

## Sessions

### Session 1 : Transitions de phase et matériaux fonctionnels

**Organisateurs** : Françoise DAMAY (LLB, Saclay) et Mathieu MARCHIVIE (ICMCB, Bordeaux)

**Conférence invitée** : Ivo RIETVELD (Université Paris-Descartes).

**Description de la session** : Le phénomène de transition de phase touche une très large communauté scientifique, dans des domaines aussi variés que la physique du solide ou les études de molécules thérapeutiques. Ce type de transition est caractérisé par des modifications, parfois spectaculaires, des propriétés du matériau. L'étude de l'origine et de la nature de la transition ainsi que des paramètres qui l'influencent sont donc essentielles à la compréhension des propriétés fonctionnelles induites. L'objectif de cette session est de présenter divers exemples de matériaux moléculaires, hybrides ou inorganiques fonctionnels illustrant ce concept.

### Session 2 : Oxydes fonctionnels

**Organisateurs** : Brahim DKHIL (Paris) et Marie GUIGNARD (ICMCB, Bordeaux)

**Conférence invitée** : Nathalie VIART (IPCMS, Strasbourg)

**Description de la session** Les oxydes fonctionnels présentent des propriétés physiques (ferroélectricité, transition métal/isolant, magnétisme...) qui sont au cœur de nombreuses applications. Leurs propriétés sont intimement liées à la structure cristalline et ainsi qu'à la présence de défauts. Cette session sera consacrée aux dernières avancées réalisées dans le domaine de la caractérisation de ces oxydes à toutes les échelles en fonction des sollicitations externes. Nous discuterons aussi des récents développements, sur les lignes de lumière ou en laboratoire, pour la caractérisation in situ ou operando de ces oxydes.

### Session 3 : Nouvelles structures en biologie

**Organisateurs** : Yves BOURNE (AFMB, Marseille) et Brice KAUFFMANN (IECB, Bordeaux)

**Conférence invitée** : Pascal ARNOUX (BIAM CEA Cadarache)

**Description de la session** : Cette session a pour objectif d'illustrer les nouvelles structures ou nouveaux processus biologiques en privilégiant la description d'interfaces fonctionnelles et d'assemblages supramoléculaires. La combinaison d'approches de biophysique ou d'imagerie complémentaires et intégratives multi-échelle sera considérée sans oublier l'essor de la cryo microscopie électronique pour la détermination de l'architecture de tels édifices moléculaires à l'échelle atomique.

### Session 4: Croissance Cristalline :

**Organisateurs** : Thomas DEVIC (IMN, Nantes), Alexandra PENA (Institut Néel, Grenoble) et Claude SAUTER (IBMC, Strasbourg)

**Conférence invitée** : Anis JOUINI (CEA INES, Le Bourget-du-Lac)

**Description de la session** : Les cristaux massifs ont toujours été à la base de grands bouleversements scientifiques et technologiques. Ils jouent en effet un rôle clé dans la conception, la réalisation et l'utilisation de produits sur mesure dans les domaines de l'optique (lasers, scintillateurs, luminophores) et de l'électronique (semi-conducteurs, supraconducteurs), mais ont aussi un rôle fondamental dans divers domaines de la recherche académique (chimie, physique, biologie...)

Ces avancées scientifiques et technologiques n'ont souvent été possibles que par les progrès des méthodes de synthèse, des procédés de cristallogénèse et de la qualité des cristaux synthétiques obtenus. Ceci repose non seulement sur la maîtrise de savoir-faire mais surtout sur la compréhension fine des différents phénomènes physico-chimiques qui interviennent au cours du procédé de cristallisation. Cette session présente les progrès dans la croissance cristalline et les enjeux de cette thématique.

### Session 5 : Méthodes avancées

**Organisateurs** : Vincent JACQUES (LPS, Orsay) et Holger KLEIN (Institut Néel, Grenoble)

**Conférence invitée :** Claire LAULHE (SOLEIL, Gif-sur-Yvette)

**Description de la session :** Les nouveaux instruments et de nouvelles méthodes d'analyse ont permis de repousser les limites de la connaissance sur la structure et les propriétés de la matière. Les synchrotrons ou les lasers à électrons libres offrent des résolutions temporelles et spatiales jusqu'alors inaccessibles, ainsi que des expériences exploitant la cohérence des faisceaux. La cristallographie aux électrons permet maintenant non seulement la résolution, mais aussi l'affinement des structures. La cryomicroscopie (prix Nobel de chimie en 2017) atteint des résolutions inégalées dans la détermination des structures.

**Session 6 : Cristallographie sous conditions extrêmes**

**Organisateurs :** Frédéric DECREMPS (IMPMC, Paris) et Volodymyr SVITLYK (ESRF, Grenoble)

**Conférence invitée :** Julien HAINES (ICGM, Montpellier)

**Description de la session :** Les conditions extrêmes de température et de pression sont à l'origine de multiples phénomènes auxquels nous sommes quotidiennement confrontés. Par exemple, la température et la pression élevées (~ 5500 K et ~ 350 GPa) au centre de la Terre se traduisent par des propriétés compositionnelles et structurales très complexes de notre planète. D'un autre côté, les températures proches du zéro absolu sont largement utilisées pour des applications industrielles et scientifiques essentielles comme l'imagerie magnétique et l'accélération des particules. Cette session est destinée à couvrir un large éventail de sujets de la science des matériaux, la chimie, la physique, la géologie et les disciplines connexes où le comportement structural sous conditions extrêmes est un élément essentiel pour poursuivre les avancées théoriques et pratiques dans le domaine.

**Session 7 : Méthodes combinées en biologie structurale**

**Organisateurs :** Valérie LAMOUR (IGBMC, Strasbourg) et Sophie ZINN-JUSTIN (I2BC, Orsay)

**Conférence invitée :** Albert WEIXLBAUMER (IGBMC, Strasbourg)

**Description de la session :** Les développements des technologies de ces dernières décennies ont permis l'étude structurale de systèmes complexes tels que des machineries moléculaires, des assemblages comprenant des régions désordonnées. Ces systèmes ne peuvent souvent pas être étudiés par cristallographie uniquement, et l'utilisation d'une combinaison de méthodes de biologie structurale est devenue incontournable. Les évolutions récentes en cryo-microscopie électronique, ainsi que la microscopie super-résolution, ont révolutionné l'étude de macromolécules complexes et accéléré l'intégration avec des données issues des autres techniques. Cette session mettra l'accent sur les contributions croisées de ces technologies.

**Session 8 : Cristallographie et catalyse**

**Organisateurs :** Pierre DE FREMONT (LCC, Strasbourg) et Christèle LEGENS (IFPEN, Lyon)

**Conférence invitée :** Abderrahmane AMGOUNE (ICBMS, Lyon)

**Description de la session :** Donnant accès aux distances et angles de liaisons entre atomes constituant les cristaux, la cristallographie permet de relier activité et structure d'un catalyseur. C'est un outil extrêmement efficace dans le cadre de la catalyse asymétrique pour la détermination des configurations absolues d'énantiomères. L'émergence de sources rayon X et d'ordinateurs puissants a permis à la radiocristallographie de devenir une méthode standard d'analyse en catalyse, au même titre que la spectroscopie RMN avec l'avantage d'être utilisable in situ ou operando et en couplage avec des techniques vibrationnelles.

**Session 9 : Relations microstructure – propriétés**

**Organisateurs :** Alexandre BOULLE (SPCTS, Limoges) et Philippe DENIARD (IMN, Nantes)

**Conférence invitée :** Ingrid C. INFANTE (INL, Lyon)

**Description de la session :** Les propriétés théoriques des matériaux sont liées à leurs composition chimique et structure cristalline. Cependant, les écarts à la structure ou à la composition moyenne, communément désignés par le terme "microstructure" peuvent

profondément modifier, positivement ou négativement, leurs propriétés réelles. Qu'ils soient intentionnels (nanostructures, ingénierie des déformations...) ou subis (joints de grains, défauts structuraux...), la compréhension de ces effets nécessite une caractérisation fine de la microstructure des matériaux. À l'occasion du centenaire de la loi de Scherrer, cette session sera l'occasion de présenter les avancées récentes dans ce domaine.

#### **Session 10 : Biologie structurale de la membrane**

**Organisateurs :** Stéphane BRESANELLI (I2BC, Gif-sur-Yvette) et Isabelle BROUTIN (LCRB, Paris)

**Conférence invitée :** Petya KRASTEVA (I2BC, Gif-sur-Yvette)

**Description de la session :** La membrane, un élément biologique essentiel, définit à la fois la cellule et sa compartimentation en organelles. De cela résulte la nécessité de créer des voies de communication entre l'extérieur et l'intérieur de ces espaces clos (transport transmembranaire, sécrétion, signalisation...) ou d'être capable de modifier leur architecture (transport lipidique, fusion et réarrangement de membranes...). Dans cette session l'apport de la cristallographie, combinée à d'autres approches structurales (EM, SAXS, dynamique), permettra de montrer les dernières avancées dans la compréhension de ces processus biologiques.

#### **Session 11 : Chiralité**

**Organisateurs :** Elizabeth HILLARD (CRPP, Bordeaux) , Virginie SIMONET (Institut Néel, Grenoble) et Annabelle VARROT (CERMAV, Grenoble)

**Conférence invitée :** Jeanne CRASSOUS (Institut des Sciences Chimiques de Rennes)

**Description de la session :** La notion de chiralité, du grec χείρ: main, fut introduite par Lord Kelvin en 1904 et décrit un objet qui ne coïncide pas avec son image dans un miroir. Pasteur l'avait déjà identifié en 1848 à partir de l'observation de la morphologie des cristaux et de leur activité optique. La chiralité est une propriété très importante en chimie et en biologie, puisque que les molécules du vivant sont homochirales, mais également en matière condensée (cristaux liquides, graphène, magnétisme). La session proposée vise à réunir des disciplines où la propriété de chiralité cristallographique est essentielle.

#### **Session 12 : Environnement, Sciences de la Terre et Matériaux du Patrimoine**

**Organisateurs :** Géraldine SARRET (ISTER, Grenoble) et Philippe SCIAU (CEMES, Toulouse)

**Conférence invitée :** Catherine DEJOIE (ESRF, Grenoble)

**Description de la session :** L'étude des minéraux dans les échantillons naturels et les matériaux du patrimoine nécessite des sondes micro/nanométriques sensibles à un éventail de propriétés physico-chimiques, et adaptées à leurs hétérogénéités. Ces dernières années ont vu le développement de techniques d'analyse et d'imagerie, au laboratoire et sur grands instruments (analyse 3D, gains en résolution/sensibilité, études in situ, sensibilité isotopique...), ainsi que des progrès dans le conditionnement et la préservation des échantillons. Cette session vise à rassembler des communications dans les domaines des Sciences de la Terre et de l'Environnement, de l'archéométrie et de la conservation des biens culturels présentant des applications de ces développements analytiques.

#### **Session 13 : Ordre, désordre, apériodicité**

**Organisateurs :** Pierre FERTEY (SOLEIL, Gif-sur-Yvette) et Sébastien PILLET (IJB, Nancy)

**Conférence invitée :** Bertrand TOUDIC (ISC, Univ. Rennes 1)

**Description de la session :** Bien que la symétrie joue un rôle fondamental dans les propriétés de la matière condensée, c'est bien souvent l'écart à la perfection cristalline, l'introduction maîtrisée de désordre ou de défauts qui génère une complexité intéressante pour la conception de nouveaux matériaux. Cette session sera centrée sur la caractérisation structurale de matériaux désordonnés, cristallins modulés, ou apériodiques par techniques de diffraction/diffusion des rayons X, des neutrons ou des électrons en lien avec leurs propriétés. Les aspects instrumentaux et méthodologiques seront abordés.

**Session 14 : Cibles thérapeutiques**

**Organisateurs :** William BOURGUET (CBS, Montpellier) et Patrice GOUET (MMSB, Lyon)

**Conférence invitée :** Xavier MORELLI (2P2I, Marseille)

**Description de la session :** Cette session s'adresse à l'étude et la caractérisation des cibles thérapeutiques par cristallographie aux rayons X. Un focus tout particulier sera mis sur les approches multi-structurales permettant de guider le développement rationnel de nouveaux médicaments.

**Session 15 : Meet the Industry**

**Organisateurs :** Vittoria PISCHEDDA (ILM, Lyon), Jean-Marc MILLET (IRCELYON, Lyon), Vincent CHAPTAL (MMSB, Lyon), Anass JAWHAR I (Calixar) et Kheirreddine LEBBOU (ILM, Lyon)

**Conférenciers :** Patricia JEANDEL (Cristal'Inov), Christelle LEGENS (IFPEN), Magali MATTHIEU (SANOFI)

**Description de la session :** L'objectif de cette session est de présenter les métiers de la recherche industrielle en rapport avec la cristallographie. La session se déroulera en deux parties : une session commune de 1h où un industriel de chaque spécialité (biologie, chimie, physique) présentera son métier ; 15 minutes chacun. Cette session commune permet à toutes les disciplines de savoir ce qu'il se passe dans les disciplines cousines. Une session « table ronde », séparée, où un ou plusieurs industriels invités viennent parler de leur métier, sous la forme de question/réponse avec l'auditoire.

**Session 16 : Grands Instruments**

**Organisateurs :** Nathalie BOUDET (ESRF, Grenoble), Marie-Hélène LEMEE-CAILLEAU (ILL, Grenoble) et William SHEPARD (SOLEIL, Gif-sur-Yvette)

**Conférence invitée :** Jean SUSINI (ESRF, Grenoble)

**Description de la session :** La session présente des développements récents au niveau des grands instruments, free électron lasers, sources synchrotron et neutroniques. On abordera des thématiques d'instrumentation qui soulignent des nouvelles ouvertures pour la science - allant des matériaux pour l'énergie jusqu'aux relations structure-fonction des protéines.

**Session 17 : Chimie supramoléculaire et chimie de coordination**

**Organisateurs :** Aude DEMESSENCE (IRCELYON, Lyon) et Isabelle GAUTIER-LUNEAU (Institut Néel, Grenoble)

**Conférence invitée :** Stéphane BAUDRON (ILB, Strasbourg)

**Description de la session :** De par la versatilité des combinaisons métal-ligand et/ou des interactions mises en jeu en chimie supramoléculaire et chimie de coordination, les complexes moléculaires ou réseaux étendus présentent des propriétés aussi diverses que la photoluminescence, le magnétisme, l'adsorption, la conductivité ... Ces propriétés peuvent par ailleurs être modulées par des changements de structures sous divers stimuli externes. Cette session montrera l'importance de la cristallographie pour comprendre les relations structures-propriétés impliquées dans ces matériaux hybrides.

**Session 18 : Cristaux à basse dimensionnalité et nano-objets**

**Organisateurs :** Pascal ANDREAZZA (ICMN, Orléans) et Marie-Ingrid RICHARD (ESRF & IM2NP, Marseille)

**Conférence invitée :** Magali BENOIT (CEMES, Toulouse)

**Description de la session :** En matière condensée, la réduction de la dimensionnalité et de la taille introduit des changements de comportements structuraux et thermodynamiques induits par des effets de surface, d'interface ou de quantité finie de matière. L'arrangement des atomes peut s'éloigner fortement de l'état cristallin, allant vers des états de déformations ou d'ordres exotiques: les nano-objets métalliques prendre des structures icosaédriques, les nanoalliages des états de ségrégation cœur-coquille ou biphasés et les oxydes, des structures nouvelles pas toujours à l'équilibre. Une nanocristallographie.

**Session 19 : Biologie structurale de l'infection**

**Organisateurs :** Olivera FRANCTIC (Inst. Pasteur, Paris) et Vincent VILLERET (IRI, Lille)

**Conférence invitée :** Han REMAUT (VIB VUB, Bruxelles)

**Description de la session :** Cette session portera sur la structure, la dynamique et les fonctions moléculaires des facteurs de virulence chez les microorganismes pathogènes, mais aussi sur leur régulation et les processus de signalisation. Souvent situés à la surface des microorganismes, ces facteurs forment des complexes macromoléculaires, structures adhésives, systèmes de sécrétion ou toxines. Les études de ces nano-machines sophistiquées vont de pair avec des avancées technologiques et des approches intégratives développées durant ces dernières années visant à comprendre leur biogenèse, dynamique et fonctions moléculaires.