

**Florent BOUCHER**

57 ans

Directeur de Recherche au CNRS,

Section CoNRS 17 – Chimie des matériaux, nanomatériaux et procédés

Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel (IMN)

UMR 6502 Université de Nantes / CNRS

Florent.Boucher@cnsr-imn.fr

ORCID ID: 0000-0001-5438-3930; ResearcherID: G-7408-2012



**MOTS CLES :** DFT, spectroscopy simulations, electronic band structure, material modelling, NMR, EELS, and XAS simulation

**PRINCIPALES RESPONSABILITES DE MANAGEMENT DE LA RECHERCHE**

- Directeur de l'Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel - Nantes (IMN) - UMR 6502 Univ. Nantes/CNRS (2017-2021) & (2022-2027).
- Directeur-adjoint de l'IMN (2015-2016)
- Directeur du Centre de Calcul Intensif des Pays de la Loire (2009-2016).

**RAYONNEMENT NATIONAL ET INTERNATIONAL**

- Membre de plus de 54 jurys de thèse et de 12 jurys d'HDR
- Co-organisation de 7 conférences internationales
- Co-organisation de 5 workshops internationaux et 1 tutorial CECAM
- CoNRS : Section 15, membre A élu (2021 – 2025)
- HCERES : membre du comité d'expertise d'un laboratoire vague C (2022)
- Labex Interactifs : membre du COS (2021 – 2024)
- Conseil Scientifique d'UMR : membre externe du CS de l'ICGM (2024)
- GDR REST Rencontres de Spectroscopies Théoriques : Membre du bureau (2014-2021)

**FORMATION PAR LA RECHERCHE ET ENSEIGNEMENTS**

- (Co)direction de 8 thèses soutenues
- Membre du COPIL de l'EUR 3MG
- Enseignements (jusqu'en 2021) : Symétrie et théorie de groupe, 1<sup>ère</sup> année ingénieur (24H eqTD/an)

**VALORISATION ET PARTENARIAT**

- CPER : porteur du projet PLASSMAT (2021-2027)
- LabCom DEFIER IMN/ARMOR : Co-directeur
- LabCom IMNBlueLab IMN/BlueSolutions : membre du COPIL

**PRODUCTION SCIENTIFIQUE**

- 101 publications
- 11 conférences invitées dans des congrès internationaux & 4 dans des congrès nationaux

**DISTINCTIONS**

- Société chimique de France : prix 2012 de la division chimie du solide

## ARTICLES REPRESENTATIFS

- Structure and Stability of Sodium Intercalated Phases in Olivine FePO<sub>4</sub>. Moreau, P.; Guyomard, D.; Gaubicher, J.; Boucher, F. *Chemistry of Materials* **2010**, 22, 275501.
- NMR parameters in alkali, alkaline earth and rare earth fluorides from first principle calculations. Sadoc, A.; Body, M.; Legein, C.; Biswal, M.; Fayon, F.; Rocquefelte, X.; Boucher, F. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, 13 (41), 18539–18550.
- Elucidation of the Na<sub>2/3</sub>FePO<sub>4</sub> and Li<sub>2/3</sub>FePO<sub>4</sub> Intermediate Superstructure Revealing a Pseudouniform Ordering in 2D. Boucher, F.; Gaubicher, J.; Cuisinier, M.; Guyomard, D.; Moreau, P. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136 (25), 9144–9157.
- Quantitative use of electron energy-loss spectroscopy Mo-M<sub>2,3</sub> edges for the study of molybdenum oxides. Lajaunie, L.; Boucher, F.; Dessapt, R.; Moreau, P. *Ultramicroscopy* **2015**, 149, 1–8.
- A hybrid method using the widely-used WIEN2k and VASP codes to calculate the complete set of XAS/EELS edges in a hundred-atoms system. Donval, G.; Moreau, P.; Danet, J.; Larbi, S. J.-S.; Bayle-Guillemaud, P.; Boucher, F. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2017**, 19 (2), 1320–1327.
- A Combined Experimental/Theoretical <sup>13</sup>C Solid State NMR Approach. Brette, F.; Kourati, D.; Paris, M.; Loupias, L.; Célérier, S.; Cabioch, T.; Deschamps, M.; Boucher, F.; Mauchamp, V. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, 145 (7), 4003–4014.
- XPS Binding Energy Shifts in 2D Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>z</sub> MXene Go Largely Beyond Intuitive Explanations: Rationalization from DFT Simulations and Experiments. Brette, F.; Célérier, S.; Canaff, C.; Loupias, L.; Paris, M.; Habrioux, A.; Boucher, F.; Mauchamp, V. *Small Methods* **2025**, 9 (1), 2400848.

## ACTIVITES SCIENTIFIQUES

De formation cristallographe du solide, j'ai intégré en 1994 l'Institut des Matériaux de Nantes dirigé par le Professeur Jean Rouxel et, dans la continuité de ma formation doctorale, mes activités de chargé de recherche se sont orientées vers des travaux traitant de cristallographie avancée des solides mettant en avant des problématiques d'anharmonicité pour décrire les désordres ou chemins de conduction ionique, de distributions de sites cationiques et de lois de maillage induites par les transitions de phase ordre/désordre ou de confrontation vision locale issues de la RMN et structure moyenne issue des rayons X. J'ai en parallèle travaillé dans le domaine « des super-espaces » pour adresser notamment des problèmes de résolution de structures pour des composés incommensurables ou « misfit ».

Ma recherche est restée centrée une petite dizaine d'années sur ces problématiques de cristallographie avancée avant de basculer vers la modélisation de la structure électronique des solides par les outils de la DFT. En effet, suite à une mise à disposition de 12 mois dans le laboratoire du Professeur Ole Krogh Andersen au MPI de Stuttgart, j'ai pu initier à mon retour une démarche de modélisation par les outils de la DFT et venir ainsi en soutien d'activités impliquant l'analyse de la liaison chimique : XAS, EELS, RMN, transfert redox, compétitions de bandes anioniques et cationiques. Cela nous a amenés à implanter, au fil du temps et en fonction de nos besoins, différents codes de calculs à l'IMN (LMTO, WIEN2k, VASP, CASTEP, ABINIT), tissant ainsi des liens privilégiés avec les développeurs et organisant au fil des années des workshops et congrès internationaux dédiés aux problématiques de modélisations dans les matériaux.

L'activité de recherche que je mène désormais au laboratoire se nourrit des acquis de ces deux grands domaines, couplant mon recul dans la capacité à analyser les structures complexes des matériaux au fait de pouvoir en modéliser leur structure électronique, et en déduire les réponses spectroscopiques (EELS, XAS, RMN) ou étudier la stabilité énergétique de configurations variées.