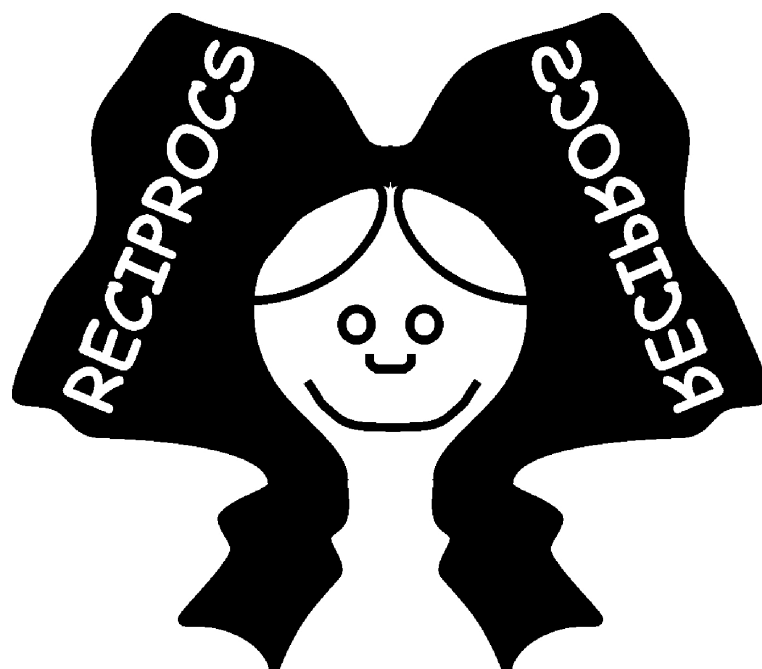


**COMPTE RENDU**

Réunion de RECIPROCS satellite au colloque de l'AFC 2010

6 juillet 2010

**STRASBOURG**



**STRASBOURG**  
**satellite AFC 2010**

## Sommaire

<b>I. Compte-rendu général</b>	<b>P. 2</b>
<b>II. Communication</b>	<b>P. 3</b>
<b>III. Bases de données internes</b>	<b>P. 3</b>
<b>IV. Programme de gestion des ressources scientifiques</b>	<b>P. 3</b>
<b>V. Réglementation RX et ASN</b>	<b>P. 4</b>
<b>VI. Détermination par diffraction des RX sur poudres</b>	<b>P. 5</b>
<b>VII. Diffractomètres « mono-cristal » : sources et optiques</b>	<b>P. 5</b>
<b>VIII. Biocristallographie</b>	<b>P. 6</b>
<b>IX. Logo/Web/Organisation</b>	<b>P. 6</b>
<b>X. Remerciements</b>	<b>P. 7</b>
<b>Programme</b>	<b>P. 8</b>
<b>Liste des participants</b>	<b>P. 9</b>

## I. Compte-rendu général

Le 6 Juillet, à l'Université de Strasbourg, s'est tenue la première réunion du réseau **RECIPROCS** hors ANGD. Cette réunion, placée en satellite du colloque de l'AFC (AFC2010, 7 - 10 Juillet Strasbourg) avait été imaginée afin de favoriser les synergies entre **RECIPROCS** et sa société savante : l'AFC, et de réduire les coûts imputés aux membres de **RECIPROCS** en regroupant les déplacements pour le colloque et pour la réunion.

Cette réunion a regroupé 26 cristallographes structuralistes et 4 à 6 représentants des fabricants d'appareils de diffractions (cf. liste des participants jointe). Le relativement faible succès de cette édition du colloque de l'AFC (les cristallographes français se sont moins déplacés que pour la version 2008 à Rennes) fournit une explication à la participation moyenne lors de cette réunion satellite. Cette participation est toutefois en très légère progression par rapport à la deuxième session de l'ANGD 2009. Le nombre d'adhérents de **RECIPROCS** est de 73 au moment de la rédaction de ce compte-rendu ; la mobilisation est donc tout de même de 36% des effectifs et de plus du quart de la population susceptible d'être intéressée (toujours estimée à une centaine). Notons que tous les groupes de travail étaient représentés et avec des participants différents de ceux qui étaient présents à l'ANGD de Tours. C'est ce "turn-over" qui est instructif, car il montre que malgré les contraintes des adhérents (temporelles et souvent financières), l'intérêt pour le réseau ne faiblit pas.

Cette réunion un an après la première session de l'ANGD 2009 était l'occasion de faire le point dans différents domaines relevant des groupes de travail et d'aborder quelques sujets qui avaient été demandés explicitement par les adhérents. Elle avait aussi pour but d'entretenir l'élan du réseau et de garder mobilisés les groupes de travail. De ce point de vue, nous constatons que la périodicité optimale est plus près de 6 mois que d'un an et que par ailleurs les 3 groupes qui fonctionnent le mieux sont ceux qui sont axés sur le cœur de métier, là où les personnes impliquées sont les plus nombreuses. Dans le fonctionnement, il est intéressant de noter que les groupes à compétences "larges" (c'est-à-dire Réglementation et Instrumentation) ont préféré fonctionner sous forme de tables rondes alors que les groupes de "spécialités" (c'est-à-dire Résolution structurale, Gestion, Bases de données) ont demandé ou préféré faire des interventions magistrales ciblées. Ainsi lors de la deuxième session de l'ANGD 2009, les participants avaient demandé (en plus de la formation en communication qui a été prise en compte par la réalisation de l'ANGD 2010) à avoir des interventions sur la résolution structurale sur poudre, la création et la gestion de bases de données cristallographiques internes et l'instrumentation. Ces demandes ont donc été prises en comptes dans le programme.

Malgré quelques soucis liés à l'informatique et, l'impossibilité pour un des intervenants de pouvoir faire sa présentation, le programme annoncé a été tenu avec quelques adaptations sur les horaires. Notons toutefois que la discussion sur le site web a été reportée.

Comme lors des réunions précédentes, les notes prises au cours des interventions ainsi que les présentations mises en ligne par Thierry Roisnel (Rennes) sous forme de fichier PDF permettront aux membres de **RECIPROCS** présents ou malheureusement absents de bénéficier des travaux de cette journée.

Après nous être doté d'un logo, cette journée s'est conclue par une discussion sur les perspectives de rattachement à l'INC et les perspectives pour 2011.

## II. Communication

Philippe Bénas a présenté les activités du groupe de travail « Communication ».

La fiche permettant de cartographier les compétences a été remaniée et sera envoyée mi-juillet pour un retour début septembre.

Retour sur le GTBio de Décembre 2009 au cours duquel Philippe Bénas a présenté le réseau.

Compte-rendu de l'ANGD « Communication stratégique » qui a eu lieu à Tours les 1 et 2 juin 2010.

Remarque : à terme, il faudrait prendre contact avec les deux réseaux de croissance cristalline CMDO<sup>+</sup> et CRISTECH.

## III. Bases de données internes

Corinne Bailly a effectué une présentation sur les bases de données internes, disponible sur le site internet. Sur le site, on trouvera également la présentation complémentaire de Brice Kauffmann qu'il n'a malheureusement pu présenter en direct à l'auditoire.

Cette intervention a entraîné plusieurs remarques ou questions :

- La CSD est disponible sur DVD-rom : licence monoposte. La licence supplémentaire coûte 100 €.

- La base de données interne peut-elle être accessible depuis un autre laboratoire ? Non, ou du moins pas facilement car cela pose des problèmes d'autorisation d'accès.

- Pour les molécules inorganiques, la base ICSD permet-elle de créer sa propre base de données ? A priori non.

- Est-il possible d'insérer un CIF d'une molécule inorganique à la base de données interne de la CSD ? Oui : un CIF est un CIF.

## IV. Programme de gestion des ressources scientifiques

Arie Van der Lee a présenté « La gestion numérisée d'un service scientifique ». Sa présentation s'est déroulée en deux temps : une présentation générale le mardi 6 juillet 2010 dans le cadre de la réunion de **RECIPROCS** et une démonstration du logiciel « Progmanager » le jeudi 8 juillet en annexe du colloque de l'AFC (démonstration réservée aux membres de **RECIPROCS**).

Ce logiciel créé par Arie Van der Lee est un outil formidable pour un service de cristallographie ou pour la gestion d'une ANR. C'est en effet, un outil souple et pragmatique ; il fonctionne comme un cahier de laboratoire informatisé, il permet la facturation horaire (notamment, la comptabilisation du temps d'utilisation de logiciel), la sortie de facture, de compte-rendu de radioprotection, de maintenance, *etc.* Il permet à tout moment d'avoir une démarche qualité. Qui plus est, il peut être utilisé par n'importe quel service scientifique. Il a été mis en place à l'Institut Européen des Membranes à Montpellier dans les services de Rayons X, RMN, MEB et Diffusion de lumière. Il fonctionne actuellement uniquement sous Windows, mais il est prévu de l'adapter pour Linux. Il sera distribué gratuitement par Arie Van der Lee dès que la déclaration auprès du CNRS aura été effectuée.

## V. Réglementation RX et ASN

Le groupe de travail « Réglementation » a choisi de présenter une intervention en interaction avec l'auditoire sur le thème « Radioprotection-Réglementation ».

Le groupe de travail avait souhaité faire l'inventaire de la situation des laboratoires vis-à-vis de l'ASN. Ils avaient donc envoyé courant mars à tous les membres de **RECIPROCS** un fichier Excel à remplir. Sur les 13 retours, la majorité des dossiers d'autorisation/déclaration des appareils de générateurs X était en cours d'instruction ou avaient reçu l'autorisation. Seuls deux laboratoires n'avaient pas encore commencé la procédure. Il ressort également de cette étude que jusqu'à ces derniers mois, il fallait plusieurs années pour obtenir l'autorisation et que cela dépendait beaucoup de la région où était transmise la demande. On notera aussi que la plupart des diffractomètres sont équipés d'enceintes protégeant les diffractomètres aux normes et que le système de dosimétrie varie selon les laboratoires (dosimétrie d'ambiance et /ou individuelle).

Il existe 3 régimes concernant les générateurs X : l'exemption, la déclaration et l'autorisation.

L'autorisation est valable 5 ans. Jusqu'à présent l'ASN souhaitait n'avoir qu'un dossier unique au niveau de l'établissement. Cela impliquait que les laboratoires détenant également des sources non-scellées étaient obligés de suivre la procédure d'autorisation. Cependant Caen et Toulouse ont pu établir des dossiers différents et donc remplir « simplement » le dossier de déclaration pour les générateurs X. **Une nouveauté** : les diffractomètres travaillant à plus de 30 kV et présentant des débits de dose  $< 1 \mu\text{Sv/h}$  à 10 cm en tout point de la surface accessible ne sont plus maintenant soumis à autorisation mais seulement à déclaration (dossier /2 environ, mais mêmes astreintes). Les diffractomètres présentant les mêmes caractéristiques mais travaillant sous une tension  $< 30\text{kV}$  (cas des diffractomètres de paillasse) sont eux exemptés de toutes formalités, comme c'était déjà le cas.

Pour information, Pierre-Emmanuel Petit peut envoyer aux personnes intéressées le fichier d'autorisation au format Word (sur le site de l'ASN, le fichier est au format pdf).

Intervention des constructeurs présents :

Elexience : la norme NF 15-160 est garantie pour tous leurs appareils. Les anciens appareils ne possèdent pas la norme NF 74-100.

Panalitical : leurs nouveaux appareils sont à la norme NF 74-100

Inel : Tous les appareils construits après 1998 sont à la norme NF 74-100. Pour les appareils plus anciens, la norme NF 74-100 n'est pas garantie automatiquement. Ils peuvent cependant brider les anciens générateurs afin que le débit de dose à 10 cm des surfaces accessibles soit inférieur à  $1 \mu\text{Sv/h}$  et que la tension maximale soit de 30 kV.

Bruker : Pour les anciens appareils ou les appareils d'occasion, la certification se fait au cas par cas. Si tous les documents ne sont pas présents, leur Service Après Vente, vérifie les sécurités et délivre des certificats comme quoi l'appareil est conforme à la fabrication (Elexience effectue également la même chose).

Concernant les diffractomètres hybrides (diffractomètres possédant des éléments provenant de différents constructeurs), il faut veiller à la visite d'un organisme certifié qui atteste que l'appareil est conforme à la norme NF 15-160.

Remarque : La Société Française de Radioprotection (SFRP) regroupe l'ensemble des personnes concernées par la radioprotection (cristallographes, vétérinaires, EDF, ...). Certains de ses colloques peuvent être intéressants. En octobre aura lieu par exemple une journée des personnes

compétentes en radioprotection.

Il existe également un réseau Grand Ouest des personnes compétentes en radioprotection de tout domaine (médecins, radiologues, cristallographes, ...).

## **VI. Détermination par diffraction des RX sur poudres**

Thierry Bataille a choisi de présenter la détermination par diffraction des RX sur poudre en faisant le comparatif avec les monocristaux. Il a complété sa présentation par la résolution structurale (en direct) de l'acide sulfamide avec le logiciel WinPlotR (développé par Thierry Roisnel).

## **VII. Diffractomètres « mono-cristal » : sources et optiques**

Le groupe « Instrumentation » a choisi une intervention interactive sur « Diffractomètre mono-cristal : sources et optiques ».

En ce qui concerne les optiques, les caractéristiques suivantes peuvent être notées :

### Collimateur à fibre optique :

Gain de 1.5 à 2 au niveau de l'échantillon pour les petits cristaux

Faisceau plus homogène

Observation de plus de réflexions

Réglage du collimateur très fin et donc assez difficile. Il faut commencer le réglage par un gros collimateur puis un petit avant de passer à la fibre optique.

Collimateur adapté au Kappa

### Monochromateur TRIUMPH : monochromateur à cristal courbe

Gain en intensité : x2 ou x3

### VariMax

En ce qui concerne les sources :

### Microsources

Les microsources peuvent être utilisées pour des cristaux ayant une taille inférieure à 150  $\mu\text{m}$ .

Elles existent à différentes longueurs d'onde : celles de l'Ag, Mo, Cu, ...

Simplicité d'environnement : peu de refroidissement, coût de maintenance très inférieure à celui des anodes tournantes.

### Générateurs à anodes tournantes :

- Flux plus important par rapport à une microsource.
- La taille du faisceau est plus importante et donc leur utilisation est plus polyvalente.
- De nouveaux générateurs à anode tournante sont développés actuellement.

Coût de la maintenance : environ 8000€/an

Avantage : 2 sorties identiques indépendantes permettant d'avoir 2 installations en parallèle

Anodes à jet de métal liquide (gallium ou alliage Ga/In/Sn) :

Brillance : potentiel supérieur à x100

Coût de l'ordre de : 500000 €

A prévoir pour une prochaine session : intervention des constructeurs sur leurs appareils de pointes pour les petites molécules ou les poudres.

## VIII. Biocristallographie

Deux questions ont été entre autres abordées :

Est-ce utile de créer un nouveau groupe de travail « Biocristallographie » ?

Réponse : Non, les groupes de travail existant couvrant l'ensemble des domaines.

Comment être alors attractif pour les biocristallographes ?

Réponse : Ne pas être fermé, être à l'écoute et si des besoins spécifiques se font sentir, y répondre.

A prévoir pour une prochaine session : présentation des différentes techniques utilisées par les biocristallographes.

## IX. Logo/Web/Organisation

### Logo

Afin de trouver un logo pour **RECIPROCS**, un appel à proposition avait été lancé auprès des adhérents courant mars 2010. Neuf propositions ont été proposées et présentées lors de cette journée. Avec une majorité de 21 personnes sur 26 personnes présentes, le logo ci-dessous a été adopté :



Le logo étant en noir et blanc, un nouvel appel aux adhérents sera lancé via la liste de diffusion afin de proposer une version en couleur.

## Web

Le sujet pour finir, n'a pas été abordé car il dépend de différents facteurs dont le degré d'avancement n'était pas suffisant pour avoir une discussion utile.

## Organisation

### Actions pour 2011

1 ANGD sur 2-3 jours

Thèmes proposés :

Glossaire illustré en biocristallographie

Différentes techniques utilisées par les biocristallographes (MAD, etc...)

Théorie des groupes

Physique du solide, transition de phase, structure de phases magnétiques

Restitution de la moitié des groupes de travail

Formations plus techniques : utilisation de Jana 2006 : b.a.-ba avec une démonstration pas à pas

Perfectionnement : aborder sur une 1/2 journée un point de détail au niveau théorique

Intervention des constructeurs sur leurs appareils de pointes pour les petites molécules ou les poudres

Concernant les formations, il en existe déjà plusieurs. **RECIPROCS** ne souhaite pas concurrencer les offres existantes.

Nantes propose des formations sur poudre :

Formation de base en Septembre (il faut s'y prendre un an avant car la formation est très demandée)

Formation plus avancée tous les 2 ans

L'AFC organise une école thématique tous les 3-4 ans.

Formation à l'ILL d'une semaine : Full Prof Suite

### Dossier de rattachement officiel par l'INC

Le dossier actuel doit être mis à jour notamment avec le rajout des spécificités (méthodologies, thématiques) des membres de **RECIPROCS**. Ces derniers fourniront ces renseignements importants via la fiche Excel qui leur sera diffusée.

Ces compétences constituent un des points forts du dossier de demande de rattachement.

## X. Remerciements

Les organisateurs remercient chaleureusement l'Université de Strasbourg et notre sponsor : BRUKER AXS.

Les organisateurs remercient également toutes les personnes qui ont permis cette réunion à Strasbourg avec une mention toute spéciale pour Lydia BreLOT.

Enfin, MERCI à tous les membres de **RECIPROCS** qui ont participé à cette journée, permettant au réseau de passer encore une nouvelle étape.



## **RECIPROCS : 6 Juillet 2010, STRASBOURG**

### **Réunion Satellite du colloque de l'AFC**

"Salle verte", rdc Tour de Chimie, 1 rue Blaise Pascal

### **PROGRAMME PREVISIONNEL DE LA JOURNEE**

#### **Matin**

- 09h45 – 10h30 Accueil
- 10h30 – 10h45 Introduction bilan
- 10h45 – 11h15 Communication – Bilan Tours (P. Bénas)
- 11h15 – 12h00 Bases de données internes (C. Bailly, B. Kauffmann)

#### **Après-midi**

- 14h00 – 14h45 Programme de gestion des ressources scientifiques (A. Van Der Lee)
- 14h45 – 15h45 Réglementation RX et ASN (groupe de travail Réglementation)
- 15h45 – 16h45 Détermination par diffraction des RX sur poudres (T. Bataille)

#### **Pause**

- 17h15 – 18h00 Diffractomètres « mono cristal » : sources et optiques (groupe de travail instrumentation)
- 18h00 – 18h45 Biocristallographie (P. Retailleau, P. Bénas, B. Kauffmann)
- 18h45 – 19h30 Logo / Web / Organisation

## Liste des participants à la réunion RECIPROCS du 6 Juillet 2010

<b>AUDEBRAND Nathalie</b>	Sciences Chimiques de Rennes, RENNES
<b>BAILLY Corinne</b>	DCM, GRENOBLE
<b>BARRIER Nicolas</b>	CRISMAT, CAEN
<b>BATAILLE Thierry</b>	Sciences Chimiques de Rennes, RENNES
<b>BENAS Philippe</b>	Laboratoire de cristallographie et RMN biologiques, PARIS
<b>BERTHIER Eric</b>	INEL
<b>BRELOT Lydia</b>	Institut de Chimie de Strasbourg, STRASBOURG
<b>DARAN Jean-Claude</b>	Laboratoire de Chimie de Coordination, TOULOUSE
<b>DUHAYON Carine</b>	Laboratoire de Chimie de Coordination, TOULOUSE
<b>FAUVET Gérard</b>	BRUKER AXS
<b>GIORGI Michel</b>	Fédération des Sciences Chimiques de Marseille, MARSEILLE
<b>GUILLIN Jacques</b>	BRUKER AXS
<b>KAUFFMANN Brice</b>	IECB, PESSAC
<b>LADEIRA Sonia</b>	SFTCM, TOULOUSE
<b>MARCHIVIE Mathieu</b>	Laboratoire de Chimie Physique et Minérale, BORDEAUX
<b>MASSIP Stéphane</b>	Laboratoire de Chimie Physique et Minérale, BORDEAUX
<b>PEREZ Olivier</b>	CRISMAT, CAEN
<b>PEREZ Philippe</b>	ELEXIENCE
<b>PETIT Pierre-Emmanuel</b>	Institut des matériaux Jean Rouxel, NANTES
<b>PHILOUZE Christian</b>	DCM, GRENOBLE
<b>PORCHER Florence</b>	LLB, GIF SUR YVETTE
<b>POTEL Michel</b>	Sciences Chimiques de Rennes, RENNES
<b>RETAILLEAU Pascal</b>	ICSN, GIF SUR YVETTE
<b>ROISNEL Thierry</b>	Sciences Chimiques de Rennes, RENNES
<b>ROUSSEL Pascal</b>	UCCS, VILLENEUVE D'ASCQ

---

<b>SAFFON Nathalie</b>	Structure Fédérative Toulousaine en Chimie Moléculaire, TOULOUSE
<b>SELKTI Mohamed</b>	Laboratoire de cristallographie et de RMN biologiques, PARIS
<b>VAN DER LEE Arie</b>	Institut Européen des Membranes, MONTPELLIER
<b>VENDIER Laure</b>	Laboratoire de Chimie de Coordination, TOULOUSE
<b>WENGER Emmanuel</b>	CRM2, VANDOEUVRE LES NANCY

---