

## ETUDES EN CHIMIE QUANTIQUE DE COMPOSES METALLIQUES POUR L'OPTOELECTRONIQUE ET L'ELECTRONIQUE MOLECULAIRE

K. Costuas<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Institut des sciences chimiques de Rennes, CNRS - Université de Rennes 1 France,  
E-mail : kcostuas@univ-rennes1.fr

Le développement des matériaux basés sur des assemblages moléculaires s'appuie sur une connaissance approfondie des propriétés intrinsèques des molécules les constituant et des facteurs permettant une optimisation de leurs propriétés. La chimie quantique permet d'accéder à un panel de plus en plus large de données qui combinées aux mesures et interprétations expérimentales permettent de cibler de façon efficace les molécules répondant aux caractéristiques nécessaires pour être intégrées dans des dispositifs. Nous nous intéressons ces dernières années à des composés de chimie de coordination pour leurs propriétés de fils moléculaires, optiques (absorption, luminescence, photochromisme) ou encore magnétiques.

Nous avons mis en évidence l'importance des réorganisations géométriques des systèmes après perturbation (irradiation, oxydation/réduction). Ces changements sont pour l'heure encore ignorés ou sous-estimés dans la littérature. Nous avons récemment traité des systèmes purement inorganiques de type métallacycle<sup>1</sup> ou cluster<sup>2</sup> pour lesquels les propriétés d'émission se sont révélées inhabituelles avec de l'émission de type dual ou encore de type fluorescence retardée. Le traitement computationnel de composés organométalliques comprenant des chaînes organiques conjuguées pour l'électronique moléculaire sera également détaillé.<sup>3</sup>

- [1] 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.  
[2] 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.  
[3] a) F. Meng, Y.-M. Hervault, L. Norel, K. Costuas, C. Van Dyck, V. Geskin, J. Cornil, H. H. Hng, S. Rigaut, X. Chen, *Chem. Sci.*, **2012**, 3, 3113-3118. b) Y. Liu, C. Mbacké Ndiaye, C. Lagrost, K. Costuas, S. Choua, P. Turek, L. Norel, S. Rigaut, *Inorg. Chem*, **2014**, 53, 8172–8188.