

**Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych,
stanowiących znaczny wkład w rozwój określonej
dyscypliny**

Cina Foroutan-Nejad

I. I. WYKAZ OSIĄGNIĘĆ NAUKOWYCH ALBO ARTYSTYCZNYCH, O KTÓRYCH MOWA W ART. 219 UST. 1. PKT 2 USTAWY

**Cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2b ustawy
(H1 – H7)**

(* - autor korespondencyjny)

Impact factor (IF) czasopisma i liczba cytowań (C) podane w każdym przypadku według Journal Citation Report.

Sumaryczny impact factor dla H1-H7: 40.255 (Max IF: 15.419 Min IF: 3.676)

Liczba cytowań dla H1-H7 według WoS: 157 (Max C: 34 Min C: 10)

Publikacja H1

Al_4^{2-} ; The anion- π interactions and aromaticity in the presence of counter ions

Foroutan-Nejad, C.*

Physical Chemistry Chemical Physics, 2012, 14(27), pp.9738-9748 (**IF: 3.676, C: 12**)

Jest to jedna z czterech publikacji, w których jestem jedynym autorem.

Publikacja H2

**Potential energy surface and binding energy in the presence of an external electric field:
Modulation of anion- π interactions for graphene-based receptors**

Foroutan-Nejad, C.*, Marek, R.

Physical Chemistry Chemical Physics, 2014, 16(6), pp.2508-2514 (**IF: 3.676, C: 34**)

Mój wkład w powstanie tej publikacji polegał na rozwinięciu głównej idei, wykonaniu obliczeń, napisaniu i wysłaniu do druku podstawowego manuskryptu; prowadziłem także korespondencję z recenzentami. Manuskrypt następnie redagował R. M. Celem tej pracy była ocena wpływu zewnętrznego pola elektrycznego na budowę i wiązania układów naładowanych (kompleksy anion- π). Dwa istotne rezultaty tej publikacji są obszerniej omówione poniżej.

Oceniam, że w tej publikacji wykonałem 75% pracy.

Publikacja H3

Comment on some unexpected behavior of the adsorption of alkali metal ions onto the graphene surface under the effect of external electric Field

Foroutan-Nejad, C.,* Novák, M., Marek, R.

Journal of Physical Chemistry C, 2015, 119(10), pp.5752-5754 (IF: 4.126, C: 13)

Moja rola w tej publikacji polegała na nadzorowaniu Martina Nováka, który wykonywał obliczenia, a następnie opisał wyniki jako manuskrypt na podstawie sprawozdania, które od niego otrzymałem. Prowadziłem korespondencję z autorami komentowanej pracy, redakcją i odpowiadałem recenzentom. Publikacja ta była częścią pracy doktorskiej M. Nováka. Mój udział szacuję na 50%.

Publikacja H4

Dipolar molecules inside C70: An electric field-driven room-temperature single-molecule switch

Foroutan-Nejad, C.,* Andrushchenko, V., Straka, M.

Physical Chemistry Chemical Physics, 2016, 18(48), pp.32673-32677 (IF: 3.676, C: 32)

Praca ta była częścią moich projektów - Marie Curie i podoktorskiego. Mój wkład w tej publikacji polegał na dostrojeniu urządzenia przez znalezienie endohedralnych cząsteczek odpowiadających na zewnętrzne pole elektryczne, które byłyby racjonalnym celem syntetycznym. Ponadto, wykonałem dokładną analizę obliczeniową, aby znaleźć najlepsze łączniki, które przymocują molekularny przełącznik do elektrod obwodu w warunkach umożliwiających działanie przełącznika. Brałem udział w pisaniu manuskryptu, przygotowaniu odpowiedzi recenzentom i prowadziłem korespondencję z redakcją. Mój udział szacuję na 50%.

Publikacja H5

Solvent effects on ion-receptor interactions in the presence of an external electric field

Novák, M., Foroutan-Nejad, C.,* Marek, R.

Physical Chemistry Chemical Physics, 2016, 18(44), pp.30754-30760 (IF: 3.676, C: 10)

Publikacja ta była częścią pracy doktorskiej M. Nováka i mojego projektu podoktorskiego nt. oddziaływania jonów z arkuszami grafenu w zewnętrznym polu elektrycznym. Analizowaliśmy wpływ modeli (implicite i explicite) rozpuszczalnika na zakres oddziaływań jon- π dla anionów i kationów. Badaliśmy serię rozpuszczalników, od bardzo polarnych do niepolarnych. Mój wkład w tej publikacji

polegał na nadzorowaniu go, gdy wykonywał obliczenia; ja interpretowałem wyniki, pisałem i wysyłałem manuskrypt, a także odpowiadałem recenzentom. Mój udział szacuję na 50%.

Publikacja H6

Modulating Electron Sharing in Ion- π -Receptors via Substitution and External Electric Field: A Route toward Bond Strengthening

Novák, M., Foroutan-Nejad, C.* , Marek, R.

Journal of Chemical Theory and Computation, 2016, 12(8), pp.3788-3795 (IF: 6.006, C: 28)

Celem tych badań było wykazanie, że mechanizm oddziaływań jon- π , kontrolowanych przez zewnętrzne pole elektryczne, jest identyczny do podstawienia π -systemu grupą elektronoakceptorową/donorową. Publikacja ta była częścią pracy doktorskiej M. Nováka i mojego projektu podoktorskiego. Mój wkład w tej publikacji polegał na rozwinięciu idei, interpretacji wyników, napisaniu manuskryptu i prowadzeniu korespondencji z redakcją i recenzentami. Mój udział szacuję na 50%.

Publikacja H7

Fullerene-based switching molecular diodes controlled by oriented external electric fields

Jaroš, A., Bonab, E.F., Straka, M., Foroutan-Nejad, C.*

Journal of the American Chemical Society, 2020, 141(50), pp.19644-19654 (IF: 15.419, C: 28)

Celem tej pracy była ocena pomysłu, by używać endohedralnych fullerenów jako jednocząsteczkowych memrystorów, i.e. przełączających diod molekularnych. Mój wkład w powstanie tej publikacji polegał na rozwinięciu idei jednocząsteczkowego memrystora, nadzorowaniu E. F. Bonaba, który wykonywał obliczenia, interpretacji wyników, napisaniu manuskryptu oraz prowadzeniu korespondencji z redakcją i recenzentami.

Publikacja ta była częścią prac doktorskich moich doktorantów A. Jaroša i E.F. Bonaba. Mój udział szacuję na 40%.

II. WYKAZ AKTYWNOŚCI NAUKOWEJ ALBO ARTYSTYCZNEJ

1. Wykaz opublikowanych rozdziałów w monografiach naukowych..

Principles of Molecular Devices Operated by Electric Fields. N. Darwish, **C. Foroutan-Nejad**, L. Domulevich, J. Hihath, I. Díez-Pérez in “Effects of Electric Fields on Structure and Reactivity”; **New Horizons of Chemistry**, 2021, 147-194, ISBN: 978-1-83916-169-8 by Royal Society of Chemistry. (**Invited Book Chapter**)

2. Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych (z zaznaczeniem pozycji niewymienionych w pkt I.2).

(* - autor korespondencyjny)

Impact factor (IF) czasopisma i liczba cytowań (C) podane w każdym przypadku według Journal Citation Report.

60- On-Surface Azide–Alkyne Cycloaddition Reaction: Does it Click with Ruthenium Catalysts? T. Li, E. M. Dief, Z. Kalužná, M. MacGregor, **C. Foroutan-Nejad***, N. Darwish, Langmuir, (Accepted) (**IF: 3.882, C: 0**)

59- Collective interactions among organometallics are exotic bonds hidden on lab shelves. S. Sowlati-Hashjin, V. Šadek, S. Sadjadi, M. Karttunen, A. Martín-Pendás, **C. Foroutan-Nejad***, Nat. Commun. 2022, 13, 2069. (**IF: 14.919, C: 0**)

58- $[\{\text{Th}(\text{C}_8\text{H}_8)\text{Cl}_2\}_3]^{2-}$ Is Stable but Not Aromatic. B. J. R. Cuyacot, **C. Forouatan-Nejad***, Nature 2022, 603, E18-E20. (**IF: 49.962, C: 1**)

57- Path-Dependency of Energy Decomposition Analysis & the Elusive Nature of Bonding. J. Poater, D. M. Andrada, M. Sola, **C. Foroutan-Nejad***, Phys. Chem. Chem. Phys. 2022, 24, 2344-2348. (**IF: 3.676, C: 4**)

56- A double bond with weak sigma- and strong pi-interactions is still a double bond. **C. Foroutan-Nejad***, Nat. Commun. 2021, 12, 4037. (**IF: 14.919, C: 3**)

- 55- Bonding and Aromaticity in Electron-Rich Boron and Aluminum Clusters. **C. Foroutan-Nejad***, *J. Phys. Chem. A* 2021, 125, 6, 1367–1373. **(IF: 2.781, C: 0)**
- 54- Anatomy of Base Pairing in DNA by Interacting Quantum Atoms. B. J. R. Cuyacot, I. Durnik, C. **Foroutan-Nejad***, R. Marek, *J. Chem. Inf. Model.* 2021, 61, 1, 211–222. **(IF: 4.956, C: 2)**
- 53- Energy components in energy decomposition analysis (EDA) are path functions; why does it matter? D. M. Andrada, **C. Foroutan-Nejad***, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2020, 22, 22459–22464. **(IF: 3.676, C: 23)**
- 52- From π Bonds without σ Bonds to the Longest Metal–Metal Bond Ever: A Survey on Actinide–Actinide Bonding in Fullerenes. A. Jaroš, **C. Foroutan-Nejad***, M. Straka, *Inorg. Chem.* 2020, 59, 12608–12615. **(IF: 5.165, C: 11)**
- 51- Na...B Bond in NaBH₃–; A Different Type of Bond. **C. Foroutan-Nejad***, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2020, 59, 20900–20903. **(IF: 15.336, C: 15)**
- 50- Relativity or Aromaticity? A First-Principles Perspective of Chemical Shifts in Osmabenzene and Osmapentalene Derivatives. **C. Foroutan-Nejad***, J. Vicha, A. Ghosh, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2020, 22, 10863–10869. **(IF: 3.676, C: 15)**
- 49- Fullerene-Based Switching Molecular Diodes Controlled by Oriented External Electric Fields. A. Jaroš, E. F. Bonab, M. Straka, **C. Foroutan-Nejad***, *J. Am. Chem. Soc.* 2019, 141, 19644–19654. **(IF: 15.419, C: 34)**
- 48- Bifurcated hydrogen bonds in platinum(II) complexes with phosphinoamine ligands. M. Sojka, J. Tousek, Z. Badri, **C. Foroutan-Nejad**, M. Necas, *Polyhedron* 2019, 170, 593–601. **(IF: 3.052, C: 2)**

- 47- $^1\text{H-NMR}$ is not a proof of hydrogen bonds in transition metal complexes. J. Vicha, **C. Foroutan-Nejad***, M. Straka, **Nat. Commun.** 2019, 10, 1643. (IF: 14.919, C: 14)
- 46- Norcorrole as a delocalized antiaromatic system. J. Conradie, **C. Foroutan-Nejad***, A. Ghosh, **Sci. Rep.** 2019, 9, 4852. (IF: 4.380, C: 16)
- 45- Electrochemical metallization ReRAMs (ECM) - Experiments and modelling: general discussion. E. Ambrosi, P. Bartlett, S. Berg, S. Brivio, G. Burr, S. Deswal, J. Deuermeier, M. Haga, A. Kiazadeh, G. Kissling, M. Kozicki, **C. Foroutan-Nejad**, E. Gale, Y. Gonzalez-Velo, A. Goossens, L. Goux, T. Hasegawa, H. Hilgenkamp, R. Huang, S. Ibrahim, D. Ielmini, T. Kenyon, V. Kolosov, Y. Li, S. Majumdar, G. Milano, T. Prodromakis, N. Raeishosseini, V. Rana, C. Ricciardi, M. Santamaria, A. Shluger, I. Valov, R. Waser, S. Williams, D. Wouters, Y. Yang, A. Zaffora, **Faraday Discuss.** 2019, 213, 115-120. (IF: 4.008, C: 3)
- 44- Phase-change memories (PCM) Experiments and modelling: general discussion. P. Bartlett, M. Bernasconi, S. Brown, G. Burr, **C. Foroutan-Nejad**, E. Gale, R. Huang, D. Ielmini, G. Kissling, V. Kolosov, M. Kozicki, H. Nakamura, K. Rushchanskii, M. Salinga, A. Shluger, D. Thompson, I. Valov, W. Wang, R. Waser, S. Williams, **Faraday Discuss.** 2019, 213, 393-420. (IF: 4.008, C: 2)
- 43- Magnetic Diversity in Heteroisocorroles: Aromatic Pathways in 10-Heteroatom-Substituted Isocorroles. **C. Foroutan-Nejad***, A. Ghosh, **ACS Omega**, 2018, 3, 15865. (IF: 3.512, C: 12)
- 42- Local: Versus global aromaticity in azuliporphyrin and benziporphyrin derivatives. A. Ghosh, S. Larsen, J. Conradie, **C. Foroutan-Nejad***, **Org. Biomol. Chem.** 2018, 16, 7964. (IF: 3.876, C: 7)
- 41- Buckyball Difluoride $\text{F}_2^-@C_{60}^+$; a Single-Molecule Crystal. **C. Foroutan-Nejad***, M. Straka, I. Fernandez, G. Frenking, **Angew. Chem. Int. Ed.** 2018, 57, 13931/**Angew. Chem.** 2018, 130, 14127. (IF: 15.336, C: 17)

- 40- Isocorroles as Homoaromatic NIR-Absorbing Chromophores: A First Quantum Chemical Study. **C. Foroutan-Nejad***, S. Larsen, J. Conradie, A. Ghosh, **Sci. Rep.** 2018, 8, 11952. (IF: 4.380, C: 10)
- 39- Why Is Benzene Unique? Screening Magnetic Properties of C₆H₆ Isomers. T. Janda, **C. Foroutan-Nejad***, **ChemPhysChem** 2018, 19, 2357-2363. (IF: 3.102, C: 18)
- 38- How Does a Container Affect Acidity of its Content: Charge-Depletion Bonding Inside Fullerenes. A. Jaroš Z. Badri, P. Lochan Bora, E. Farajpour Bonab, R. Marek, M. Straka, **C. Foroutan-Nejad***, **Chem. Eur. J.** 2018, 24, 4245-4249. (IF: 5.236, C: 19)
- 37- Nature of three electron bonds. D. Danovich, **C. Foroutan-Nejad***, Philippe Hiberty, Sason Shaik, **J. Phys. Chem. A** 2018, 122, 1873-1885 (Invited Paper; virtual special issue Manuel Yáñez and Otilia Mó Festschrift). (IF: 2.781, C: 21)
- 36- Anti-Electrostatic CH-Ion Bonding in Decorated Graphanes. M. Novák, R. Marek, **C. Foroutan-Nejad*** **Chem. Eur. J.** 2017, 23, 14931-14936. (IF: 5.236, C: 10)
- 35- Supramolecular Covalence in Bifurcated Chalcogen Bonding. P. L. Bora, M. Novák, J. Novotný, **C. Foroutan-Nejad**, R. Marek **Chem. Eur. J.** 2017, 23, 7315–7323. (IF: 5.236, C: 39)
- 34- Aromaticity, the Huckel $4n + 2$ Rule and Magnetic Current. L. Zhao, R. Grande-Aztatzi, **C. Foroutan-Nejad***, J. M. Ugalde, G. Frenking, **ChemistrySelect** 2017, 2, 863-870. (IF: 2.109, C: 43)
- 33- Dipolar molecules inside C₇₀: an electric field-driven room-temperature single-molecule switch. **C. Foroutan-Nejad***, V. Andrushchenko, M. Straka, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2016, 18, 32673-32677. (IF: 3.676, C: 32)
- 32- Solvent effects on ion–receptor interactions in the presence of an external electric field. M. Novák, **C. Foroutan-Nejad***, R. Marek, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2016, 18, 30754-30760. (IF: 3.676, C: 10)

- 31-** Modulating Electron Sharing in Ion- π -Receptors via Substitution and External Electric Field: A Route toward Bond Strengthening. M. Novák, **C. Foroutan-Nejad***, R. Marek, **J. Chem. Theory Comput.** 2016, 12, 3788-3795. **(IF: 6.006, C: 28)**
- 30-** Unification of Ground-State Aromaticity Criteria –Structure, Electron Delocalization, and Energy– in the Light of the Quantum Chemical Topology. Z. Badri, **C. Foroutan-Nejad***, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2016, 18, 11693-11699 **(Invited Paper; Special Issue on Electron delocalization and aromaticity: 150 years of the Kekulé benzene structure)** **(IF: 3.676, C: 50)**
- 29-** Multicenter Covalency: Revisiting the Nature of Anion- π Interactions. **C. Foroutan-Nejad***, Z. Badri, R. Marek, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2015, 17, 30670-30679. **(IF: 3.676, C: 67)**
- 28-** On the Non-Classical Contribution in Lone Pair- π Interaction: IQA perspective. Z. Badri, **C. Foroutan-Nejad**, J. Kozelka, R. Marek, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2015, 17, 26183-26190. **(IF: 3.676, C: 51)**
- 27-** Unwilling U–U Bonding in U₂@ C₈₀. Cage-Driven Metal Metal Bonds in Di-Uranium Fullerenes. **C. Foroutan-Nejad**, J. Víchá, R. Marek, M. Patzschke, M. Straka, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2015, 17, 24182-24192. **(IF: 3.676, C: 34)**
- 26-** Understanding the Electronic Factors Responsible for Ligand Spin–Orbit NMR Shielding in Transition-Metal Complexes. J. Víchá, **Cina Foroutan-Nejad**, T. Pawlak, M. L. Munzarová, M. Straka, R. Marek, **J. Chem. Theory Comput.** 2015, 11, 1509-1517. **(IF: 6.006, C: 44)**
- 25-** Comment on “Some Unexpected Behavior of the Adsorption of Alkali Metal Ions onto the Graphene Surface under the Effect of External Electric Field”. **C. Foroutan-Nejad***, M. Novák, R. Marek, **J. Phys. Chem. C** 2015, 119, 5752-5754. **(IF: 4.126, C: 13)**
- 24-** Asymmetric bifurcated halogen bonds. Martin Novák, **C. Foroutan-Nejad***, R. Marek, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2015, 17, 6440-6450. **(IF: 3.430, C: 49)**

23- Is NICS a reliable aromaticity index for transition metal clusters? C. Foroutan-Nejad*, *Theor. Chem. Acc.* 2015, 134, 1-9. (Topical Collection XI Girona Seminar Collection: Carbon, Metal, and Carbon-Metal Clusters) (IF: 1.702, C: 55)

22- Design of Stereo–Electronically Promoted Super–Lewis Acids and Unprecedented Chemistry of Their Complexes. C. Foroutan-Nejad*, J. Vícha, R. Marek, *Chem. Eur. J.* 2014, 20, 11584-11590. (IF: 5.236, C: 9)

21- Toward a consistent interpretation of the QTAIM: Tortuous link between chemical bonds, interactions and bond/line paths. C. Foroutan-Nejad, S. Shahbazian, R. Marek, *Chem. Eur. J.* 2014, 20, 10140-10152. (Highly Cited Paper, June to September 2015 According to ISI Web of Knowledge) (IF: 5.236, C: 156)

20- Origin of Thermodynamic Stability of Polymorph IV of Crystalline Barbituric Acid: Evidences from Solid-State NMR and Electron Density Analyses. Z. Badri, K. Bouzková, C. Foroutan-Nejad, R. Marek, *Cryst. Growth Des.* 2014, 14, 2763-2772. (IF: 4.076, C: 19)

19- Potential energy surface and binding energy in the presence of an external electric field: modulation of anion– π interactions for graphene-based receptors. C. Foroutan-Nejad*, R. Marek, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2014, 16, 2508-2514. (IF: 3.676, C: 35)

18- All-metal aromaticity: revisiting the ring current model among transition metal clusters. Z. Badri, S. Pathak, H. Fliegl, P. Rashidi-Ranjbar, R. Bast, R. Marek, C. Foroutan-Nejad*, K. Ruud, *J. Chem. Theory Comput.* 2013, 9, 4789-4796. (IF: 6.006, C: 73)

17- A theoretical survey on the D_{7d} [84]fullerene, a fullerene with two heptagon rings. Z. Badri, C. Foroutan-Nejad, P. Rashidi-Ranjbar, *Comput. Theor. Chem.* 2013, 1009, 103-107. (IF: 1.926, C: 4)

- 16- Al_4^{2-} ; the anion- π interactions and aromaticity in the presence of counter ions. **C. Foroutan-Nejad***, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2012, 14, 9738-9748. (IF: 3.676, C: 12)
- 15- Method/basis set dependence of NICS values among metallic nano-clusters and hydrocarbons. Z. Badri, **C. Foroutan-Nejad***, P. Rashidi-Ranjbar, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2012, 14, 3471-3481. (IF: 3.676, C: 13)
- 14- Molecular structure and antimicrobial activity of binuclear Ag (I) complex of phenyl bis(2-pyridyl)phosphine. A. Nemati Kharat A. Bakhoda, S. Foroutan-Nejad, **C. Foroutan-Nejad**, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*, 2011, 637, 2260-2264. (IF: 1.492, C: 13)
- 13- Laplacian of electron density vs. NICS_{zz} scan: measuring magnetic aromaticity among molecules with different atom types. **C. Foroutan-Nejad**, Z. Badri, S. Shahbazian, P. Rashidi-Ranjbar, *J. Phys. Chem. A* 2011, 115, 12708-12714. (Invited Paper; the R. F. W. Bader's Festschrift) (IF: 2.781, C: 25)
- 12- Inter-Atomic Magnetizability: a QTAIM-Based Approach toward Deciphering Magnetic Aromaticity. **C. Foroutan-Nejad***, *J. Phys. Chem. A* 2011, 115, 12555-12560. (Invited Paper; the R. F. W. Bader's Festschrift) (IF: 2.781, C: 39)
- 11- How Electron Delocalization Affect the Electronic Energy? A Survey among Neutral Poly-Nitrogen Clusters. J. Najafpour, **C. Foroutan-Nejad**, H. Shafiee, M. Kordi Peykani, *Comput. Theor. Chem.* 2011, 974, 86-91. (IF: 1.926, C: 22)
- 10- Reply to 'Is there a connection between electron densities at the ring critical points and NICS? A comment on "The electron density vs. NICS scan: a new approach to assess aromaticity in molecules with different ring sizes."' **C. Foroutan-Nejad***, S. Shahbazian, P. Rashidi-Ranjbar, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2011, 13, 12655-12658. (IF: 3.676, C: 14)

- 9- A Dissected Ring Current Model for Assessing Magnetic Aromaticity: A General Approach for both Organic and Inorganic Rings. **C. Foroutan-Nejad**, S. Shahbazian, Ferran Feixas, P. Rashidi-Ranjbar, Miquel Sola, **J. Comput. Chem.** 2011, 32, 2422-2431. **(IF: 3.376, C: 45)**
- 8- The Critical Re-evaluation of the Aromatic/Anti-aromatic Nature of $Ti_3(CO)_3$: A Missed Opportunity. **C. Foroutan-Nejad***, S. Shahbazian, P. Rashidi-Ranjbar, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2011, 13, 4576-4582. **(IF: 3.676, C: 25)**
- 7- The Electron Density vs. NICS Scan: A New Approach to Assess Aromaticity in Molecules with Different Ring Sizes. **C. Foroutan-Nejad***, S. Shahbazian, P. Rashidi-Ranjbar, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 2010, 12, 12630-12637. **(IF: 3.676, C: 56)**
- 6- Topological characteristics of the Ring Critical Points and the aromaticity of groups IIIA to VIA hetero-benzenes. A. A. Ebrahimi, R. Ghiasi, **C. Foroutan-Nejad***, **J. of Mol. Struct. THEOCHEM** 2010, 941, 47-52. **(IF: 1.926, C: 37)**
- 5- Chemical bonding in the lightest tri-atomic clusters; H_3^+ , Li_3^+ and B_3^- . **C. Foroutan-Nejad**, P. Rashidi-Ranjbar, **J. of Mol. Struct. THEOCHEM** 2009, 901, 243-248. **(IF: 1.926, C: 14)**
- 4- Atomic basins with more than a single nucleus: A computational fact or a mathematical artifact? **C. Foroutan-Nejad***, S. Shahbazian, **J. of Mol. Struct. THEOCHEM** 2009, 894, 20-22. **(IF: 1.926, C: 14)**
- 3- Application of quantum theory of atoms in molecules on small single wall (6, 0) zigzag carbon clusters. Part I: Topological analysis of electron density, structure and bonding. P. Rashidi-Ranjbar, A. Sadjadi, G. H. Shafiee, **C. Foroutan-Nejad**, **J. of Mol. Struct. THEOCHEM** 2008, 856, 79-87. **(IF: 1.926, C: 5)**
- 2- Facile and efficient pinacol rearrangement using tungstophosphoric acid ($H_3PW_{12}O_{40}$) under solvent-free conditions. M. Yahyaei, E. Kianmehr, **C. Foroutan-Nejad**, S. Beheshti, **B. Korean Chem. Soc.** 2006, 8, 1246-1248. **(IF: 0.969, C: 5)**

1- Ab initio charge density analysis of (B6C)2- and B4C3 species - How to describe the bonding pattern? **C. Foroutan-Nejad**, G. H. Shafiee, A. Sadjadi, S. Shahbazian, **Can. J. Chem.** 2006, 84, 771-781. **(IF: 1.118, C: 19)**

3. Wykaz wystąpień na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych lub artystycznych, z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych.

12- From Memristor to Spinristor; Endohedral Metallofullerenes for Molecular Electronics
10th International Conference on Molecular Electronics (ElecMol), 29 November-2 December 2021.

11- Ground and excited state aromaticity, **International Conference on Excited-State Aromaticity and Antiaromaticity, ICESAA 1**, 29 July-2 August 2019, **Uppsala University, Sigtuna, Sweden.**
(Invited Talk)

10- Molecular memories, **XII Summer School of Chemistry**, 12-13 September 2018, **Masaryk University, Brno, Czechia.** **(Invited Talk)**

9- A series of talks on **Chemical Bond Theory in Annual Workshop of Modern Methods in Quantum Chemistry, Mariapfarr Austria (2013 – 2017)**

8- Manipulating Inter-Molecular Interactions via External Fields, Invited talk for the theoretical chemistry group, 16-18 November 2016, **Philipps Universitat Marburg, Marburg, Germany.**
(Invited Talk)

7- Unification of Ground-State Aromaticity Criteria, **International Symposium on Theoretical Chemical Physics, ISTCP IX**, 17-22 July 2016, **Grand Forks, North Dakota, U.S.A.**

6- Chairing the chemical concept session of **International Symposium on Theoretical Chemical Physics, ISTCP IX on Chemical Concepts**, 17-22 July 2016, **Grand Forks, North Dakota, U.S.A.**

5- Manipulating Inter-Molecular Interactions via External Fields, **International Conference on Chemical Bonding (ICCB 2016)**, 14-18 July 2016, Organized by **University of California Los Angeles-UCLA at Kauai, Hawaii, U.S.A.** **(Invited Talk)**

4- In Silico Design and Chemistry of Stereo-Electronically Promoted Super Lewis Acids, **Summer Symposium of the Amsterdam Center for Multiscale Modeling (ACMM)**, 25 June 2015, Amsterdam, Netherlands.

3- Chairing the theoretical/computational session of 30th Central European NMR Meeting, 19.4-22.4.2015, Valtice, Czech Republic.

2- All-Metal Aromaticity: Revisiting the Ring Current Model among Transition Metal Clusters, **Workshop on Magnetically Induced Currents in Molecules**, 17-21 November 2014, Tvarminne, Finland. **(Invited Talk)**

1- Aromaticity from NICS to Bond Magnetizability, C. Foroutan-Nejad, **Changsha International Quantum Chemistry Workshop**, 7-8 June 2012, Changsha, China. **(Invited Talk)**

4. Wykaz członkostwa w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach.

Member of the Royal Society of Chemistry, 2012-2014 for contribution to Physical Sciences as a Young Researcher

5. Wykaz staży w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru.

Listopad 2013 i wrzesień 2014

Visiting Researcher – grupa prof. **Kenneth Ruud**, UiT The Arctic University of Norway, Tromsø, Norway

Maj - Lipiec 2014:

Visiting Researcher – grupa prof. **Petr Bouř**, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Academy of Sciences of the Czech Republic

Październik 2012 – Listopad 2014:

Postdoctoral researcher – grupa prof. **Radek Marek**, National Centre for Biomolecular Research, Faculty of Science, Masaryk University, Brno, Czech Republic

Marzec 2011 – październik 2012

Visiting Researcher – grupa prof. **Shant Shahbazian**, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran

6. Wykaz członkostwa w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism wraz z informacją o pełnionych funkcjach (np. redaktora naczelnego, przewodniczącego rady naukowej, itp.).

Review Editor of *Frontiers of Chemistry*, Nature Publishing Group

7. Wykaz recenzowanych prac naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych.

Recenzent ponad 299 publikacji w *Journal of the American Chemical Society*, *Angewandte Chemie*, *Nature Communications*, *Inorganic Chemistry*, *Chemistry-A European Journal*, *ACS Applied Nano Materials*, *The Journal of Organic Chemistry*, *Journal of Materials Chemistry C*, *Scientific Reports*, I wiele więcej.

Pełna lista recenzji jest dostępna w bazie Publons:

<https://publons.com/author/906865/cina-foroutan-nejad#profile>

Distinguished Reviewer in Years 2016, 2017, and 2018 According to Publons Statistics

8. Wykaz uczestnictwa w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów.

2021-2024	2,200,600 PLN OPUS (48 months) - kierownik
2020-2023	<u>Co-Applicant</u> 5,400,000 CZK, Ministry of Education, Czech Republic (GACR) (36 Months)
2018-2019	420,000 CZK, GAMU E, Prize for excellent results
2017-2020	3,615,000 CZK, Ministry of Education, Czech Republic (GACR) (36 Months)
September 2014	2,000 € Award from Center of Theoretical and Computational Chemistry (CTCC), Norway, for covering research stay in Norway
2014-2017	129,558 € Marie Curie Fellowship (26 Months)

9. Działalność mentorska

Supervisor of Ph.D. Thesis Martin Novák

Topic: Effect of external electric fields on chemical bonding (Publications No. 24, 25, 31, 32, 35, and 36)

Supervisor of Ph.D. Thesis Esmaeil F. Bonab

Topic: Designing molecular devices based on endohedral fullerenes (Publications No. 38 and 49)

Advisor of Ph.D. Thesis Pankaj L. Bora

Topic: The effect of intermolecular interactions on magnetic properties of molecules (Publication No. 38)

Supervisor of B.Sc. Thesis Tomáš Janda

Topic: Surveying energetic and magnetic properties of C₆H₆ isomers (Publication No. 39)

IV. DANE NAUKOMETRYCZNE

Number of ISI Journal Publications:

57 (3 in 2017, 7 in 2018, 6 in 2019, 5 in 2020 and 5 in 2021)

Corresponding author in 41 publications

Number of Single-Author Publications: 5

Number of Invited Papers: 4 (3 by American Chemical Society, 1 by Royal Society of Chemistry) One more invited paper for ACS will be published in 2021.

Number of publications in M.Sc.: 2 (Publications No. 1 and 2)

Number of publications in Ph.D.: 8 (Publications No. 3 to 10)

Full list of publications available at:

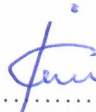
<https://scholar.google.com/citations?user=tc6ZQV4AAAAJ&hl=en>

Invited Talks: 9 (1 in 2012, 1 in 2014, 1 in 2015, 3 in 2016, 1 in 2018, 1 in 2019, and 1 in 2020)

H-Index: 21 (WoS) / 21 (Scopus) / 23 (Google Scholar)

Number of Citations: 1322 (1130 without self-citation) (WoS), 1299 (1110 without self-citation) (Scopus) 1573 (Google Scholar)

Average citation per article: 23.19


.....
(Applicant's signature)