

Dumitru-Claudiu SERGENTU

Chimist | Chimie Computațională | PhD

in [linkedin.com/in/dumitru-claudiu](https://www.linkedin.com/in/dumitru-claudiu)

ORCID : 0000-0001-6570-5245 ResearcherID : Y-4857-2019 H-Index : 17 (Google Scholar), 15 (WoS)

+40 757-874-367 @ claudiu.sergentu@gmail.com

Iași, România i Cetățean Român



Expert în chimie cuantică și computațională, sunt implicat în activități de cercetare ce presupun modelarea și interpretarea legăturilor chimice metal-ligand, a spectrelor XAS și a proprietăților electrice și magnetice (NMR, MCD, EFG) în compuși ce conțin lantanide și actinide. Autor a 33 de articole cotate ISI în reviste științifice de top precum *Nature*, *Nature Communications*, *Angewandte Chemie*, *Journal of The American Chemical Society* și *Chemical Science*, am o capacitate excelentă de a contracta finanțare externă, iniția, implementa și conduce proiecte de cercetare științifică.

POSTUL VIZAT : ASISTENT UNIVERSITAR, POZ. 45, FACULTATEA DE CHIMIE, UNIVERSITATEA ALEXANDRU IOAN CUZA DIN IAȘI

EXPERIENȚA PROFESIONALĂ

Present Septembrie 2022	Asistent Cercetare Științifică Chimie Computațională, UAIC Iași, Romania Laboratorul RA-03 – RECENT AIR, Supervisor : Prof. Dr. habil. Cecilia Arsene În cadrul laboratorului de investigare a proceselor fizico-chimice din fază gazoasă cu implicații în formarea aerosolilor organici secundari, întreprind calcule <i>ab initio</i>, pentru diverși complecși organometalici, pentru a obține informații despre structura electronică și natura legăturilor chimice. Legături chimice Spectroscopie XANES CASSCF CASPT2 DFT
Decembrie 2021 Februarie 2017	Cercetător post-doctorat Chimie Computațională, SUNY BUFFALO, Statele Unite ale Americii Departamentul de Chimie, Supervisor : Prof. dr. Jochen Autschbach 5-ani stagiul de cercetare în care am derulat calcule <i>ab initio</i> pe complecși pe bază de lantanide și actinide : legături chimice metal-ligand, structuri de absorbție de raze X aproape de margine (XANES), dicroism circular magnetic (MCD), rezonanță magnetică nucleară (NMR), gradienti de câmp electric (EFGs), constante de interacțiune hiperfină (HyFCC). Actinide Lantanide Spectroscopie CASSCF CASPT2 DMRG DFT NMR EFG MCD XANES
Noiembrie 2016 Octombrie 2013	Cercetător studii de doctorat Chimie Computațională, SUBATECH NANTES, Franța Department of Radiochemistry (SUBATECH Nantes), Supervisor : Dr. Rémi Maurice Department of Chemistry (Université de Nantes), Supervisor : Dr. Nicolas Galland Studii de cercetare doctorală pe parcursul cărora am efectuat calcule <i>ab initio</i> relativiste, mecano-cuantice asupra unor compuși cu astatiniu. Vizate au fost proprietățile fizico-chimice ale astatiniului, utilitatea astatiniului în radioterapie, efectele relativiste, geometriile și structurile electronice precum și reactivitate și proprietățile termodinamice ale compușilor pe bază de astatiniu. Astatiniu Efecte relativiste CASSCF NEVPT2 Cuplaj spin-orbită Constante de echilibru termodinamic
Iunie 2013 Ianuarie 2013	Cercetător Chimie Computațională, INSTITUT DE CIÈNCIA MOLECULAR, Spania Grupul QCEXVAL, Supervizori : Dr. Daniel Roca-Sanjuán, Prof. dr. Manuela Merchán Mobilitate de cercetare pe termen scurt pe parcursul căreia am efectuat calcule <i>ab initio</i> pe benzo-fenona fotoexcitată în cadrul proiectului de cercetare al tezei de master : fotochimie și fotofizică, fosforescență. Activitatea s-a încheiat cu un articol cotate ISI (<i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> 2014, 16, 25393) și o comunicare orală la cea de-a 9-a Conferință Europeană de Chimie Computațională, Șopron, Ungaria, 2–6 septembrie 2013. Benzofenonă Fosforescență CASSCF CASPT2 DFT Conical intersection Intersystem crossing

Octombrie 2017 Noiembrie 2013	Doctor în Chimie Chimie Teoretică, UNIVERSITATEA DIN NANTES, Franța Titlul tezei : “Geometries, electronic structures, and physico-chemical properties of astatine species : An application of relativistic quantum mechanics” > <i>Supervisors</i> : MDC dr. Nicolas Galland (Univ. Nantes), Dr. Rémi Maurice (SUBATECH Nantes). > <i>Președintele juriului</i> : Prof. dr. Denis Jacquemin (Univ. Nantes) > <i>Referenți</i> : Prof. CNRS Trond Saue (Univ. Toulouse III) & Prof. CNRS Boris Le Guennic (Univ. Rennes 1) > <i>Alți membri ai juriului</i> : Prof. dr. Ria Broer (Univ. Groningen), MDC dr. Florent Réal (Univ. Lille) Data susținerii : 19 Octombrie 2016
August 2013 Septembrie 2011	Masterat în Chimie Chimie Teoretică, UNIVERSITATEA DIN GRONINGEN, Regatul Țărilor de Jos European Master in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (EM-TCCM) > <i>Titlul tezei</i> : “Revisiting the intersystem crossing in benzophenone” > <i>Supervizori</i> : Prof. dr. Ria Broer (Univ. Groningen), Dr. Daniel Roca-Sanjuán (Univ. Valencia) Data susținerii : 25 Iulie 2013
August 2011 Octombrie 2008	Licențiat în Chimie Chimie, UNIVERSITATEA “A.I. CUZA” DIN IAȘI, România > <i>Titlul tezei</i> : “Metode teoretice în chimia computațională” > <i>Supervizor</i> : Conf. dr. Ionel Humelnicu Data susținerii : 4 July 2011

ACTIVITĂȚI DE MENTORAT

- 2020 Mentorat și condus diseminarea unui proiect postdoctoral al Dr. Gaurab Ganguly la SUNY Buffalo. Folosind calcule *ab inițio* am abordat structurile de C K-edge de absorbție a razelor X pentru moleculele de torocenă și uranocenă. Articol produs : *Chem. Eur. J.* 2020, 26, 1776.
- 2019 Mentorat și condus diseminarea unui proiect postdoctoral al Dr. Yonaton Heit la SUNY Buffalo. Am calculat spectre de dicroism circular magnetic (MCD) bazate pe teoria *ab inițio* a funcțiilor de undă RASSCF și o abordare sum-over-states pentru termenul B. Articol produs : *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2019, 11, 5586.
- 2018 Am proiectat și condus implementarea proiectului de teză de master al domnului Jérémy Marchais, un student al Universității din Bordeaux, vizitator la SUNY Buffalo. Dl. Marchais a studiat natura legăturilor chimice în sistemele F_3U-X ($X = N, P, As$) cu metode *ab inițio*, relativiste, bazate pe funcții de undă multiconfiguraționale.
- 2015 Mentorat și condus implementarea proiectului de teză de licență (L_3) al Dl. Alexis Lecoq la Universitatea din Nantes. Dl. Lecoq a lucrat la o interfață de cod Python care calculează ordinele efective de legătură din funcțiile de undă CASSCF și MRCI generate de Molpro.

ȘCOLI DE TRAINING, ȘCOLI DE VARĂ ȘI WORKSHOPURI ȘTIINȚIFICE

- Ianuarie 2020 **Molecular Sciences Software Institute (MOLSSI) : best practices @ SUNY Buffalo (SUA)**, medii de programare Conda și Python, Git version control, GitHub workflows, online code repositories.
- Septembrie 2015 **TALISMAN ThUL School @ Karlsruher Institute Für Technologie (Germania)**, chimia actinidelor : calcule *ab inițio*, aspecte teoretice și experimentale.
- Iulie 2014 **SOSTRUP Summer School @ Himmelbjergsgnens Natur-og Idrætsefterskole (Danemarca)**, chimie cuantică și proprietăți moleculare.
- Semptembrie 2012 **7th International Intensive Course of the TCCM European Master @ University of Perugia (Italia)**, chimie cuantică, teorii de structură electronică & calcule *ab inițio*, proceduri de chimie computațională pe clustere de calcul, massively-distributed computing, Infrastructura Europeană de grid.
- Iunie 2012 **TCCM Summer School on Solid State Chemistry @ ZCAM Institute (Spania)**, chimia solidului, teorie & calcule *ab inițio*.
- Iunie 2012 **TCCM summer school on molecular excited states @ ZCAM Institute (Spania)**, stări moleculare excitate, teorie & calcule *ab inițio*.

CERTIFICATE PROFESIONALE

- Python** Complete Python Bootcamp From Zero to Hero in Python, taught by Jose Portilla on Udemy.
- Python** The Complete Python Developer Certification Course, taught by Imtiaz Ahmad on Udemy.
- ML&AI** Machine Learning A-Z : Hands-On Python and R In Data Science, taught by Jose Portilla on Udemy.

SKILLS

Sisteme de operare	Linux, MacOS, Windows.
Limbaje de programare	Python, C/C++, Fortran, AWK, Perl, shell scripting, LaTeX.
Coduri de chimie computațională	ADF, BAND, DIRAC, Turbomole, Molpro, [Open]Molcas, ORCA, Gaussian, NWChem, Dalton, Q-Chem, GAMESS US, Quantum Espresso, FDMNES, GROMACS, QCMaquis.
Soft Skills	Puternic motivat, atitudine pozitivă, eficient la lucrul sub presiune, lucrul în echipă, organizat.
Limbi cunoscute	Engleză (expert), Franceză (intermediar), Română (nativ).

SCIENTIFIC RECORD

Activitate peer-review	Phys. Rev. Lett. (2), Phys. Rev. A (2), Phys. Rev. B (3), Phys. Rev. Mater. (1), Phys. Rev. Research (1), J. Phys. Chem. Lett. (1), J. Chem. Theory Comput. (1), Commun. Chem. (1), Chem. Commun. (1), Chem. Eur. J. (1), Phys. Chem. Chem. Phys. (4), J. Chem. Phys. (2), J. Phys. Chem. A (1), Inorg. Chem. (2), Chem. Phys. Lett. (1).
Publicații grafice	Inorg. Chem. (front cover, pubs.acs.org/IC, Vol. 61, No 9, 2022), Chem. Eur. J. (author cover profile, 10.1002/chem.202101162), Chem. Eur. J. (front cover, 10.1002/chem.202101160), Chem. Sci. (frontispiece, 10.1039/c9sc01960j), Chem. Eur. J. (frontispiece, 10.1002/chem.202080862), J. Am. Chem. Soc. (front cover, pubs.acs.org/JACS, Vol. 140, No. 13, 2018), Chem. Eur. J. (inside cover, 10.1002/chem.201600198) Phys. Chem. Chem. Phys. (frontispiece, 10.1039/c6cp05028j), J. Comput. Chem. (front cover, 10.1002/jcc.25103).
Lista publicațiilor pe scurt	Nature (1), Nat. Commun. (4), J. Am. Chem. Soc. (2), Angew. Chem. Int. Ed. (3), Chem. Sci. (3), Inorg. Chem. (4), Sci. Rep. (1), J. Phys. Chem. Lett. (1), Chem. Eur. J. (3), J. Comput. Chem. (3), J. Chem. Phys. (2), Phys. Chem. Chem. Phys. (3), Dalton Trans. (1), Chem. Commun. (1), J. Chem. Theory Comput. (1).
Număr de citări	WoS : 712, Google Scholar : 887 citări.

Lista publicațiilor

- 33 G. Li Manni, I. F. Galván, ..., D.-C. Sergentu, ..., and R. Lindh, "The OpenMolcas Web : A Community-Driven Approach to Advancing Computational Chemistry", *J. Chem. Theory Comput.*, 2023, manuscript just accepted, preprint on ChemRxiv : 10.26434/chemrxiv-2023-b7f0j-v2.
- 32 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.*, 2023, manuscript just accepted, preprint at arXiv:2212.10401.
- 31 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", *Nature Commun.*, 2022, **13**, 7192.
- 30 D.-C. Sergentu and J. Autschbach, "Covalency in actinide(IV) hexachlorides in relation to chlorine K-edge X-ray absorption structure", *Chem. Sci.*, 2022, **13**, 3194.
- 29 D.-C. Sergentu and J. Autschbach, "X-ray absorption spectra of f-element complexes : Insight from relativistic multiconfigurational wavefunction theory", *Dalton Trans.*, 2022, **51**, 1754.
- 28 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.*, 2022, **61**, 3821.
- 27 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"?", *Inorg. Chem.*, 2021, **60**, 17744.
- 26 D.-C. Sergentu,* C. Booth and J. Autschbach, "Probing multiconfigurational states by spectroscopy : The cerium XAS L₃-edge puzzle", *Chem. Eur. J.*, 2021, **27**, 7239. *corresponding author.
- 25 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", *Chem. Commun.*, 2021, **27**, 7239. *corresponding author.
- 24 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", *Nat. Commun.*, 2021, **12**, 1713.
- 23 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", *Inorg. Chem.*, 2020, **59**, 10138.
- 22 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", *J. Comput. Chem.*, 2020, **41**, 2055.
- 21 J. M. Sperling, E. J. Warzecha, C. Celis-Barros, D.-C. Sergentu, X. Wang, B. E. Klammer, 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-Schmitt, "Compression of curium pyrrolidinedithiocarbamate enhances covalency", *Nature*, 2020, **583**, 396.
- 20 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. Odelius, 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", *J. Chem. Phys.*, 2020, **152**, 214117.
- 19 J. Sears, D.-C. Sergentu T. Baker, W. Brennessel J. Autschbach and M. Neidig, "The exceptional diversity of homoleptic uranium-methyl complexes", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020, **59**, 13586.

Lista publicațiilor

- 18 G. Ganguly, * D.-C. Sergentu, * 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", *Chem. Eur. J.*, 2020, **26**, 1776. (*equal contribution)
- 17 J. Zhuang, * L. Abella, * D.-C. Sergentu, * 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", *J. Am. Chem. Soc.*, 2019, **141**, 20249. (*equal contribution)
- 16 "Synthesis, characterization, and electrochemistry of the homoleptic *f* element ketimide complexes [Li]₂[M(N=CtBuPh)₆] (M = Ce, Th)", M. K. Assefa, D.-C. Sergentu, L. A. Seaman, G. Wu, J. Autschbach and T. W. Hayton, *Inorg. Chem.*, 2019, **58**, 12654.
- 15 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", *Chem. Sci.*, 2019, **10**, 6431.
- 14 N. J. Wolford, D.-C. Sergentu, W. Brennessel, J. Autschbach and M. Neidig, "Homoleptic aryl complexes of uranium(IV)", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2019, **58**, 10266.
- 13 Y. Heit, * D.-C. Sergentu, * and J. Autschbach, "Magnetic circular dichroism spectra of transition metal complexes calculated from restricted active space wavefunctions", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, **21**, 5586. (*equal contribution)
- 12 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. Phys. Chem. Lett.*, 2018, **9**, 5583.
- 11 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", *Nat. Commun.*, 2018, **9**, 2753.
- 10 D.-C. Sergentu, F. Gendron and J. Autschbach, "Similar ligand-metal bonding for transition metals and actinides? 5f¹ U(C₇H₇)₂[−] versus 3dⁿ metallocenes", *Chem. Sci.*, 2018, **9**, 6292.
- 9 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, "Understanding and controlling the emission brightness and color of molecular cerium luminophores", *J. Am. Chem. Soc.*, 2018, **140**, 4588. (*equal contribution)
- 8 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", *J. Comput. Chem.*, 2017, **38**, 2753.
- 7 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", *Sci. Rep.*, 2017, **7**, 2579.
- 6 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", *Angew. Chem.*, 2016, **55**, 15369.
- 5 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", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 32703.
- 4 D.-C. Sergentu, G. David, G. Montavon, R. Maurice and N. Galland, "Scrutinizing "invisible" astatine : A challenge for modern density functionals", *J. Comput. Chem.*, 2016, **37**, 1345.
- 3 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 over At[−] in basic conditions", *Chem. Eur. J.*, 2016, **22**, 2964.
- 2 D.-C. Sergentu, M. Amaouch, J. Pilmé, N. Galland and R. Maurice, "Electronic structures and geometries of the XF₃ (X = Cl, Br, I, At) fluorides", *J. Chem. Phys.*, 2015, **143**, 114306.
- 1 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", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014, **16**, 25393.

- Oral & Postere** D.-C. Sergentu and J. Autschbach, “X-ray absorption spectroscopy : Chemical bonding in actinide complexes from ab initio multireference wavefunction approaches”, 2nd European Symposium on Chemical Bonding, Oviedo, Spain, 3–7 September, 2018.
- D.-C. Sergentu, F. Réal, N. Galland and R. Maurice, “The peculiar electronic structure of AtO⁺ in water”, 7th International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry, Le Havre, France, 27–30 June, 2016.
- D.-C. Sergentu, N. Galland and R. Maurice, “Ground-state reversal induced by solvation : Electronic structure of AtO⁺ in water”, TALISMAN ThUL School in Actinide Chemistry, Karlsruhe, Germany, 28 September – 2 October, 2015.
- 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”, 2nd European Symposium on Density Functional Theory and its Applications, Debrecen, Hungary, 31 August – 4 September, 2015.
- D.-C. Sergentu, J. Champion, A. Sabatié-Gogova, J.-Y. Le Questel, R. Maurice, G. Montavon and N. Galland, “Investigation of the AtO(OH)₂⁻ hydrolysed species : Relativistic calculations”, SOS-TRUP Summer School : Quantum Chemistry and Molecular Properties, Himmelbjerget, Denmark, 6–18 July, 2014.
- D.-C. Sergentu, D. Roca-Sanjuán, R. W. A. Havenith and R. Braam-Broer, “Revisiting the intersystem crossing in benzophenone”, 9th European Conference on Computational Chemistry, Sopron, Hungary, 2–6 September, 2013.
- Seminarii cu audiență largă** D.-C. Sergentu, “²²⁵Actinium (coordination) chemistry”, September 25, 2019. Oral communication in front of the research groups of Prof. Eva Zurek and Prof. Jochen Autschbach, University at Buffalo, Buffalo NY.
- D.-C. Sergentu, “Actinide chemical bonding from ab initio X-ray absorption spectroscopy (XAS)”, November 20, 2018. Oral communication in front of the research groups of Prof. Eva Zurek and Prof. Jochen Autschbach, University at Buffalo, Buffalo NY.
- D.-C. Sergentu, J. Champion, A. Sabatié-Gogova, J.-Y. Le Questel, R. Maurice, G. Montavon and N. Galland, “Investigating AtO⁺-(OH⁻)_n complexes at the molecular scale using quantum mechanical methods”, Scientific days of The 3MPL doctorate school, Le Mans, France, June 2015. Oral communication in front of PhD students of the 3MPL doctorate school from Nantes, Le Mans and Anger, France.
- 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”, Scientific Days of The 3MPL Doctorate School, Nantes, France, June 2014. Poster presentation in front of PhD students of the 3MPL doctorate school from Nantes, Le Mans and Anger, France.
- 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”, University of Groningen, The Netherlands, April 2014. Seminar given in front of the research group of Prof. Ria Braam-Broer.
- D.-C. Sergentu, R. Maurice, R. W. A. Havenith, R. Broer and D. Roca-Sanjuán, “Revisiting the intersystem crossing in benzophenone”, IFW Dresden, Germany, March 2013. Invited seminar given in front of scientists from the Leibniz Institute for solid state and material research, Dresden, Germany.