , and Th@C ₁ (28324)-C ₈₀ : Low-Symmetry Cage Selection Directed by a Tetravalent Ion. <i>J. Am. Chem. Soc.</i> (IF=14.357) 2018, 140 (51), 18039–18050. https://doi.org/10.1021/jacs.8b10435 .	14.86
2. Cornia, A.; Mannini, M.; Sessoli, R.; Gatteschi, D. Propeller-Shaped Fe ₄ and Fe ₃ M Molecular Nanomagnets: A Journey from Crystals to Addressable Single Molecules. <i>Eur. J. Inorg. Chem.</i> (IF=2.507) 2019, 2019 (5), 552–568. https://doi.org/10.1002/ejic.201801266 .	3.01
3. Fuertes-Espinosa, C.; Gómez-Torres, A.; Morales-Martínez, R.; Rodríguez-Forteza, A.; García-Simón, C.; Gándara, F.; Imaz, I.; Juanhuix, J.; Maspoch, D.; Poblet, J. M.; et al. Purification of Uranium-Based Endohedral Metallofullerenes (EMFs) by Selective Supramolecular Encapsulation and Release. <i>Angew. Chemie</i> (IF=12.102) 2018, 130 (35), 11464–11469. https://doi.org/10.1002/ange.201806140 .	12.60
4. Gómez-Torres, A.; Esper, R.; Dunk, P. W.; Morales-Martínez, R.; Rodríguez-Forteza, A.; Echegoyen, L.; Poblet, J. M. Small Cage Uranofullerenes: 27 Years after Their First Observation. <i>Helv. Chim. Acta</i> (IF=1.081) 2019, 102 (5), e1900046. https://doi.org/10.1002/hlca.201900046 .	1.58
5. Jin, P.; Li, Y.; Magagula, S.; Chen, Z. Exohedral Functionalization of Endohedral Metallofullerenes: Interplay between inside and Outside. <i>Coord. Chem. Rev.</i> (IF=14.499) 2019, 388, 406–439. https://doi.org/10.1016/j.ccr.2019.02.028 .	15.00
6. Li, Y.; Yang, L.; Wei, Z.; Hou, Q.; Li, L.; Jin, P. Robust Metal-Pentagon Interactions in the Th-Based Endohedral Metallofullerenes Revealed by DFT Calculations. <i>Int. J. Quantum Chem.</i> (IF=2.568) 2019, 119 (6), e25826. https://doi.org/10.1002/qua.25826 .	3.07
7. Liu, A.; Nie, M.; Hao, Y.; Yang, Y.; Wang, T.; Slanina, Z.; Cong, H.; Feng, L.; Wang, C.; Uhlik, F. Ho ₂ O@C ₇₄ : Ho ₂ O Cluster Expands within a Small Non-IPR Fullerene Cage of C ₂ (13333)-C ₇₄ . <i>Inorg. Chem.</i> (IF=4.700) 2019, 58 (8), 4774–4781. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b03145 .	5.20
8. Su, W.; Pan, S.; Sun, X.; Wang, S.; Zhao, L.; Frenking, G.; Zhu, C. Double Dative Bond between Divalent Carbon(0) and Uranium. <i>Nat. Commun.</i> (IF=12.353) 2018, 9 (1), 4997. https://doi.org/10.1038/s41467-018-07377-6 .	12.85
III. Lucrarea proprie: "Similar ligand-metal bonding for transition metals and actinides? 5f ¹ U(C ₇ H ₇) ₂ ²⁻ versus 3d ⁿ metallocenes", D.-C. Sergentu , F. Gendron and J. Autschbach, <i>Chem. Sci.</i> (IF=9.063), 2018, 9, 6292, este citata în:	(20 x IF+10)/3

1.	Layfield, R.; Guo, F.-S.; Mansikkamaki, A.; Tong, M.-L.; Chen, Y.-C. Uranocenium: Synthesis, Structure and Chemical Bonding. Angew. Chemie Int. Ed. (IF=12.102) 2019. https://doi.org/10.1002/anie.201903681 .	84.01
2.	Su, J.; Batista, E. R.; Boland, K. S.; Bone, S. E.; Bradley, J. A.; Cary, S. K.; Clark, D. L.; Conradson, S. D.; Ditter, A. S.; Kaltsoyannis, N.; et al. Energy-Degeneracy-Driven Covalency in Actinide Bonding. J. Am. Chem. Soc. (IF=14.357) 2018, 140 (51), 17977–17984. https://doi.org/10.1021/jacs.8b09436 .	99.05
3.	Sergentu, D.-C.; Duignan, T. J.; Autschbach, J. Ab Initio Study of Covalency in the Ground versus Core-Excited States and X-Ray Absorption Spectra of Actinide Complexes. J. Phys. Chem. Lett. (IF=8.709) 2018, 9 (18), 5583–5591. https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.8b02412 .	61.39
4.	Bora, P. L.; Novotný, J.; Ruud, K.; Komorovsky, S.; Marek, R. Electron-Spin Structure and Metal–Ligand Bonding in Open-Shell Systems from Relativistic EPR and NMR: A Case Study of Square-Planar Iridium Catalysts. J. Chem. Theory Comput. (IF=5.399) 2019, 15 (1), 201–214. https://doi.org/10.1021/acs.jctc.8b00914 .	39.33
IV.	Lucrarea proprie: “Understanding and Controlling the Emission Brightness and Color of Molecular Cerium Luminophores”, Y. Quao,* D.-C. Sergentu ,* 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, <i>J. Am. Chem. Soc. (IF=14.357)</i> , 2018, 140, 4588. (<i>signed as first author</i>), este citata în:	(20 x IF+10)/1
1.	Qiao, Y.; Cheisson, T.; Manor, B. C.; Carroll, P. J.; Schelter, E. J. A Strategy to Improve the Performance of Cerium(III) Photocatalysts. Chem. Commun. (IF=6.290) 2019, 55 (28), 4067–4070. https://doi.org/10.1039/C9CC00282K .	12.35
2.	Zhang, Y.; Akhmedov, N. G.; Petersen, J. L.; Milschmann, C. Photoluminescence of Seven-Coordinate Zirconium and Hafnium Complexes with 2,2'-Pyridylpyrrolide Ligands. Chem. – Eur. J. (IF=5.160) 2019, chem.201804671. https://doi.org/10.1002/chem.201804671 .	10.29
3.	Zhang, Y.; Petersen, J. L.; Milschmann, C. Photochemical C–C Bond Formation in Luminescent Zirconium Complexes with CNN Pincer Ligands. Organometallics (IF=4.051) 2018, 37 (23), 4488–4499. https://doi.org/10.1021/acs.organomet.8b00388 .	8.27
4.	Lindqvist-Reis, P.; Réal, F.; Janicki, R.; Vallet, V. Unraveling the Ground State and Excited State Structures and Dynamics of Hydrated Ce ³⁺ Ions by Experiment and Theory. Inorg. Chem. (IF=4.700) 2018, 57 (16), 10111–10121. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b01224 .	9.45
5.	Qiao, Y.; Schelter, E. J. Lanthanide Photocatalysis. Acc. Chem. Res. (IF=20.955) 2018, 51 (11), 2926–2936. https://doi.org/10.1021/acs.accounts.8b00336 .	39.01
6.	Zhang, Y.; Lee, T. S.; Petersen, J. L.; Milschmann, C. A Zirconium Photosensitizer with a Long-Lived Excited State: Mechanistic Insight into Photoinduced Single-Electron Transfer. J. Am. Chem. Soc. (IF=14.357) 2018, 140 (18), 5934–5947. https://doi.org/10.1021/jacs.8b00742 .	27.01
7.	Qiao, Y.; Yang, Q.; Schelter, E. J. Photoinduced Miyaura Borylation by a Rare-Earth-Metal Photoreductant: The Hexachlorocerate(III) Anion. Angew. Chemie (IF=12.102) 2018, 130 (34), 11165–11169. https://doi.org/10.1002/ange.201804022 .	22.91
8.	Wenger, O. S. Photoactive Complexes with Earth-Abundant Metals. J. Am. Chem. Soc. (IF=14.357) 2018, 140 (42), 13522–13533. https://doi.org/10.1021/jacs.8b08822 .	27.01
V.	Lucrarea proprie: “The bonding picture in hypervalent XF ₃ (X = Cl, Br, I, At) fluorides revisited with quantum chemical topology”, M. Amaouch, D.-C. Sergentu , D. Steinmetz, R. Maurice, N. Galland, R. Maurice and J. Pilmé, <i>J. Comput. Chem. (IF=3.221)</i> , 2017, 38, 2753, este citata în:	(20 x IF+10)/7

1.	Shao, Z.; Huang, Y.; Duan, D.; Ma, Y.; Yu, H.; Xie, H.; Li, D.; Tian, F.; Liu, B.; Cui, T. Stable Structures and Superconductivity of an At–H System at High Pressure. Phys. Chem. Chem. Phys. (IF=3.906) 2018, 20 (38), 24783–24789. https://doi.org/10.1039/C8CP04317E .	12.59
VI.	Lucrarea proprie: “Targeted radionuclide therapy with astatine-211: Oxidative dehalogenation of astatobenzoate conjugates”, D. Teze, D.-C. Sergentu , V. Kalichuk, J. Barbet, D. Deniaud, N. Galland, R. Maurice and G. Montavon, <i>Sci. Rep.</i> (IF=4.122), 2017, 7, 2579, este citata în:	(20 x IF+10)/8
1.	Jeon, J. Review of Therapeutic Applications of Radiolabeled Functional Nanomaterials. Int. J. Mol. Sci. (IF=3.687) 2019, 20 (9), 2323–2340. https://doi.org/10.3390/ijms20092323 .	10.47
2.	(Book chapter) Holland, J. P. <i>The Radiopharmaceutical Chemistry of Seldom-Used Radionuclides in Nuclear Medicine</i> ; Springer International Publishing: Cham, 2019. https://doi.org/10.1007/978-3-319-98947-1_24 .	1.25
3.	Watabe, T.; Kaneda-Nakashima, K.; Liu, Y.; Shirakami, Y.; Ooe, K.; Toyoshima, A.; Shimosegawa, E.; Fukuda, M.; Shinohara, A.; Hatazawa, J. Enhancement of Astatine-211 Uptake via the Sodium Iodide Symporter by the Addition of Ascorbic Acid in Targeted Alpha Therapy of Thyroid Cancer. J. Nucl. Med. (IF=7.439) 2019, jnumed.118.222638. https://doi.org/10.2967/jnumed.118.222638 .	19.85
4.	Ogawa, K.; Takeda, T.; Mishiro, K.; Toyoshima, A.; Shiba, K.; Yoshimura, T.; Shinohara, A.; Kinuya, S.; Odani, A. Radiotheranostics Coupled between an At-211-Labeled RGD Peptide and the Corresponding Radioiodine-Labeled RGD Peptide. ACS Omega (IF='none') 2019, 4 (3), 4584–4591. https://doi.org/10.1021/acsomega.8b03679 .	1.25
5.	Molina, B.; Soto, J. R.; Castro, J. J. Halogen-like Properties of the Al ₁₃ Cluster Mimicking Astatine. Phys. Chem. Chem. Phys. (IF=3.906) 2018, 20 (17), 11549–11553. https://doi.org/10.1039/C8CP00494C .	11.02
6.	Fujiki, K.; Kanayama, Y.; Yano, S.; Sato, N.; Yokokita, T.; Ahmadi, P.; Watanabe, Y.; Haba, H.; Tanaka, K. ²¹¹ At-Labeled Immunoconjugate via a One-Pot Three-Component Double Click Strategy: Practical Access to α-Emission Cancer Radiotherapeutics. Chem. Sci. (IF=9.063) 2019, 10 (7), 1936–1944. https://doi.org/10.1039/C8SC04747B .	23.91
7.	Denk, C.; Wilkovitsch, M.; Aneheim, E.; Herth, M. M.; Jensen, H.; Lindegren, S.; Mikula, H. Multifunctional Clickable Reagents for Rapid Bioorthogonal Astatination and Radio-Crosslinking. ChemPlusChem (IF=3.205) 2019, cplu.201900114. https://doi.org/10.1002/cplu.201900114 .	9.26
8.	Galland, N.; Montavon, G.; Le Questel, J.-Y.; Graton, J. Quantum Calculations of At-Mediated Halogen Bonds: On the Influence of Relativistic Effects. New J. Chem. (IF=3.201) 2018, 42 (13), 10510–10517. https://doi.org/10.1039/C8NJ00484F .	9.25
9.	Reilly, S. W.; Makvandi, M.; Xu, K.; Mach, R. H. Rapid Cu-Catalyzed [²¹¹ At]Astatination and [¹²⁵ I]Iodination of Boronic Esters at Room Temperature. Org. Lett. (IF=6.492) 2018, 20 (7), 1752–1755. https://doi.org/10.1021/acs.orglett.8b00232 .	17.48
10.	Choi, J.; Vaidyanathan, G.; Koumariannou, E.; Kang, C. M.; Zalutsky, M. R. Astatine-211 Labeled Anti-HER2 5F7 Single Domain Antibody Fragment Conjugates: Radiolabeling and Preliminary Evaluation. Nucl. Med. Biol. (IF=2.203) 2018, 56, 10–20. https://doi.org/10.1016/j.nucmedbio.2017.09.003 .	6.76
VII.	Lucrarea proprie: “The heaviest possible ternary trihalogen species, AtIBr [−] , evidenced in aqueous solution: An experimental effort driven by computations”, N. Guo, D.-C. Sergentu , D. Teze, R. Maurice, J. Champion, N. Galland and G. Montavon, <i>Angew. Chem.</i> (IF=12.102), 2016, 55, 15369, este citata în:	(20 x IF+10)/7
1.	Hasenstab-Riedel, S.; Sonnenberg, K.; Mann, L.; Redeker, F. A.; Schmidt, B. Poly- and Interhalogen Anions from Fluorine to Bromine. Angew. Chemie Int. Ed. (IF=12.102) 2019. https://doi.org/10.1002/anie.201903197 .	36.01
2.	Guo, N.; Maurice, R.; Teze, D.; Graton, J.; Champion, J.; Montavon, G.; Galland, N. Experimental and Computational Evidence of Halogen Bonds Involving Astatine. Nat. Chem.	76.29

(IF=26.201) 2018, 10 (4), 428–434. https://doi.org/10.1038/s41557-018-0011-1 .		
3.	Galland, N.; Montavon, G.; Le Questel, J.-Y.; Graton, J. Quantum Calculations of At-Mediated Halogen Bonds: On the Influence of Relativistic Effects. <i>New J. Chem.</i> (3.201) 2018, 42 (13), 10510–10517. https://doi.org/10.1039/C8NJ00484F .	10.57
4.	Teze, D.; Sergentu, D.-C.; Kalichuk, V.; Barbet, J.; Deniaud, D.; Galland, N.; Maurice, R.; Montavon, G. Targeted Radionuclide Therapy with Astatine-211: Oxidative Dehalogenation of Astatobenzoate Conjugates. <i>Sci. Rep.</i> (IF=4.122) 2017, 7 (1), 2579. https://doi.org/10.1038/s41598-017-02614-2 .	13.21
VIII. Lucrarea proprie: “Unravelling the hydration-induced ground-state change of AtO ⁺ by relativistic and multiconfigurational wave-function-based methods”, <u>D.-C. Sergentu</u> , F. Réal, G. Montavon, N. Galland and R. Maurice, <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> (IF=3.906), 2016, 18, 32703, este citata în:		(20 x IF+10)/5
1.	Stoianov, A.; Champion, J.; Maurice, R. UV–Vis Absorption Spectroscopy of Polonium(IV) Chloride Complexes: An Electronic Structure Theory Study. <i>Inorg. Chem.</i> (IF=4.700) 2019, 58 (10), 7036–7043. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b00668 .	20.80
2.	Graton, J.; Rahali, S.; Le Questel, J.-Y.; Montavon, G.; Pilmé, J.; Galland, N. Spin–Orbit Coupling as a Probe to Decipher Halogen Bonding. <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> (IF=3.906) 2018, 20 (47), 29616–29624. https://doi.org/10.1039/C8CP05690K .	17.62
IX. Lucrarea proprie: “Scrutinizing “invisible” astatine: A challenge for modern density functionals”, <u>D.-C. Sergentu</u> , G. David, G. Montavon, R. Maurice and N. Galland, <i>J. Comput. Chem.</i> (IF=3.221), 2016, 37, 1345, este citata în:		(20 x IF+10)/5
1.	Teze, D.; Sergentu, D.-C.; Kalichuk, V.; Barbet, J.; Deniaud, D.; Galland, N.; Maurice, R.; Montavon, G. Targeted Radionuclide Therapy with Astatine-211: Oxidative Dehalogenation of Astatobenzoate Conjugates. <i>Sci. Rep.</i> (IF=4.122) 2017, 7 (1), 2579. https://doi.org/10.1038/s41598-017-02614-2 .	18.49
2.	Si, R.; Fischer, C. F. Electron Affinities of At and Its Homologous Elements Cl, Br, and I. <i>Phys. Rev. A</i> (IF=2.909) 2018, 98 (5), 052504. https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.052504 .	13.64
3.	Shee, A.; Saue, T.; Visscher, L.; Severo Pereira Gomes, A. Equation-of-Motion Coupled-Cluster Theory Based on the 4-Component Dirac–Coulomb(–Gaunt) Hamiltonian. Energies for Single Electron Detachment, Attachment, and Electronically Excited States. <i>J. Chem. Phys.</i> (IF=2.843) 2018, 149 (17), 174113. https://doi.org/10.1063/1.5053846 .	13.37
4.	Sergentu, D.-C.; Réal, F.; Montavon, G.; Galland, N.; Maurice, R. Unraveling the Hydration-Induced Ground-State Change of AtO ⁺ by Relativistic and Multiconfigurational Wave-Function-Based Methods. <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> (IF=3.906) 2016, 18 (48), 32703–32712. https://doi.org/10.1039/C6CP05028J .	17.62
5.	Rothe, S.; Sundberg, J.; Welander, J.; Chrysalidis, K.; Goodacre, T. D.; Fedosseev, V.; Fiotakis, S.; Forstner, O.; Heinke, R.; Johnston, K.; et al. Laser Photodetachment of Radioactive ¹²⁸ I [–] . <i>J. Phys. G Nucl. Part. Phys.</i> (IF=3.456) 2017, 44 (10), 104003. https://doi.org/10.1088/1361-6471/aa80aa .	15.82
6.	Pozzi, O. R.; Zalutsky, M. R. Radiopharmaceutical Chemistry of Targeted Radiotherapeutics, Part 4: Strategies for ²¹¹ At Labeling at High Activities and Radiation Doses of ²¹¹ At α-Particles. <i>Nucl. Med. Biol.</i> (IF=2.203) 2017, 46, 43–49. https://doi.org/10.1016/j.nucmedbio.2016.11.009 .	10.81
7.	Molina, B.; Soto, J. R.; Castro, J. J. Halogen-like Properties of the Al ₁₃ Cluster Mimicking Astatine. <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> (IF=3.906) 2018, 20 (17), 11549–11553. https://doi.org/10.1039/C8CP00494C .	17.62
8.	Matczak, P. Tuning of Non-Covalent Interactions Involving a Halogen Atom That Plays the Role of Lewis Acid and Base Simultaneously. <i>Mol. Phys.</i> (IF=1.774) 2018, 116 (3), 338–350.	9.10

https://doi.org/10.1080/00268976.2017.1386805 .	
9. Guo, N.; Sergentu, D.-C.; Teze, D.; Champion, J.; Montavon, G.; Galland, N.; Maurice, R. The Heaviest Possible Ternary Trihalogen Species, IAtBr ⁻ , Evidenced in Aqueous Solution: An Experimental Performance Driven by Computations. <i>Angew. Chemie (IF=12.102)</i> 2016, 128 (49), 15595–15598. https://doi.org/10.1002/ange.201608746 .	50.41
10. Guo, N.; Maurice, R.; Teze, D.; Graton, J.; Champion, J.; Montavon, G.; Galland, N. Experimental and Computational Evidence of Halogen Bonds Involving Astatine. <i>Nat. Chem. (IF=26.201)</i> 2018, 10 (4), 428–434. https://doi.org/10.1038/s41557-018-0011-1 .	106.80
11. Galland, N.; Montavon, G.; Le Questel, J.-Y.; Graton, J. Quantum Calculations of At-Mediated Halogen Bonds: On the Influence of Relativistic Effects. <i>New J. Chem. (IF=3.201)</i> 2018, 42 (13), 10510–10517. https://doi.org/10.1039/C8NJ00484F .	14.80
12. Amaouch, M.; Sergentu, D.-C.; Steinmetz, D.; Maurice, R.; Galland, N.; Pilmé, J. The Bonding Picture in Hypervalent XF ₃ (X = Cl, Br, I, At) Fluorides Revisited with Quantum Chemical Topology. <i>J. Comput. Chem. (IF=3.221)</i> 2017, 38 (32), 2753–2762. https://doi.org/10.1002/jcc.24905 .	14.88
X. Lucrarea proprie: “Advances on the determination of the astatine Pourbaix diagram: Predominance of [AtO(OH) ₂] ⁻ over At ⁻ in basic conditions”, <u>D.-C. Sergentu</u> , 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, <i>Chem. Eur. J. (IF=5.160)</i> , 2016, 22, 2964, este citata în:	(20 x IF+10)/12
1. Meyer, G.-J. Astatine. <i>J. Label. Compd. Radiopharm (IF=1.423)</i> . 2018, 61 (3), 154–164. https://doi.org/10.1002/jlcr.3573 .	3.21
2. Vaudon, J.; Frealle, L.; Audiger, G.; Dutilly, E.; Gervais, M.; Sursin, E.; Ruggeri, C.; Duval, F.; Bouchetou, M.-L.; Bombard, A.; et al. First Steps at the Cyclotron of Orléans in the Radiochemistry of Radiometals: 52Mn and 165Er. <i>Instruments (IF='none')</i> 2018, 2 (3), 15. https://doi.org/10.3390/instruments2030015 .	0.83
3. Sergentu, D.-C.; Réal, F.; Montavon, G.; Galland, N.; Maurice, R. Unraveling the Hydration-Induced Ground-State Change of AtO ⁺ by Relativistic and Multiconfigurational Wave-Function-Based Methods. <i>Phys. Chem. Chem. Phys. (IF=3.906)</i> 2016, 18 (48), 32703–32712. https://doi.org/10.1039/C6CP05028J .	7.34
4. Guo, N.; Pottier, F.; Aupiais, J.; Alliot, C.; Montavon, G.; Champion, J. Evidence for the Heaviest Expected Halide Species in Aqueous Solution, At ⁻ , by Electromobility Measurements. <i>Inorg. Chem. (IF=4.700)</i> 2018, 57 (9), 4926–4933. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b03003 .	8.67
5. Guo, N.; Maurice, R.; Teze, D.; Graton, J.; Champion, J.; Montavon, G.; Galland, N. Experimental and Computational Evidence of Halogen Bonds Involving Astatine. <i>Nat. Chem. (IF=26.201)</i> 2018, 10 (4), 428–434. https://doi.org/10.1038/s41557-018-0011-1 .	44.50
6. Guo, N.; Sergentu, D.-C.; Teze, D.; Champion, J.; Montavon, G.; Galland, N.; Maurice, R. The Heaviest Possible Ternary Trihalogen Species, IAtBr ⁻ , Evidenced in Aqueous Solution: An Experimental Performance Driven by Computations. <i>Angew. Chemie (IF=12.102)</i> 2016, 128 (49), 15595–15598. https://doi.org/10.1002/ange.201608746 .	21.00
7. Guérard, F.; Navarro, L.; Lee, Y.-S.; Roumesy, A.; Alliot, C.; Chérel, M.; Brechbiel, M. W.; Gustin, J.-F. Bifunctional Aryliodonium Salts for Highly Efficient Radioiodination and Astatination of Antibodies. <i>Bioorg. Med. Chem. (IF=2.881)</i> 2017, 25 (21), 5975–5980. https://doi.org/10.1016/j.bmc.2017.09.022 .	5.64
8. Galland, N.; Montavon, G.; Le Questel, J.-Y.; Graton, J. Quantum Calculations of At-Mediated Halogen Bonds: On the Influence of Relativistic Effects. <i>New J. Chem. (IF=3.201)</i> 2018, 42 (13), 10510–10517. https://doi.org/10.1039/C8NJ00484F .	6.17
9. Ayed, T.; Pilmé, J.; Tézé, D.; Bassal, F.; Barbet, J.; Chérel, M.; Champion, J.; Maurice, R.; Montavon, G.; Galland, N. 211 At-Labeled Agents for Alpha-Immunotherapy: On the in Vivo Stability of Astatine-Agent Bonds. <i>Eur. J. Med. Chem. (IF=4.816)</i> 2016, 116, 156–164.	8.86

https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2016.03.082 .		
10.	Teze, D.; Sergentu, D.-C.; Kalichuk, V.; Barbet, J.; Deniaud, D.; Galland, N.; Maurice, R.; Montavon, G. Targeted Radionuclide Therapy with Astatine-211: Oxidative Dehalogenation of Astatobenzoate Conjugates. <i>Sci. Rep. (IF=4.122)</i> 2017, 7 (1), 2579. https://doi.org/10.1038/s41598-017-02614-2 .	7.70
11.	Sergentu, D.-C.; David, G.; Montavon, G.; Maurice, R.; Galland, N. Scrutinizing “Invisible” Astatine: A Challenge for Modern Density Functionals. <i>J. Comput. Chem. (IF=3.221)</i> 2016, 37 (15), 1345–1354. https://doi.org/10.1002/jcc.24326 .	6.20
12.	Guérard, F.; Lee, Y.-S.; Baidoo, K.; Geste, J.-F.; Brechbiel, M. W. Unexpected Behavior of the Heaviest Halogen Astatine in the Nucleophilic Substitution of Aryliodonium Salts. <i>Chem. - A Eur. J. (IF=5.160)</i> 2016, 22 (35), 12332–12339. https://doi.org/10.1002/chem.201600922 .	9.43
XI.	Lucrarea proprie: “Electronic structures and geometries of the XF_3 (X = Cl, Br, I, At) fluorides”, <u>D.-C. Sergentu</u> , M. Amaouch, J. Pilmé, N. Galland and R. Maurice, <i>J. Chem. Phys. (IF=2.843)</i> , 2015, 143, 114306, este citata în:	(20 x IF+10)/5
1.	Dong, W.; Wang, Y.; Yang, X.; Cheng, J.; Li, Q. Dual Function of the Boron Center of $\text{BH}(\text{CO})_2/\text{BH}(\text{N}_2)_2$ in Halogen- and Trier-Bonded Complexes with Hypervalent Halogens. <i>J. Mol. Graph. Model. (IF=1.885)</i> 2018, 84, 118–124. https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2018.06.017 .	9.54
2.	Stoianov, A.; Champion, J.; Maurice, R. UV–Vis Absorption Spectroscopy of Polonium(IV) Chloride Complexes: An Electronic Structure Theory Study. <i>Inorg. Chem. (IF=4.700)</i> 2019, 58 (10), 7036–7043. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b00668 .	20.80
3.	Sergentu, D.-C.; Réal, F.; Montavon, G.; Galland, N.; Maurice, R. Unraveling the Hydration-Induced Ground-State Change of AtO^+ by Relativistic and Multiconfigurational Wave-Function-Based Methods. <i>Phys. Chem. Chem. Phys. (IF=3.906)</i> 2016, 18 (48), 32703–32712. https://doi.org/10.1039/C6CP05028J .	17.62
4.	Amaouch, M.; Sergentu, D.-C.; Steinmetz, D.; Maurice, R.; Galland, N.; Pilmé, J. The Bonding Picture in Hypervalent XF_3 (X = Cl, Br, I, At) Fluorides Revisited with Quantum Chemical Topology. <i>J. Comput. Chem. (IF=3.221)</i> 2017, 38 (32), 2753–2762. https://doi.org/10.1002/jcc.24905 .	14.88
5.	Guo, N.; Maurice, R.; Teze, D.; Graton, J.; Champion, J.; Montavon, G.; Galland, N. Experimental and Computational Evidence of Halogen Bonds Involving Astatine. <i>Nat. Chem. (IF=26.201)</i> 2018, 10 (4), 428–434. https://doi.org/10.1038/s41557-018-0011-1 .	106.80
6.	Ayed, T.; Pilmé, J.; Téze, D.; Bassal, F.; Barbet, J.; Chérel, M.; Champion, J.; Maurice, R.; Montavon, G.; Galland, N. 211 At-Labeled Agents for Alpha-Immunotherapy: On the in Vivo Stability of Astatine-Agent Bonds. <i>Eur. J. Med. Chem. (IF=4.816)</i> 2016, 116, 156–164. https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2016.03.082 .	21.26
7.	Sergentu, D.-C.; David, G.; Montavon, G.; Maurice, R.; Galland, N. Scrutinizing “Invisible” Astatine: A Challenge for Modern Density Functionals. <i>J. Comput. Chem. (IF=3.221)</i> 2016, 37 (15), 1345–1354. https://doi.org/10.1002/jcc.24326 .	14.88
8.	Sergentu, D.-C.; Teze, D.; Sabatié-Gogova, A.; Alliot, C.; Guo, N.; Bassal, F.; Silva, I. Da; Deniaud, D.; Maurice, R.; Champion, J.; et al. Advances on the Determination of the Astatine Pourbaix Diagram: Predominance of $\text{AtO}(\text{OH})_2^-$ over At^- in Basic Conditions. <i>Chem. - A Eur. J. (IF=5.160)</i> 2016, 22 (9), 2964–2971. https://doi.org/10.1002/chem.201504403 .	22.64
XII.	Lucrarea proprie: “Computational determination of the dominant triplet population mechanism in photoexcited benzophenone”, <u>D.-C. Sergentu</u> , R. Maurice, R. W. A. Havenith, R. Broer and D. Roca-Sanjuán, <i>Phys. Chem. Chem. Phys. (IF=3.906)</i> , 2014, 16, 25393, este citata în:	(20 x IF+10)/5
1.	Doronina, E. P.; Sidorkin, V. F.; Belogolova, E. F.; Jouikov, V. Hypervalent Benzophenones. <i>J. Organomet. Chem. (IF=1.946)</i> 2018, 858, 89–96. https://doi.org/10.1016/j.jorgchem.2018.01.024 .	9.78

2.	(Book chapter) Roca-Sanjuán, D.; Francés-Monerris, A.; Galván, I. F.; Farahani, P.; Lindh, R.; Liu, Y.-J. <i>Advances in Computational Photochemistry and Chemiluminescence of Biological and Nanotechnological Molecules</i> ; The Royal Society of Chemistry (IF='none') , 2016. https://doi.org/10.1039/9781782626954-00016 .	2.00
3.	(Book chapter) Devos, O.; Aloïse, S.; Sliwa, M.; Métivier, R.; Placiat, J.-P.; Ruckebusch, C. <i>Multivariate Curve Resolution of (Ultra)Fast Photoinduced Process Spectroscopy Data</i> ; Cyril Ruckebusch; Elsevier (IF='none') : Amsterdam, 2016. https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63638-6.00011-5 .	2.00
4.	Francés-Monerris, A.; Fdez. Galván, I.; Lindh, R.; Roca-Sanjuán, D. Triplet versus Singlet Chemiexcitation Mechanism in Dioxetanone: A CASSCF/CASPT2 Study. <i>Theor. Chem. Acc. (IF=1.545)</i> 2017, 136 (6), 70. https://doi.org/10.1007/s00214-017-2095-x .	8.18
5.	(Book chapter) Rivail, J.-L.; Monari, A.; Assfeld, X. <i>The Non Empirical Local Self Consistent Field Method: Application to Quantum Mechanics/Molecular Mechanics (QM/MM) Modeling of Large Biomolecular Systems</i> ; Springer International Publishing (IF='none') : Cham, 2015. https://doi.org/10.1007/978-3-319-21626-3_13 .	2.00
6.	Matsui, Y.; Oishi, T.; Ohta, E.; Ikeda, H. Adiabatic Process of Higher Electronically Excited States: Luminescence from an Excited State Biradical Generated by Irradiation of Benzophenone-Substituted Cyclopropanes. <i>J. Phys. Org. Chem. (IF=1.591)</i> 2017, 30 (4), e3636. https://doi.org/10.1002/poc.3636 .	8.36
7.	Gattuso, H.; Marazzi, M.; Dehez, F.; Monari, A. Deciphering the Photosensitization Mechanisms of Hypericin towards Biological Membranes. <i>Phys. Chem. Chem. Phys. (IF=3.906)</i> 2017, 19 (34), 23187–23193. https://doi.org/10.1039/C7CP03723F .	17.62
8.	Zvereva, E.; Segarra-Martí, J.; Marazzi, M.; Brazard, J.; Nenov, A.; Weingart, O.; Léonard, J.; Garavelli, M.; Rivalta, I.; Dumont, E.; et al. The Effect of Solvent Relaxation in the Ultrafast Time-Resolved Spectroscopy of Solvated Benzophenone. <i>Photochem. Photobiol. Sci. (IF=2.902)</i> 2018, 17 (3), 323–331. https://doi.org/10.1039/C7PP00439G .	13.61
9.	Segarra-Martí, J.; Zvereva, E.; Marazzi, M.; Brazard, J.; Dumont, E.; Assfeld, X.; Haacke, S.; Garavelli, M.; Monari, A.; Léonard, J.; et al. Resolving the Singlet Excited State Manifold of Benzophenone by First-Principles Simulations and Ultrafast Spectroscopy. <i>J. Chem. Theory Comput. (IF=5.399)</i> 2018, 14 (5), 2570–2585. https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b01208 .	23.60
10.	Bignon, E.; Marazzi, M.; Besancenot, V.; Gattuso, H.; Drouot, G.; Morell, C.; Eriksson, L. A.; Grandemange, S.; Dumont, E.; Monari, A. Ibuprofen and Ketoprofen Potentiate UVA-Induced Cell Death by a Photosensitization Process. <i>Sci. Rep. (IF=4.122)</i> 2017, 7 (1), 8885. https://doi.org/10.1038/s41598-017-09406-8 .	18.49
11.	Liu, L.; Pilles, B. M.; Reiner, A. M.; Gontcharov, J.; Zinth, W. 2'-Methoxyacetophenone: An Efficient Photosensitizer for Cyclobutane Pyrimidine Dimer Formation. <i>ChemPhysChem (IF=2.947)</i> 2015, 16 (16), 3483–3487. https://doi.org/10.1002/cphc.201500582 .	13.79
12.	Soep, B.; Mestdagh, J.-M.; Briant, M.; Gaveau, M.-A.; Poisson, L. Direct Observation of Slow Intersystem Crossing in an Aromatic Ketone, Fluorenone. <i>Phys. Chem. Chem. Phys. (IF=3.906)</i> 2016, 18 (33), 22914–22920. https://doi.org/10.1039/C6CP04308A .	17.62
13.	Venkatraman, R. K.; Kayal, S.; Barak, A.; Orr-Ewing, A. J.; Umapathy, S. Intermolecular Hydrogen Bonding Controlled Intersystem Crossing Rates of Benzophenone. <i>J. Phys. Chem. Lett. (IF=8.709)</i> 2018, 9 (7), 1642–1648. https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.8b00345 .	36.84
14.	Francés-Monerris, A.; Segarra-Martí, J.; Merchán, M.; Roca-Sanjuán, D. Theoretical Study on the Excited-State π -Stacking versus Intermolecular Hydrogen-Transfer Processes in the Guanine–Cytosine/Cytosine Trimer. <i>Theor. Chem. Acc. (IF=1.545)</i> 2016, 135 (2), 31. https://doi.org/10.1007/s00214-015-1762-z .	8.18
15.	Liu, L.; Pilles, B. M.; Gontcharov, J.; Bucher, D. B.; Zinth, W. Quantum Yield of Cyclobutane Pyrimidine Dimer Formation Via the Triplet Channel Determined by Photosensitization. <i>J. Phys. Chem. B (IF=3.146)</i> 2016, 120 (2), 292–298. https://doi.org/10.1021/acs.jpbc.5b08568 .	14.58
16.	Huix-Rotllant, M.; Dumont, E.; Ferré, N.; Monari, A. Photophysics of Acetophenone Interacting with DNA: Why the Road to Photosensitization Is Open. <i>Photochem. Photobiol. (IF=2.214)</i>	10.86

2015, 91 (2), 323–330. https://doi.org/10.1111/php.12395 .	
17. Favero, L.; Granucci, G.; Persico, M. Surface Hopping Investigation of Benzophenone Excited State Dynamics. <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> (IF=3.906) 2016, 18 (15), 10499–10506. https://doi.org/10.1039/C6CP00328A .	17.62
18. Marazzi, M.; Wibowo, M.; Gattuso, H.; Dumont, E.; Roca-Sanjuán, D.; Monari, A. Hydrogen Abstraction by Photoexcited Benzophenone: Consequences for DNA Photosensitization. <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> (IF=3.906) 2016, 18 (11), 7829–7836. https://doi.org/10.1039/C5CP07938A .	17.62
19. Ouyang, W.; Dou, W.; Subotnik, J. E. Surface Hopping with a Manifold of Electronic States. I. Incorporating Surface-Leaking to Capture Lifetimes. <i>J. Chem. Phys.</i> (IF=2.843) 2015, 142 (8), 084109. https://doi.org/10.1063/1.4908032 .	13.37
20. Vlaisavljevich, B.; Shiozaki, T. Nuclear Energy Gradients for Internally Contracted Complete Active Space Second-Order Perturbation Theory: Multistate Extensions. <i>J. Chem. Theory Comput.</i> (IF=5.399) 2016, 12 (8), 3781–3787. https://doi.org/10.1021/acs.jctc.6b00572 .	23.60
21. Wei, Q.; Kleine, P.; Karpov, Y.; Qiu, X.; Komber, H.; Sahre, K.; Kiri, A.; Lygaitis, R.; Lenk, S.; Reineke, S.; et al. Conjugation-Induced Thermally Activated Delayed Fluorescence (TADF): From Conventional Non-TADF Units to TADF-Active Polymers. <i>Adv. Funct. Mater.</i> (IF=13.325) 2017, 27 (7), 1605051. https://doi.org/10.1002/adfm.201605051 .	55.30
22. Marazzi, M.; Mai, S.; Roca-Sanjuán, D.; Delcey, M. G.; Lindh, R.; González, L.; Monari, A. Benzophenone Ultrafast Triplet Population: Revisiting the Kinetic Model by Surface-Hopping Dynamics. <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> (IF=8.709) 2016, 7 (4), 622–626. https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.5b02792 .	36.84
23. Dumont, E.; Wibowo, M.; Roca-Sanjuán, D.; Garavelli, M.; Assfeld, X.; Monari, A. Resolving the Benzophenone DNA-Photosensitization Mechanism at QM/MM Level. <i>J. Phys. Chem. Lett.</i> (IF=8.709) 2015, 6 (4), 576–580. https://doi.org/10.1021/jz502562d .	36.84
24. Dormán, G.; Nakamura, H.; Pulsipher, A.; Prestwich, G. D. The Life of Pi Star: Exploring the Exciting and Forbidden Worlds of the Benzophenone Photophore. <i>Chem. Rev.</i> (IF=52.613) 2016, 116 (24), 15284–15398. https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.6b00342 .	212.45
14. Cercetător invitat la universități/institute de cercetare	
Total: 100 puncte	
1. <u>Instituția:</u> Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universitat de València, Spania. Perioada: Ianuarie 2012 – Iunie 2012. Activitate de cercetare în domeniul fotochimiei computaționale. Îndrumători: Prof. Manuela Merchán, Dr. Daniel Roca-Sanjuán, Prof. Ria Broer, Dr. Remco Havenith	25
2. <u>Instituția:</u> State University of New York at Buffalo, Buffalo, Statele Unite ale Americii Perioada: Februarie 2017 – Februarie 2018 Activitate de cercetare în regim postdoctoral în chimie teoretică: proprietăți magnetice, optice și spectroscopie, specii chimice bazate pe metale grele. Îndrumător: Prof. Jochen Autschbach	25
3. <u>Instituția:</u> State University of New York at Buffalo, Buffalo, Statele Unite ale Americii Perioada: Februarie 2018 – Februarie 2019 Activitate de cercetare în regim postdoctoral în chimie teoretică: proprietăți magnetice, optice și spectroscopie, specii chimice bazate pe metale grele. Îndrumător: Prof. Jochen Autschbach	25
4. <u>Instituția:</u> State University of New York at Buffalo, Buffalo, Statele Unite ale Americii Perioada: Februarie 2019 – Prezent Activitate de cercetare în regim postdoctoral în chimie teoretică: proprietăți magnetice, optice și spectroscopie, specii chimice bazate pe metale grele. Îndrumător: Prof. Jochen Autschbach	25
19. Participări la manifestări științifice	
Total: 100 puncte	
1. Poster: “X-ray absorption spectroscopy: Chemical bonding in actinide complexes from <i>ab initio</i> multireference wavefunction approaches”, <u>D.-C. Sergentu</u> and J. Autschbach, 2 nd European Symposium on Chemical Bonding, Oviedo, Spain, 3 September – 7 September, 2018.	10

2. Poster: "The peculiar electronic structure of AtO^+ in water", D.-C. Sergentu , F. Réal, N. Galland and R. Maurice, 7 th International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry, Le Havre, France, 27 – 30 June, 2016.	10
3. Poster plus Workshop: "Ground-state reversal induced by solvation: Electronic structure of AtO^+ in water", D.-C. Sergentu , N. Galland and R. Maurice, TALISMAN ThUL School in Actinide Chemistry, Karlsruhe, Germany, 28 September – 2 October, 2015.	10
4. Comunicare orală: "Electronic structures of the XF_3 (X = Cl, Br, I, At) fluorides and topology of their potential energy surfaces", D.-C. Sergentu , N. Galland and R. Maurice, 2 nd European Symposium on Density Functional Theory and its Applications, Debrecen, Hungary, 31 August – 4 September, 2015.	10
5. Comunicare orală: "Investigating $\text{AtO}^+-(\text{OH}^-)_n$ complexes at the molecular scale using quantum mechanical methods", D.-C. Sergentu , J. Champion, A. Sabatié-Gogova, J.-Y. Le Questel, R. Maurice, G. Montavon and N. Galland, Scientific Days of The 3MPL Doctorate School, Le Mans, France, June 2015.	10
6. Poster plus Workshop: "Investigation of the $[\text{AtO}(\text{OH})_2]^-$ hydrolysed species: Relativistic calculations", D.-C. Sergentu , J. Champion, A. Sabatié-Gogova, J.-Y. Le Questel, R. Maurice, G. Montavon and N. Galland, SOSTRUP Summer School: Quantum Chemistry and Molecular Properties, Himmelbjergens Natur-og Idrætsefterskole, Denmark, 6–18 July, 2014.	10
7. Poster: "Theoretical investigation of the AtO^+ hydrolysed species in ligand-exchange reactions including solvation effects", D.-C. Sergentu , J. Champion, A. Sabatié-Gogova, J.-Y. Le Questel, R. Maurice, G. Montavon and N. Galland, Scientific Days of The 3MPL Doctorate School, Nantes, France, June 2014.	10
8. Comunicare orală: "Revisiting the intersystem crossing in benzophenone", D.-C. Sergentu , D. Roca-Sanjuán, R. W. A. Havenith and R. Braam-Broer, 9 th European Conference on Computational Chemistry, Sopron, Hungary, 2–6 September 2013.	10
9. Workshop: "TCCM School on Molecular Excited States" held in ZCAM, Zaragoza, Spain, co-organized by the Erasmus Mundus Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (TCCM), June 2012.	10
10. Workshop: "TCCM School on Solid State Chemistry" held in ZCAM, Zaragoza, Spain, co-organized by the Erasmus Mundus Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (TCCM), June 2012.	10

ACTIVITATE DIDACTICĂ 0

Dr. Dumitru-Claudiu
Sergentu