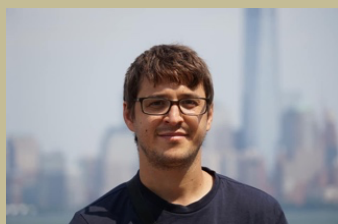


Dumitru-Claudiu SERGENTU



Lect. univ. dr.

e-mail:

dumitru.sergentu@uaic.ro

Chimie Fizică

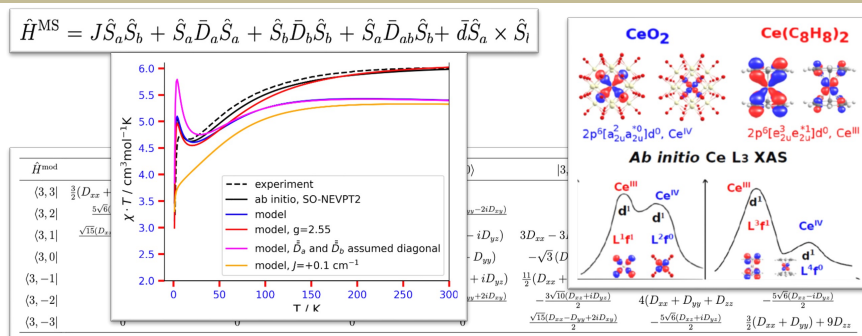
Chimie Teoretică

Chimie Computațională

Domenii de cercetare

- **Chimie computațională:** Modelarea geometriei, structurii electronice și proprietăților fizico-chimice ale unor compuși chimici cu metale de tranziție, lantanide și actinide în diverse contexte experimentale.
- **Spectroscopie moleculară:** Utilizarea metodelor *ab initio* din chimia cuantică pentru modelarea și interpretarea proprietăților moleculare vizate în experimente de spectroscopie: UV-Vis, IR, XAS, NMR, etc.
- **Magnetism molecular:** Derivarea analitică și implementarea unor noi Hamiltonieni model care să permită determinarea și raționalizarea proprietăților magnetice în compuși mono și polinucleari.

Inițiez activități de programare științifică (Python, Fortran, C++) și calcule predictive în contexte experimentale sau pur fundamentale, utilizând metode avansate de chimie cuantică (quasi-)relativistă, bazate pe teoria funcțiilor de undă (WFT) sau teoria densității de electroni (DFT). Subiectele abordate includ dezvoltarea de instrumente teoretice pentru calculul și interpretarea spectrelor XAS în compuși cu lantanide și actinide, precum și determinarea stării de oxidare a metalului și a naturii interacțiunilor de legătură ce se stabilesc în astfel de compuși. De asemenea, derivarea, implementarea și rezoluția de noi Hamiltonieni model pentru compuși mono și polinucleari cu metale de tranziție, lantanide și actinide, sau o combinație a acestora cu radicali organici, sunt activități pe care le desfășor în contextul proiectării de noi magneți unimoleculari promițători (SMMs). În acest scop inițiez cu predilecție calcule ce utilizează funcții de undă multiconfiguraționale și relativiste.



Postdoctorat
Marie-Curie Bienvenüe
Nov. 2022 – Dec. 2023,
Université de Rennes,
Franța

Postdoctorat
Feb. 2017 – Dec. 2021,
University of New York at
Buffalo, USA

Doctorat (PhD)
Chimie Teoretică
Université de Nantes,
Franța, 2016

Master (MSc)
Chimie Teoretică și
Modelare Computațională
University of Groningen
Olanda, 2013

Publicații (selecție)

1. D.-C. Sergentu, J. Autschbach „Covalency in actinide(IV) hexachlorides in relation to chlorine K-edge X-ray absorption structure”, *Chem. Sci.* **13**, 3194, 2022.
2. G. B. Panetti, D.-C. Sergentu, M. R. Gau, J. Autschbach, P. J. Walsh, E. J. Schelter „Isolation and characterization of a covalent Ce^{IV}-aryl complex with an anomalous ¹³C chemical shift” *Nat. Commun.* **12**, 1713, 2021.
3. J. M. Sperling, E. J. Warzecha, C. Celis-Barros, D.-C. Sergentu, [...], E. Zurek, J. Autschbach, T. E. Albrecht-Schmitt „Compression of curium pyrrolidinedithiocarbamate enhances covalency” *Nature* **583**, 396, 2020.
4. D.-C. Sergentu, F. Gendron, J. Autschbach, „Similar ligand-metal bonding for transition metals and actinides? 5f¹ U(C₇H₇)₂⁻ versus 3dn metallocenes” *Chem. Sci.* **9**, 6292, 2018.
5. 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, E. J. Schelter, „Understanding and Controlling the Emission Brightness and Color of Molecular Cerium Luminophores” *J. Am. Chem. Soc.* **140**, 4588, 2018.
6. N. Guo, D.-C. Sergentu, D. Teze, R. Maurice, J. Champion, N. Galland, G. Montavon, „The heaviest possible ternary trihalogen species, AtIBr⁻, evidenced in aqueous solution: An experimental effort driven by computations” *Angew. Chem. Int. Ed.* **55**, 15369, 2016.
7. 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, G. Montavon, „Advances on the determination of the astatine Pourbaix diagram: Predomination of [AtO(OH)₂]⁻ over At⁻ in basic conditions” *Chem. Eur. J.* **22**, 2964, 2016.