

Candidature - Comité national de la recherche scientifique
Section 16 « Chimie de coordination, catalyse et procédés, interfaces » - Collège A

Karine COSTUAS Directrice de recherche au CNRS

E-mail : karine.costuas@univ-rennes.fr

Tél. : 02 23 23 69 73

IdHAL : [karine-costuas](https://orcid.org/0000-0003-0338-0494)

 <https://orcid.org/0000-0003-0338-0494>

ISCR

Institut des Sciences Chimiques de Rennes

Equipe de chimie théorique inorganique

UMR 6226 CNRS – Université de Rennes 1

THÉMATIQUES DE RECHERCHE

Études computationnelles de composés moléculaires de métaux de transition et de lanthanides en chimie quantique (théorie de la fonctionnelle de la densité, DFT) : Relation arrangement structural / structure électronique / état de spin ; Design moléculaire et prédiction de propriétés pour l'opto-électronique ; Simulation des propriétés magnétiques, vibrationnelles, d'excitation électronique ; Réorganisation structurale, réactivité, propriétés électroniques, magnétiques et optiques à l'état excité ; Jonctions moléculaires (transport électronique, thermoélectricité)

PARCOURS PROFESSIONNEL

- ♦ Sept. 2000 **Thèse de doctorat**, Univ. Rennes 1 ; Directeurs : J.-Y. Saillard et J.-F. Halet
 - ♦ 2000-2001 **Post-doctorat**, équipe de recherche de M. Parrinello, Institut Max-Planck de Stuttgart (Allemagne) puis ETH Zürich (Suisse)
 - ♦ Depuis Janv. 2002 **Chargée de recherche** au CNRS, équipe de Chimie théorique inorganique, Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR) **Directrice de recherche** (DR2) en 2014
-

PRODUCTION SCIENTIFIQUE

- ♦ 99 publications, 1 chapitre de livre ; 1 article sans comité de lecture, co-auteur d'1 brevet
 - ♦ 26 conférences et communications invitées des congrès nationaux et internationaux
-

PROJETS FORMALISÉS RÉCENTS

- ♦ 2022-26 : ANR PRC HotElo (porteuse); Partenaires : D. Vuillaume (IEMN, Villeneuve d'Ascq), J. Cornil (U. Mons, Belgique), S. Rigaut (ISCR), E. Scheer (U-Konstanz); *Switchable molecular wires featuring quantum interference for thermoelectric applications*
 - ♦ 2022-26 : ANR PRC (partenaire) porté par S. Rigaut (ISCR, Rennes) ; *Luminescent lanthanide complexes with tunable dynamic optical response (2LCDOR)*
 - ♦ 2021-25 : ANR PRC PHOTOCAT, L. MacAleese (ILM, Lyon) ; *Investigating the photo-catalytic activity of Mo clusters for the reduction of CO₂ into methanol and production of H₂ from water*
 - ♦ 2021-24 : ANR-DFG SUPRALUM, C. Lescop (Rennes) M. Scheer (Regensburg, Allemagne) - *Luminescent coordination-driven supramolecular assemblies based on pre-organized Cu(I) precursors stabilized by main-group element ligands*
 - ♦ 2022-26 : ANR PRC CLUSPOM-H₂, M. Haouas (IVSQ, Versailles) ; *Push-pull tandems based on metal CLUSters and PolyOxoMetalates for solar production of H₂*
 - ♦ 2024-27 : ANR EVERYONE, Y. Molard (ISCR, Rennes) ; *Emissive mechanoresponsive hybrid Poly(urethane)*
-

ENCADREMENT SCIENTIFIQUE

Thèses : 3 directions, 1 co-direction, 3 co-encadrements ; **Post-doctorats** : 5

RESPONSABILITÉS ADMINISTRATIVES ET COLLECTIVES

Locales : Université de Rennes (UR) – ISCR

- 2011-14 : Élu(e) au conseil de laboratoire, ISCR
- 2012-14 : Élu(e) au conseil d'administration, UR – comité stratégique environnement, santé, culture et solidarité, la section disciplinaire des usagers, commission des ressources humaines
- 2012-16 : Membre du groupe de travail animation scientifique et commission du personnel, ISCR

- 2016-21 : Membre du groupe de travail affaires internationales, ISCR
- 2014-.. : Membre élue du bureau du comité local d'actions sociales de Rennes du CAES
- 2020-.. : Ambassadrice ISCR développement durable et responsabilité sociétale, UR
- 2021-.. : Groupe de travail Environnement et Société, ISCR
- 2022-.. : Élu(e) au conseil de laboratoire, ISCR – correspondante développement durable auprès de la délégation régionale Bretagne Pays de Loire du CNRS
- 2022-.. : Référente HAL (HyperArticles en Ligne, plateforme en ligne développée du CNRS) pour l'équipe CTI auprès de la direction de l'ISCR

Nationales : SCF, IDRIS, CNRS

- 2004-06 : Vice-présidente section Bretagne - Pays de Loire SCF
- 2004-09 : Comité des utilisateurs de l'Institut du développement et des ressources en informatique scientifique du CNRS
- 2006-09 : Trésorière division de chimie de coordination de la SCF
- 2008 : Section "Chimie de coordination, interfaces et procédés" (14) du comité national
- 2013-16 : Représentante du pôle ouest au Réseau Français de Chimie Théorique (RFCT)
- 2015-19 : Secrétaire de la section Bretagne - Pays de Loire SCF
- 2019-22 : Membre du comité de pilotage du GDR 3333 RFCT et du projet de Fédération de Recherche CNRS – Théories, Modélisations et Simulations Atomistiques (ThéMoSiA)
- 2023-24 : Responsable scientifique « Théories, Modélisations et Simulations Atomistiques » (ThéMoSiA, GDR 2161)
- 2023-.. : Membre du bureau « Édifices Moléculaires Isolés et Environnés » (EMIE, GDR 3533)

COMMISSIONS – JURYS – EXPERTISE

- Membre expert du jury de recrutement d'un ingénieur de recherche, (2004, 2015, 2016)
- Membre de comités de sélection : 3 maîtres de conférences, 11 postes de professeur
- Experte pour l'agence nationale pour la recherche (ANR), 2010, 2012, 2013, 2016, 2021, 2024
- Experte internationale pour le FNRS et le FWO (Belgique) depuis 2013
- Experte internationale pour la Czech Science Foundation (2022)
- Membre d'un comité d'évaluation HCERES d'un laboratoire (2022)
- Membre du comité d'évaluation scientifique « Nano-objets et nanomatériaux fonctionnels, interfaces » à l'ANR (2022-2023)
- Experte internationale pour le « Research Grant Concil, Hong Kong » (2023)
- Experte scientifique de dossier de crédit d'impôt recherche (Direction générale de la recherche et de l'innovation Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche) (2024)
- Membre du comité thématique CT8 « Chimie quantique et modélisation moléculaire » au GENCI (Grand équipement national de calcul intensif) (depuis fev. 2024)
- 31 jurys de thèse et HDR - 1 HDR rapportrice, 11 thèses comme rapportrice
- Arbitrages journaux - <https://www.webofscience.com/wos/author/record/E-1366-2015>