

## CURRICULUM VITAE

### **COSTUAS Karine**

Directeur de recherche au CNRS  
42 ans (03/09/1974)  
Tél. : 02 23 23 69 73  
E-mail : [kcostas@univ-rennes1.fr](mailto:kcostas@univ-rennes1.fr)

### **Institut des sciences chimiques de Rennes**

Equipe de chimie théorique inorganique  
UMR 6226 CNRS – Université de Rennes 1  
Campus de Beaulieu, 35042 RENNES cedex

## THÉMATIQUES DE RECHERCHE

---

*Etude théorique de complexe de coordination de métaux de transition et de lanthanides en chimie quantique (principalement DFT) :*

- Relation arrangement structural / structure électronique / propriétés
- Etude du magnétisme de systèmes mono-nucléaires et bi-nucléaires (valence mixte, délocalisation, transport électronique en jonction)
- Etude théorique de propriétés redox et optiques (absorption, émission, réactivité)

## CURSUS

---

- ◆ 2000      **Doctorat**, mention chimie, Université de Rennes 1
- ◆ 2000-01   **Post-doctorat**, équipe de recherche de M. Parrinello, Institut Max-Planck de Stuttgart (Allemagne) puis ETH Zürich (Suisse)
- ◆ 2002-..   **Chercheur** au CNRS, équipe de Chimie théorique inorganique, Institut des sciences chimiques de Rennes (ISCR) ; *Directeur de recherche depuis oct. 2014.*
- ◆ 2009      **Habilitation à diriger des recherches**, Université de Rennes 1

## ACTIVITÉS PROFESSIONNELLES

---

### **Production scientifique**

- 75 publications
- 1 chapitre de livre
- Comités d'organisation (11 conférences / symposia nationaux et internationaux)
- Co-auteur d'1 brevet (France, US-Patent)
- 13 conférences invitées, 21 communications orales en congrès

### **Gestion de la recherche**

- ◆ 1996-.. : Membre de la Société chimique de France (SCF)
- ◆ 2004-06 : Vice-présidente section Bretagne - Pays de Loire SCF
- ◆ 2006 : Médaille de bronze du CNRS
- ◆ 2006-09 : Trésorière division de chimie de coordination de la SCF
- ◆ 2008 : Membre de la section de "Chimie de coordination, interfaces et procédés" du comité national du CNRS
- ◆ 2012-14 : Membre élue du conseil d'administration de l'Université de Rennes 1
- ◆ 2013-.. : Représentante du pôle ouest au réseau français de chimie théorique (RFCT)
- ◆ 2015-20 : Membre distinguée 2015 de la SCF

SÉLECTION DE PUBLICATIONS SCIENTIFIQUES RÉCENTES

---

- R61.** Revelation of the Photoactive Species in the Photocatalytic Dimerization of  $\alpha$ -Methylstyrene by a Dinuclear Ruthenium-Palladium Complex  
K. Murata, A. Inagaki, A. Munetaka, J.-F. Halet, K. Costuas, *Inorg. Chem.*, **2013**, *52*, 8030-8039.
- R66.** Fluorescence in Rhoda- and Iridacyclopentadienes Neglecting the Heavy Atom's Spin-Orbit Coupling: The Ligand Wins  
A. Steffen, K. Costuas, A. Boucekkine, M.-H. Thibault, A. Beeby, A. S. Batsanov, A. Charaf-Eddin, D. Jacquemin, J.-F. Halet, T. B. Marder, *Inorg. Chem.*, **2014**, *53*, 7055-7069.
- R67.** Diarylethene-containing Carbon-Rich Ruthenium Organometallics: Tuning of Electrochromism  
Y. Liu, C. Mbacké Ndiaye, C. Lagrost, K. Costuas, S. Choua, P. Turek, L. Norel, S. Rigaut, *Inorg. Chem.*, **2014**, *53*, 8172–8188.
- R71.** Combined theoretical and time-resolved photoluminescence investigations of  $[\text{Mo}_6\text{Br}_8\text{Br}_6]^{2-}$  metal cluster units: evidences of dual emission  
K. Costuas, A. Garreau, A. Bulou, B. Fontaine, J. Cuny, R. Gautier, M. Mortier, Y. Molard, J.-L. Duvail, E. Faulques, S. Cordier, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2015**, *17*, 28574-28585
- R72.** A direct picture of the local magnetic anisotropy by polarized neutron diffraction (PND) confronted to EPR, magnetometry and ab initio investigations  
K. Ridier, A. Mondal, C. Boilleau, O. Cadot, B. Gillon, G. Chaboussant, B. Le Guennic, K. Costuas, R. Lescouëzec, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2016**, *55*, 3963-3967.
- R73.** Electronic Structure and Magnetic Properties of Dioxo-Bridged Diuranium Complexes with Diamond Core Structural Motifs. A Relativistic DFT Study  
B. Teyar, L. Belkhiri, K. Costuas, A. Boucekkine, K. Meyer, *Inorg. Chem.*, **2016**, *55*, 2870-2881.
- R75.** Solid State Highly Emissive Cu(I) Metallacycle: Promotion of Cuprophilic Interactions at the Excited States  
M. El Sayed Moussa, S. Evariste, H.-L. Wong, L. Le Bras, C. Roiland, L. Le Polles, B. Le Guennic, K. Costuas, V. W.-W. Yam, C. Lescop, *Chem. Commun.*, **2016**, *52*, 11370-11373.

**BREVET**

Preparation of photoprotective dihydropyridinone compositions  
N. Gouault, K.-H. Nguyen, S. Tomasi, K. Costuas  
PCT Int. Appl., oct. 2014, WO 2014167225 A1

**CONFÉRENCES INVITÉES**

- 8.** *Multifunctional Switchable Carbon-Rich Organometallic Compounds: Theoretical Aspects*  
The 2<sup>nd</sup> Japan-France Coordination Chemistry Symposium, Nara (Japon), 24-28 novembre 2013
- 9.** *Multifunctional coordination complexes for molecular electronics and opto-electronics: a computational contribution*  
10<sup>th</sup> Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Santiago (Chili), 5-10 octobre 2014
- 10.** *Etudes quantiques de complexes de coordination pour l'électronique et l'opto-électronique moléculaires*  
GECOM CONCOORD 2015, Sainte-Foy-Lès-Lyon, 26-29 mai 2015
- 11.** *Quantum chemical studies of metal complexes for molecular electronics and optoelectronics*  
International Conference on Materials Science, Valdivia (Chili), 21-24 octobre 2015
- 13.** *Etudes en chimie quantique de composés métalliques pour l'optoélectronique ou électronique moléculaire*  
Rencontre de Chimistes Théoriciens Francophones, RCTF 2016, Lyon, 27 juin - 1<sup>er</sup> juillet 2016