Délégation Centre-Poitou-Charentes

INSTITUT DE CHIMIE

RECIPROCS en 2009

COMPTE RENDU

ANGD : RECIPROCS : "Une évolution du métier de Cristallographe Structuraliste"

1ère Session 6 & 7 juillet 2009

2ème Session 12 & 13 novembre 2009

PARIS

Sommaire

Remerciements **P. III**

1ère Session : Mise en place des Groupes de Travail

I. Compte-rendu général **P. 1**

II. Table ronde Réglementation **P. 2**

III. Table ronde Gestion **P. 3**

IV. Table ronde Instrumentation **P. 5**

V. Table ronde Résolution Structurale **P. 7**

VI. Table ronde Méthodes de pointes **P. 8**

VII. Table ronde Formation **P. 9**

VIII. Table ronde Service et Recherche **P. 10**

IX. Intervention de Monsieur Jean-François Baumard **P. 11**

X. Constitution des groupes de travails **P. 12**

XI. Bilan de l'évaluation et conclusion **P. 13**

Bilan des Questionnaires **P. 14**

Programme **P. 18**

Liste des participants **P. 19**

2ème Session : Rapport des Groupes de Travail et structuration

I. Compte-rendu général **P. 22**

II. Table ronde Bases de Données **P. 24**

III. Gestion **P. 26**

IV. Réglementation **P. 27**

V. Résolution Structurale **P. 28**

VI. Méthodes de pointes **P. 28**

VII. Formation **P. 29**

VIII. Instrumentation / Service et Recherche **P. 31**

IX. Table ronde Méthodes de Travail **P. 32**

X. Table ronde Informatique appliquée à la Cristallographie Structurale **P. 34**

XI. Table ronde Communication **P. 36**

XII. Table ronde Organisation d'évènements **P. 37**

XIII. Table ronde Site Web **P. 37**

XIV. Organisation **P. 38**

XV. Bilan de l'évaluation et conclusion **P. 40**

Groupes de Travail actualisés **P. 41**

Bilan des Questionnaires **P. 42**

Programme **P. 45**

Liste des participants **P. 46**

Remerciements

Les organisateurs remercient chaleureusement :

Le SFIP du CNRS pour son support financier.

Madame Gilberte CHAMBAUD, Directrice Scientifique de l'Institut de Chimie, qui a approuvé cette ANGD.

Monsieur Jean-François BAUMARD, Directeur Scientifique Adjoint de l'Institut de Chimie, pour le temps précieux qu'il a consacré à ce projet et son soutien constant.

Madame Marie-Pierre FONTAINE-AUPART, Chargée de Mission Formation de l'Institut de Chimie, qui a reçu le projet et su intervenir judicieusement pour pallier notre inexpérience.

Monsieur Serge PEREZ, Directeur des Expériences de l'ESRF, sans qui rien n'aurait été possible.

Monsieur Christophe CARTIER Dit MOULIN, Chargé de Mission Communication de l'Institut de Chimie, pour son aide depuis le début du projet.

Madame Jeanine DAUBIN, Responsable Formation de la délégation Centre-Poitou-Charentes pour son investissement, sa compétence, son efficacité et son dynamisme remarquables pour apporter tout le soutien nécessaire à cette ANGD.

Le service Formation Permanente de la Délégation Alpes pour son expertise pour créer le dossier de l'ANGD.

Les sociétés Bruker AXS et Elexience pour leurs généreuses contributions à ces journées.

Le service Communication de la Délégation Alpes pour sa dotation en matériel de congrès.

Tous les intervenants dont la qualité des prestations a fait le succès de cet événement.

Tous les participants sans qui le projet de réseau n'aurait pas de sens.

1ère Session

I. Compte-rendu général

Les 6 et 7 Juillet 2009 aux CISP à Paris, s'est tenue la première session de l'ANGD : "RECIPROCS : Une évolution du métier de Cristallographe Structuraliste". Cette action a eu le privilège de bénéficier d'une intervention de Monsieur Jean-François Baumard, Directeur Scientifique Adjoint de l'Institut de Chimie du CNRS.

Cette action a regroupé 54 personnes dont 48 Cristallographes Structuralistes (cf. liste des participants jointe). Ceci constitue un beau succès puisque les premiers adhérents du projet RECIPROCS n'étaient que 42 et qu'une petite dizaine d'entre eux n'avaient malheureusement pas pu se rendre disponibles pour cette première réunion. De fait, le projet RECIPROCS regroupe, suite à cette ANGD, 65 Cristallographes Structuralistes, ce qui rapporté au nombre estimé au niveau national (une centaine) est considérable.

Le but de cette action était de poser les bases d'un réseau professionnel reconnu par le CNRS. Dans ce dessein, le programme joint en annexe proposait après un état de l'art fait par divers intervenants sur différents thèmes, des tables rondes sur les principaux aspects du métier de Cristallographe Structuraliste pour faire émerger des groupes de travail et leurs axes d'activité préférentiels. D'après l'évaluation ci-jointe, ces tables rondes ont été très appréciées même si la programmation de sessions parallèles a engendré une certaine frustration car les différents aspects du métier n'étaient donc pas accessibles à tous. Cette organisation était néanmoins volontaire : elle répondait à une contrainte de temps et devait faciliter l'émergence des groupes de travail. Pour les futurs évènements, ce type de sessions parallèles sera abandonné pour permettre à tous de bénéficier du travail réalisé dans chacun des ateliers. Le programme proposé a été globalement respecté dans son déroulement malgré des débordements horaires répétés. En effet, le programme était volontairement dense avec des interventions très courtes : 15 minutes pour permettre un tour d'horizon, non pas complet, mais raisonnable de notre profession. En dépit des louables efforts des présidents de sessions et de l'esprit de convivialité qui a régné tout au long de ces deux journées, ces dépassements ont donné quelques sueurs froides aux organisateurs au niveau du programme. Toutefois l'abandon de l'intervention sur la recherche faute d'intervenant et celui de la table ronde "bases de données" à cause d'une concurrence trop forte de la table ronde "services et recherche" auront permis de boucler le programme dans les temps. Ces considérations seront utiles pour les fois prochaines.

Les interventions très pointues et d'excellente qualité des intervenants ont éveillé l'intérêt des participants et suscité de nombreux échanges. Ceci a permis de démarrer très rapidement ensuite les tables rondes. Les fichiers PDF de la majorité des interventions ont pu être mis en ligne pour les participants par Thierry ROISNEL (Rennes) 3 semaines après l'ANGD.

Les idées émises au cours de ces tables rondes ont été retranscrites de façon synthétique et à la volée dans le document qui suit dans le but surtout de souligner la densité des points de discussion soulevés et l'animation qui s'est spontanément créée autour. Le ressenti de tous est que la réalisation de ces ateliers était d'une grande nécessité pour la communauté et aura un impact dans la recherche.

L'appel aux volontaires pour structurer, animer et pérenniser les ateliers devait initialement se faire après chaque table ronde. Ceci a été modifié par les participants qui préféraient prendre le temps de la réflexion après avoir assisté à l'ensemble des sessions. Leurs souhaits ont donc été pris en compte par les organisateurs et c'est donc à partir de fiches d'évaluations remplies à la fin de la réunion que les ateliers vont démarrer avec comme objectif principal de travailler sur les axes de travail évoqués dans les tables rondes (cf. Constitution des Groupes de travail).

II. Table ronde Réglementation

La réglementation en matière de radioprotection est complexe car en permanente évolution, elle est difficilement applicable par les constructeurs eux-mêmes et très contraignante (déclaration des installations auprès de l'Agence de Sûreté Nucléaire, mise en conformité, dosimétrie, *etc*.).

Informations générales :

Sites "internet" où trouver des informations :

- ASN : formulaires à remplir pour la déclaration d'utilisation des diffractomètres.
- ATSR (Association pour les Techniques et les Sciences de la Radioprotection) : forum en ligne, bilan de la réglementation avec commentaires, site tenu à jour régulièrement.
- IRSN.

En cas de problème réglementaire ne pas hésiter à appeler l'ASN. Si c'est pour des conseils, appeler plutôt l'IRSN.

Il serait souhaitable que des personnes influentes de l'AFC notamment, deviennent membres des commissions afin de faire remonter auprès de l'ASN, les attentes des cristallographes.

Concernant la réforme (d'externalisation) du PCR : un questionnaire circule. Il faudrait qu'un maximum de personnes se le procurent et le remplissent.

Dosimètre d'ambiance : on peut utiliser un "dosifilm" si renouvellement mensuel.

Dosimètres RPL : beaucoup plus sensibles que les films qui sont désormais interdits.
Il est à mettre à l'endroit où l'utilisateur est le plus souvent : par exemple collé à hauteur de visage ou de poitrine sur la vitre.

La sonde SX-2R, utilisée avec le radiamètre individuel Radiagem^{TM}, est très sensible en termes de détection de fuite : elle avertit l'utilisateur en temps réel (plus adaptée qu'une simple Babyline).

La clé pour couper les sécurités ne devrait pas être laissée en place mais gardée en lieu sûr.

Il existe 49 organismes agréés au niveau national pour les contrôles de radioprotection dont certains sont spécialisés.

Souhaits des participants :

Les participants souhaiteraient que soient mis sur le futur site Web de RECIPROCS :

- une mise à jour ou veille sur les décrets et leurs mises en applications en matière de radioprotection,
- des exemples de dossier d'autorisation de détenir et d'utiliser des générateurs électriques de rayonnements ionisants,
- des liens vers le réseau PCR,
- un forum de discussion.

III. Table ronde Gestion

La table ronde fait remonter les réflexions suivantes sur les gestions possibles des frais de fonctionnement et des coûts de prestations de service (souvent mis en place pour les compenser), qui tendent à se généraliser dans les laboratoires.

Méthodes de facturation possibles :

Il est difficile d'harmoniser la facturation entre la diffraction des RX sur des poudres et des monocristaux car les coûts sont différents d'une technique à l'autre.
Les poudres posent de plus, un problème spécifique car le résultat est plus incertain.

Une piste pour la facturation : faire payer le temps d'utilisation pour le fonctionnement, la facturation se ferait alors au prorata de l'heure d'utilisation. Dans ce cadre il faut compter sur un changement de tube RX tous les 3 ans.

Par ailleurs le temps de travail peut-être décompté et soumis à facturation. Il existe une grille au CNRS et par exemple un IE est facturé 45 € de l'heure.

Le taux horaire doit tenir compte de l'amortissement du coût de l'appareil sur 10 ans et du coût des fluides.

Une autre piste pour les monocristaux est le forfait en prenant en compte le coût moyen.

Une autre piste est le forfait type américain : c'est-à-dire progressif en fonction du nombre d'atomes : 40 atomes, puis 80 atomes et si la résolution prend plus de 15 jours le tarif est double ; ceci est indiqué dans le devis.

Forfait ou taux horaire ? La deuxième solution devrait être la règle au-delà d'un certain temps.

On peut aussi envisager des contrats sur 3 ans.

Notre principal avantage : la satisfaction du client.

Evaluation des coûts :

A 2€ de l'heure, on couvre le fonctionnement mais pas la main d'œuvre, ni l'investissement.

La maintenance représente un coût fixe qui peut-être facturé, alors que les pannes sont difficiles à intégrer autrement.

Pour estimer le coût de revient d'une structure, on peut utiliser une moyenne glissante sur 5 ans.

Il est difficile d'être attractif en prix car la concurrence est mondiale.

Il ne faut pas hésiter à facturer le temps téléphonique.

En ce qui concerne le prix facturé, un prix élevé ne rebute pas les industriels.

Une question est posée : Est-il possible de récupérer la TVA ?

Une structure serait bien valorisée à 4000€.

Le temps passé en bibliographie pour l'industrie devrait être facturé.

On peut envisager un forfait sur la prise en charge.

Pour l'amortissement (sur 10 ans par exemple), on peut grâce à la LOLF mettre de l'argent de côté chaque année pour remplacer les appareils.

Confidentialité :

En ce qui concerne la confidentialité : il peut y avoir des problèmes de langues. Il faut faire un contrat pour gérer la confidentialité.

Financement à venir :

On ne pourra toucher de l'argent de la part des ANRs que sur justification.

Certains centres sont financés par un pot commun : le fonctionnement du centre est retiré avant la dotation aux équipes. Cela évite les problèmes de caisses vides en fin d'année.

Politique de facturation :

Deux prix devraient être envisagés : un pour le monde académique et un autre pour l'industrie. Dans le dernier cas, les prix doivent être élevés pour être crédibles et être comparables à d'autres techniques.

En ce qui concerne la facturation au monde académique, elle doit se faire suivant différents tarifs selon qu'ils participent ou non au financement.

Une grille tarifaire devrait être fixée.

Il faudrait de la rigueur dans la gestion : faire payer tout le monde. Mais pour des raisons historiques c'est difficile à appliquer.

La facturation devrait être identique pour tout le monde avec un système de remise suivant le financement et l'origine de la demande plutôt que de surfacturer certaines catégories.

Les problèmes suivants sont évoqués : la facturation est difficile si le parc d'appareils est mutualisé et du fait de la concurrence entre laboratoires.

Divers :

Se pose alors le problème des licences informatiques qui sont consenties à bas prix pour le monde académique, ce qui ne devrait pas être le cas pour une activité commerciale.

On peut aussi répondre à la demande de structure par formation interne.

IV. Table ronde Instrumentation

Discussion sur les microsources :

- Optimisation du détecteur en fonction de la longueur d'onde pour les doubles sources. *A priori* on a un meilleur rendement pour le cuivre (dépend de la composition du "phosphore" sur le CCD - les IP ont un rendement indépendant de la longueur d'onde d'irradiation, mais RIGAKU ne dispose pas de système automatisé double source).

- La source peut être dotée de nouveaux monochromateurs qui intensifient le flux d'un facteur 2 à 5 selon la longueur d'onde Mo Kα ou Cu Kα.

- Intérêt de la double source : ajuster la longueur d'onde au problème.

- Pour les tests microsources Mo, un facteur de gain annoncé 5 à 10 (Pascal Roussel) sur monocristal de 50 microns par rapport à une source classique. Toutefois, la percée des microsources sur le marché est récente et nous n'avons pas le recul nécessaire sur les avantages réels par rapport aux sources classiques.

- Pour des cristaux de taille raisonnable, l'intérêt d'une microsource par rapport à un tube classique intensifié se pose.

- M. Ortega (Grenoble) essaie de comparer les microsources avec les anodes tournantes. La divergence est plus faible pour les anodes tournantes. Il est admis que les microsources tubes scellées n'entrent pas en concurrence avec les nouvelles anodes tournantes microfoyer, beaucoup plus intenses pour étudier les échantillons faiblement diffractant comme les cristaux de protéines.

- Le service après-vente Oxford a une très bonne réactivité et intervient à distance sur les PCs. Toutefois, les personnes satisfaites (Nancy et Dijon) sont encore sous garantie.

Table gonio xyz :

Où trouver de quoi faire des expériences sur table gonio xyz avec déplacement très précis (pour positionnement et cartographie pour étude en pression et de petite dimension (tête gonio) ? Pas de solution clé en main (hormis chez les « gens » des poudres).

Systèmes de détection :

Evolution des systèmes de détection bidimensionnels avec temps de réponse de type des détecteurs ponctuels (type pixel). La tentation étant d'atteindre la résolution en temps d'évènements expérimentaux.

Il existe aussi les systèmes à fils mais onéreux en fonctionnement. (Le détecteur µGAP AXIOM de chez Bruker est adapté uniquement aux longueurs d'onde élevées (Cr ou Cu) pour les cristaux biologiques).

Un gain très important est constaté entre le CCD Princeton et l'ApexII pour les petits cristaux.

1ère Session : Mise en place des Groupes de Travail

Pascal Retailleau a lancé l'idée de réaliser une base de données de cristaux de référence pour tester les différentes configurations de détecteurs et de sources disponibles en France voire même pour tester les méthodes de collecte de chacun (cf. s'inspirer de ce qu'avait fait M. Durif en faisant circuler un cristal sur différents appareils).

Constatation de Joël Jaud : en période estivale le refroidissement du détecteur CCD se fait difficilement => nécessité de refaire les réglages hiver/été.

V. Table ronde Résolution Structurale

1ère partie :

Présentation par Christian Jelsch : « Cristallographie à Résolution ultra-haute & Logiciel MoPro »

2ème partie :

Informations générales :

MoPro : nécessite simplement un mot de passe et un login (gratuit)
bibliothèque sur Acta Cryst A

Question : Qui utilise en méthode directe Platon* system S ?

Superflip (logiciel de résolution *ab initio* à partir de modification de la densité de charge) avec interface Jana* ou Crystals* fonctionne bien. Sous WingX*, * cela fonctionne moins bien (pas le cas pour tout le monde).
Dans la dernière version de WingX, WingX peut être installé n'importe où et non plus sous C: Superflip fonctionne alors très bien (plus de problème de chemin d'accès).

Squeeze : module dans Platon qui permet de s'affranchir du solvant désordonné dans la maille.
Acta accepte désormais qu'on utilise squeeze à condition de le signaler.

Lorsqu'on utilise Platon à partir de ShelX, dans option cocher « no move » (« move » est par défaut).

Attention ! L'ordre des positions équivalentes est différent entre Platon et ShelX.

En cas de publication dans Acta C et E, faire un checkcif sur les FCF. Le CIF envoyé doit correspondre au dernier cycle d'affinement.

Les chinois sont rémunérés 400 € / publication s'ils publient dans Acta. JC Daran a d'ailleurs insisté sur une plus grande implication de la communauté française dans l'action éditoriale des journaux Acta.

(* chaînes de programmes cristallographiques récupérant les facteurs de structures mesurés, pour les analyser et aller jusqu'à l'affinement de la structure résolue et la mise en forme pour publication)

Souhaits des participants :

Dans le groupe de travail, certaines personnes sont intéressées par la résolution sur poudres et d'autres par la résolution sur monocristaux. Il a été décidé qu'il n'y aura qu'un seul groupe de travail prenant en compte la résolution sur monocristaux et sur poudres ainsi que les problèmes de polymorphisme.

VI. Table ronde Méthodes de pointes

Informations générales :

Il a été demandé aux participants de définir les méthodes de pointes qu'ils souhaitaient voir discuter. Les différents sujets ont été :

- les nano objets et leurs méthodes de caractérisation,
- XRD + autres techniques,
- le couplage des méthodes cristallographiques avec d'autres techniques d'analyse (RMN, microscopie électronique, etc.),
- les nouvelles méthodes de détermination de la configuration absolue,
- la méthode de détermination de structure dite « charge flipping »,
- la détermination de structure par diffraction de poudre,
- la densité de charge,
- la cartographie de l'espace réciproque sur couche mince,
- MOPRO : ce logiciel peut aussi être utilisé pour affiner des structures cristallographiques mais sous certaines conditions qui peuvent demander à être clarifiées,
- grands instruments (GI) : information sur les nouvelles sources, choix entre source de labo et GI,
- les nouveaux logiciels ou les logiciels utilisant de nouvelles méthodes.

Formations sur les méthodes de pointes :
Il existe déjà plusieurs formations:

Ecole thématique de Nancy : lors de sa création, il existait déjà une formation sur les poudres (Nantes) et une autre pour les biomolécules.
L'école de Nancy s'adresse à un public ayant déjà des connaissances en cristallographie.

Suggestion : pourquoi ne pas faire cette école sur 2 ans : la 1ère année pour un groupe débutant et la 2ème année pour un niveau supérieur (actuellement groupe non homogène) ?

SOLEIL a également mis en place une école cette année.

HERCULES

ESRF : formation des utilisateurs 2 fois par an.

Souhaits des participants :

Les participants ont exprimé le souhait de voir se développer des formations sur des points spécifiques (applications pour experts) non couverts par les écoles actuelles. En complément, il a été exprimé un besoin en information sur les écoles/formations déjà existantes.

Il faudrait consacrer au moins une demi-journée ou une journée entière sur les méthodes de pointes (15 minutes, c'est trop court).

Il faudrait montrer les limites des différents logiciels.

Concernant les grands instruments : quand utiliser son matériel de laboratoire et quand utiliser un grand instrument ?

Points sur les nouvelles sources, leurs potentiels et leurs champs d'applications.

VII. Table ronde Formation

Contexte :

Ce qui a changé :

Semestrialisation de l'enseignement : tout est trop fractionné et au final ne permet pas l'assimilation.

Intérêt de faire goûter aux étudiants la cristallographie dès le début par des petits volumes horaires ? Plutôt une approche par la pratique ?

Différence entre la sensibilisation et la formation à la cristallographie.

Un master 2 de cristallographie sur plusieurs universités ? Possible, cela a déjà existé.

Le problème c'est que cela se heurte à la concurrence entre universités liée à l'autonomie.

Questions :

De quelle façon enseigner ?

Que faire pour défendre la place de la cristallographie dans les programmes d'enseignement ?

Souhaits des participants :

Pouvoir relancer une formation en cristallographie type master 2 à l'image de ce qui existait pour le DEA National de cristallisation des protéines, mais dans un cadre plus large : alliant physique, chimie, biologie, cristallogenèse et minéralogie car les débouchés pour cette formation seront de toute façon limités. La formation pourrait être constituée d'un tronc commun et de modules des spécialisations dans les composantes. Moyens ? Appui du CNRS ? Relais sur des universités moyennes hors compétition internationale ?

VIII. Table ronde Service et Recherche

Informations générales :

Plateformes de service existant en France : Bordeaux, Marseille, Nancy (en cours).
A CRISMAT à Caen : ce sont les mêmes personnes qui font de la recherche et du service.
A Rennes : le service est composé d'un IR. Il y a également quelques personnes qui font de la recherche en cristallographie et qui utilisent eux-mêmes les diffractomètres.
A Strasbourg : le service est séparé de la recherche. De nombreux autres services sont dans le même cas.
Nancy reste au niveau national le seul laboratoire "complet" (recherche, formation, service) en cristallographie. Caen, Rennes et Grenoble le sont dans une moindre mesure.
A Toulouse : contacts permanents entre l'IR et les chercheurs malgré un morcellement sur 3-4 labos.

Les plateformes sont-elles une bonne voie pour l'avenir ? C'est sans doute un moindre mal s'il n'y a pas d'activité de recherche dans le même lieu.
En tout état de cause, ces plateformes ont besoin de chercheurs.

Si la plateforme repose sur 1 seul IR, la rentabilité est nulle à long terme car en cas de départ de l'IR, il n'y a plus personne pour faire tourner la plateforme.

Il faut maintenir et renforcer les interactions entre les IR et les chercheurs chimistes.

Les centres communs pourraient accueillir des chercheurs en détachement afin de développer des thématiques.

Il est important que les thésards soient en contacts directs avec les diffractomètres : ils devraient donc être formés par l'IR ou les chercheurs.
A Toulouse, actuellement il n'y a que 2-3 thésards qui sont formés en interne par an alors qu'auparavant tous les thésards l'étaient.

A l'ESRF : il existe 2 fois par an des sessions de formation pour les utilisateurs.

Concernant les chercheurs,

En section 15 : les cristallographes ne sont pas reconnus. Ils travaillent dans un laboratoire de chimie et doivent donc mettre en avant la chimie et non la cristallographie.

En section 5 : la compétence en cristallographie est reconnue.

En section 21 : la cristallographie biologique est très forte.

Lorsqu'on se trouve à la limite de la chimie, de la physique et de la biologie, il est dur de se faire une place. Il est donc nécessaire de pousser ensemble pour avoir plus de poids.

Il faut davantage communiquer avec les instances des tutelles sur notre métier de cristallographe.
Nancy est le seul laboratoire à s'en sortir car M. Lecomte a réussi à communiquer.

Dans un des prochains numéros de iUCRNews (diffusés dans les pays Anglo-Saxons), une page sera consacrée à l'exposition « Voyage dans le cristal ».
Il faut également penser à diffuser dans des journaux de vulgarisation.

IX. Intervention de Monsieur Jean-François Baumard

Monsieur Baumard a évoqué les principaux enjeux pour l'Institut de Chimie : le défi de l'échelle Nanoscopique : potentialités, caractérisations, risques et les phénomènes résolus dans le temps. Il a insisté sur le fait que la Cristallographie Structurale était un métier de base incontournable de l'Institut de Chimie. Il a émis le souhait que notre profession se rapproche notamment sur les plateaux technologiques d'autres disciplines comme la RMN, la spectrométrie de masse, *etc.* Il nous a aussi fortement incité à concevoir, publier, éditer des documents scientifiques afin de ne pas perdre le savoir-faire. Il a rappelé que pour sauvegarder les savoir-faire, l'Institut essayait dans la mesure du possible d'anticiper les départs à la retraite en nommant le successeur avant le départ afin de permettre la transmission sur la période de recouvrement.

Evoquant la réforme en Institut de l'ancien Département de Chimie du CNRS, il a estimé que l'Institut de chimie serait dans son rôle en concrétisant l'existence de RECIPROCS en tant que réseau et il nous a incité à en faire la demande.

Monsieur Jean-François Baumard à l'ANGD "RECIPROCS : Une évolution du métier de Cristallographe Structuraliste"

Interrogé sur le soutien que le CNRS pourrait apporter à une formation nationale de type master 2 en cristallographie au sens le plus large, il a répondu que le CNRS n'avait pas vocation à se substituer aux Universités, mais que le CNRS comme il l'a toujours fait aiderait sûrement via ses unités et ses agents. Alerté sur le fait que l'autonomie des Universités ne permettait plus une politique nationale notamment au niveau des métiers rares comme le nôtre, il nous a incité à faire un projet et à le soumettre à l'Institut.

X. Constitution des groupes de travails

Sur la base des volontaires issus des tables rondes et des questionnaires d'évaluations rendus à la fin de la formation, les groupes de travail prévisionnels (qu'il faudra étoffer pour certains) sont les suivants :

Réglementation	**Gestion**	**Instrumentation**	**Résolution Structurale**
Nicolas BARRIER Olivier LEYNAUD Pascal RETAILLEAU Ruben VERA	Erwann JEANNEAU Stéphane MASSIP Olivier PEREZ Christian PHILOUZE Thierry ROISNEL	Joël JAUD Olivier PEREZ Emmanuel WENGER	Nicolas BARRIER Thierry BATAILLE Lydia BRELOT Isabelle GAUTIER-LUNEAU Christian JELSCH Thierry ROISNEL Laure VENDIER
Méthodes de pointes	**Formation**	**Service et Recherche**	**Bases de données**
David FLOT Brice KAUFFMANN Pascal ROUSSEL Emmanuel WENGER	Nathalie DUPONT Enrique ESPINOSA Joël JAUD	Magali ALLAIN Michel GIORGI Luc ORTEGA Olivier PEREZ Emmanuel WENGER	Jean-Claude DARAN Michel GIORGI Pascal RETAILLEAU

Des volontaires se sont également proposé pour un **site Web :**

Carole BARBEY
Nicolas GUIBLIN
Thierry ROISNEL
Yoann ROUSSELIN

Ainsi que pour l'aide à l'**Organisation des évènements :**

Thierry PRANGE
Yoann ROUSSELIN

Ou pour de la **Communication :**

Thierry BATAILLE

XI. Bilan de l'évaluation et conclusion

L'évaluation ci-dessous faite sur 40 retours de fiches montre la nécessité de la création de ce réseau. Ce que nous demandons avec insistance à l'Institut de Chimie.

Toutes les suggestions seront prises en compte et notamment la très intéressante demande de création d'un groupe de travail :
Méthodes de travail (comparer les différentes façons de travailler entre labos) :

Montage cristal/préparation poudres
Montages spéciaux (capillaires, …)
Acquisition de données
Résolution, archivage, …
Problèmes souvent rencontrés (maintenance)

La réunion s'est conclue sur une réflexion qui s'amorce sur la nécessité de s'élargir aux autres composantes de la cristallographie structurale (comme la biologie structurale) et suivant quelles modalités.

Les organisateurs se sont engagés à étudier la faisabilité de réaliser en novembre une deuxième session un peu allégée pour des raisons budgétaires. Un premier retour des groupes de travail constitués est normalement prévu ainsi qu'un point sur l'organisation générale du réseau. La deuxième session devrait permettre la création des groupes de travail manquant : Communication, Evènements, Informatique, site Web et donc Méthodes de travail, même si nous l'avons vu des volontaires ont déjà pris les devants dans ces domaines.

Délégation Centre-Poitou-Charentes
Comité d'organisation scientifique & bureau Formation Permanente

Bilan des Questionnaires ANGD
RECIPROCS : 6 & 7/07/09
(bilan réalisé sur 40 questionnaires)

Nom, prénom :

Statut : **14** – IR **7** - IE **1**-AI **1** – Tech **1** - Personnel technique Ecole Normale
3 – CR **1** – Chercheur ESRF **1** - DR émérite **3** - Pr **1** - Pr émérite **7** - MCF

Ancienneté dans le domaine :

******

1. Votre inscription résulte de :

23 - votre initiative
3 - l'incitation de votre directeur de laboratoire, de votre directeur de recherche
20 - l'incitation des responsables de cette ANGD

2. Par quel outil de diffusion avez-vous été informé de l'existence de cette ANGD ?
20 – email des organisateurs
12 – contact avec les responsables de l'ANGD
5 – liste de diffusion AFC
2 – réseau de diffusion RECIPROCS
2 –formation permanente
2 – Internet
1 – colloque utilisateurs Bruker
1 – mail de l'Association Bordelaise de Cristallographie
1 – CNRS Hebdo DR17
2 – mail de son directeur
1 – oralement par son directeur

3. Merci de préciser les présentations qui vous ont le plus intéressé (par ordre décroissant) :

20 – Méthode d'Entropie Maximum
13 – Phases Modulées
13 – SOLEIL
10 – Gestion/Facturation
9 – Résolution structurale
8 – Etudes photo cristallographiques
7 – Enseignements
7 – Poudres
7 – Réglementation
6 – Cartes de densité
6 - ESRF
6 – Formations internes
7 – Instrumentation
5 – Sensibilisation
4 – Qualité
3 – Formation permanente
3 – Méthodes de pointes
3 - Neutrons
2 - Bases de données
2 – Services
1 – INIST
1 – Table ronde Services et Recherche

5 – Tables rondes
3 – Présentations scientifiques
3 – Formations
1 – Problème de formation

4. Cette action vous a-t-elle permis d'acquérir de nouvelles connaissances ou compétences ?

Tout à fait **28** Un peu **2** pas vraiment **6** pas du tout **1**

Merci de préciser :

8 – Méthode d'Entropie Maximum
6 – Gestion/Facturation
5 – Phases Modulées
4 – ESRF
4 – Réglementation
4 – SOLEIL
3 – Cartes de densité
3 – Etudes photo cristallographiques
3 – Poudres
3 – Résolution structurale
2 – Instrumentation
2 – Méthodes de pointes
2 - Neutrons
2 – Qualité
1 – Sensibilisation
2 – Etat des lieux des différentes techniques
1 – Formations
1 – Techniques particulières
1 – D'un point de vue relationnel
1 – Nouveautés
1 – Place du métier de cristallographe dans la recherche française
1 – Savoir-faire des autres laboratoires
1 – Connaissances sur l'étendue des besoins et des domaines

5. Pensez-vous que cette ANGD puisse contribuer à :

Créer un espace d'échanges et de collaborations

Tout à fait **40** pas vraiment **0** pas du tout **0**

Structurer une communauté nationale

Tout à fait **40** pas vraiment **0** pas du tout **0**

Sortir votre profession de l'isolement et de l'incompréhension rencontrés

Tout à fait **31** pas vraiment **7** pas du tout **0**

Favoriser l'évolution et l'adaptation de votre profession

Tout à fait **34** pas vraiment **5** pas du tout **0**

6. Comment appréciez-vous les modalités pédagogiques

	Très Bien	Bien	Satisfaisant	Moyen
Tables rondes	**14**	**21**	**5**	**0**
Espaces d'échanges informels	**9**	**24**	**4**	**1**

7. Que pensez-vous de l'organisation ?

	Très Bien	Bien	Satisfaisant	Moyen
de l'accueil	**29**	**11**	**0**	**0**
des repas & hébergement	**20**	**16**	**4**	**0**
du lieu	**14**	**19**	**6**	**1**
de la durée globale	**12**	**18**	**8**	**1**

8. En conclusion :
➔ **quels sont, pour vous, les points forts dont vous pourrez tirer profit ?**
16 - Mise en place d'un réseau de partenaires à compétences complémentaires : valorisation de l'activité de recherche
1 - Eviter l'isolement

1 - Forum de discussion

1 - Faciliter les échanges
11 - Echange d'informations, de conseils, de connaissances
1 - Echange entre les diverses communautés scientifiques
2 - Discussion de problématiques similaires
1 - Avis sur les techniques, appareils
1 - Création de lien entre experts
1 - Possibilité de collaboration dans le futur
1 – Contact avec les services de cristallographie

1 - Faciliterait règlement des petits tracas et résolution de problèmes plus importants
1 - Pratique « uniforme » sur les méthodes, fonctionnement des services (gestion, facturation)
1 - Soutien d'un réseau par d'éventuelles actions locales (demandes d'appareillages, postes, proposition d'enseignements, …)
1 - Mise en place d'une réflexion sur la sécurité, sur la qualité, …

1 - Défense des spécificités de notre métier (formations universitaires, interne au réseau, sensibilisation)
1 - Prise de conscience de la spécificité du métier de cristallographe
1 - Visibilité de la cristallographie
1 - Etat des lieux de la cristallographie

1 - Accès si possible à TitaneScience

Points forts retirés de l'ANGD RECIPROCS :
1 - Rencontre instructive sur les techniques, types d'études, logiciels
1 - Intérêt des sujets évoqués très varié
1 - Diversité d'approche en utilisant la même technique
1 - Ouverture/Prise de conscience de certaines techniques et/ou nouvelles possibilités
1 - Développement de méthodes expérimentales et analytiques
1 - Méthode de Maximum Entropie
1 - Méthodes de Pointes
1 - Informations récupérées en diffraction de poudres et facturation de services
1 - Outils de gestion/facturation
1 - Convivialité

➔ **êtes-vous prêt à vous investir dans la création du réseau ?**
28 – OUI
1 – Disponible pour un coup de main
1 – Pas à court terme
1 – A voir
1 – Expérience trop faible dans le domaine pour s'investir
2 - NON

➔ **si oui, à quel titre ou pour quel type d'action ?**
Investissement dans les différents ateliers qui vont être mis en place suite à l'ANGD : atelier sur la résolution structurale, l'instrumentation, les méthodes de pointes, la formation, la gestion des services, la réglementation et la gestion.

Discussion sur la résolution et l'affinement de structures

Caractérisation de polycristallins et monocristaux

Faire de la diffusion au grand public

Accueil de stagiaires

Création d'un site Web

Mise en place d'une démarche qualité au sein d'un service de cristallographie en collaboration avec le réseau « Qualité en recherche » de la MRCT

Aide à l'organisation de journées de rencontres

Animer des groupes de travail

Participation à la vie du réseau : discussion, rencontres, …

9. Autres commentaires ou suggestions :
2 - Emploi du temps trop fourni
1 - Temps d'intervention très courts

1 - La gestion du temps des participants devrait être améliorée
1 - Manque 1 tour de table pour la présentation des participants (nom, prénom, fonction, lieu de travail) afin de mieux faire connaissance
1 - Quelques difficultés d'organisation
2 - Salle de conférence non adapté : ceux du fond ne voient pas et n'entendent pas

1 - Tables rondes intéressantes
3 - Tables rondes un peu courtes
3 - Dommage de participer qu'à une table ronde sur 2
1 - Manque un court résumé de chaque table ronde pour les personnes n'y ayant pas assistée

1 - Bonne idée de créer RECIPROCS car on ne connaît pas tous les cristallographes de France et il est important de partager ses expériences pour faire avancer les choses.
1 - Existence d'un tel réseau utile pour donner de la visibilité au métier de cristallographe auprès de la communauté scientifique.

1 - Très bon démarrage, bonne motivation. Il en va de l'évolution de nos métiers de cristallographes :
en tant qu'ITA, chercheurs, enseignants-chercheurs
dans les domaines interdisciplinaires de la Physique, de la Chimie et de la Biologie
du cœur de métier (diffraction) aux métiers « dérivés » : SAXS, SANS, fluoX, …

1 - Cette ANGD est une réussite
1 - A recommencer régulièrement et sous peu
2 - Félicitations aux organisateurs

Suggestions :

A prévoir pour prochaine réunion :
4 - Programme moins chargé
1 - Plus de temps pour les échanges informels
1 - Pas de sessions parallèles pour renforcer le sentiment d'une communauté unique !

1 -Méthodes de travail (comparer les différentes façons de travailler entre labos) :
Montage cristal/préparation poudres
Montages spéciaux (capillaires, …)
Acquisition de données
Résolution, archivage, …
Problèmes souvent rencontrés (maintenance)

1 - Création d'un site Web
1 - Cours didactique de cristallographie sur le site Web

ANGD : RECIPROCS : 6 & 7 juillet 2009

Une évolution du métier de Cristallographe Structuraliste

PROGRAMME 1ère Session : Mise en place des ateliers

1ère journée

10h00 – 10h55	Accueil
11h00 – 11h15	Introduction (Pascal Retailleau)
11h20 – 11h35	Intervention de l'observatoire des métiers (Florence Bouyer)
11h40 – 11h55	Evolution de la réglementation en matière de radioprotection (Jean-François Le Du)
12h00 – 12H15	IUCR et AFC (Jean-Claude Daran)

Déjeuner

14h30 – 14h45	Qualité (Alain Rivet)
14h50 – 15h05	Outils de gestion, facturation (Christian Philouze)
15h10 – 15h55	Tables rondes parallèles : Réglementation // Gestion

Pause

16h15 – 16h30	Instrumentation, fournisseurs et recyclage (Joël Jaud)
16h35 – 16h50	Résolution structurale (Jean-Michel Léger)
16h55 – 17h40	Tables rondes parallèles : Instrumentation (Joël Jaud)// Résolution structurale (Christian Jelsch)

Dîner

2ème journée

8h00 – 8h15	SOLEIL (Sylvain Ravy)
8h20 – 8h35	ESRF (David Flot)
8h40 – 8h55	Neutrons (Florence Porcher)
9h00 – 9h15	Cartes de densités (Nicolas Claiser)
9h20 – 9h35	Phases modulées (Olivier Perez)
9h40 – 9h55	Poudres (Nicolas Barrier)

Pause

10h15 – 10h30	Méthode de Maximum Entropie (Pascal Roussel)
10h35 – 10h50	Etudes photo-cristallographiques (Sébastien Pillet)
10h55 – 11h10	Intervention Formation Permanente (Jeanine Daubin)
11h15 – 11h30	Formations internes (Enrique Espinosa)
11h35 – 11h50	Enseignements (Isabelle Gautier-Luneau)
11h 55 – 12h10	Sensibilisation (Philippe Bénas)

Déjeuner

14h00 – 14h15	Intervention de l'Institut de Chimie (Jean François Baumard)
14h20 – 15h05	Tables rondes parallèles : Méthodes de pointes (David Flot) // Formation (Thierry Prangé)
15h10 – 15h25	Intervention de l'INIST (Nathalie Antonot)
15h30 – 15h45	Bases de données (Jean-Claude Daran)
15h50 – 16h05	Services (Thierry Roisnel)
16h10 – 16h25	Recherche

Pause

16h45 – 17h30	Tables rondes parallèles : Bases de données (Jean-Claude Daran) // Services et Recherche
17h35 – 17h50	Conclusion – Bilan – Perspectives

Liste des participants à l'ANGD RECIPROCS (06-07 Juillet 2009)

ALLAIN Magali	CIMA, ANGERS
ANTONOT Nathalie	INIST, VANDOEUVRE LES NANCY
BAILLY Corinne	DCM, GRENOBLE
BARBEY Carole	CSPBAT, VILLETANEUSE
BARRIER Nicolas	CRISMAT, CAEN
BATAILLE Thierry	Sciences Chimiques de Rennes, RENNES
BAUMARD Jean-François	Directeur Scientifique Adjoint de l'Institut de chimie, PARIS
BENAS Philippe	Laboratoire de cristallographie et RMN biologiques, PARIS
BOULET Pascal	Institut Jean-Lamour, NANCY
BOUYER Florence	OMES, PARIS
BRELOT Lydia	Institut de Chimie de Strasbourg, STRASBOURG
CATTEY Hélène	ICMUB, DIJON
CHAMOREAU Lise-Marie	IPCM, PARIS
CLAISER Nicolas	CRM2, VANDOEUVRE LES NANCY
DARAN Jean-Claude	Laboratoire de Chimie de Coordination, TOULOUSE
DAUBIN Jeanine	Formation Permanente, Délégation Centre Poitou-Charentes, ORLEANS
DUPONT Nathalie	CSPBAT, VILLETANEUSE
ESPINOSA Enrique	CRM2, VANDOEUVRE LES NANCY
FAUVET Gérard	BRUKER AXS
FLOT David	ESRF, GRENOBLE
GAUTIER-LUNEAU Isabelle	Institut Néel, GRENOBLE
GIORGI Michel	Fédération des Sciences Chimiques de Marseille, MARSEILLE
GONTARD Geoffrey	IPCM, PARIS
GUBLIN Nicolas	Structures, propriétés et modélisation des solides, CHATENAY MALABRY
HERSON Patrick	IPCM, PARIS
JAUD Joël	CEMES, TOULOUSE
JEANNEAU Erwann	Multimatériaux et Interfaces, VILLEURBANNE
JEANNIN Olivier	Sciences Chimiques de Rennes, RENNES

JELSCH Christian	CRM2, VANDOEUVRE LES NANCY
KAUFFMANN Brice	IECB, PESSAC
LADEIRA Sonia	SFTCM, TOULOUSE
LE DU Jean-François	IPN, ORSAY
LEGER Jean-Michel	Laboratoire de Chimie Physique et Minérale, BORDEAUX
LEMOINE Pascale	Laboratoire de cristallographie et RMN biologiques, PARIS
LEYNAUD Olivier	Institut Néel, GRENOBLE
MASSIP Stéphane	Laboratoire de Chimie Physique et Minérale, BORDEAUX
ORTEGA Luc	Institut Néel, GRENOBLE
PECHEV Stanislav	ICMCB, PESSAC
PEREZ Olivier	CRISMAT, CAEN
PEREZ Philippe	ELEXIENCE
PHILOUZE Christian	DCM, GRENOBLE
PILLET Sébastien	CRM2, VANDOEUVRE LES NANCY
PORCHER Florence	LLB, GIF SUR YVETTE
PRANGE Thierry	Laboratoire de cristallographie et RMN biologiques, PARIS
RAVY Sylvain	Synchrotron SOLEIL, GIF SUR YVETTE
RETAILLEAU Pascal	ICSN, GIF SUR YVETTE
RICHARD Philippe	ICMUB, DIJON
RIVET Alain	CERMAV, GRENOBLE
ROISNEL Thierry	Sciences Chimiques de Rennes, RENNES
ROUSSEL Pascal	UCCS, VILLENEUVE D'ASCQ
ROUSSELIERE-BEBIEN Hélène	Institut de Chimie Moléculaire de Paris, PARIS
ROUSSELIN Yoann	ICMUB, DIJON
SELKTI Mohamed	Laboratoire de cristallographie et de RMN biologiques, PARIS
VENDIER Laure	Laboratoire de Chimie de Coordination, TOULOUSE
VERA Ruben	Centre de diffractométrie Henri Longchambon, VILLEURBANNE
WENGER Emmanuel	CRM2, VANDOEUVRE LES NANCY

2ème Session

I. Compte-rendu général

Les 12 et 13 novembre 2009 aux CISP à Paris, s'est tenue la deuxième session de l'ANGD : "RECIPROCS : Une évolution du métier de Cristallographe Structuraliste".

Cette deuxième session a regroupé 25 personnes dont 23 Cristallographes Structuralistes (cf. liste des participants jointe). Cette participation, plus faible qu'en juillet, s'explique par plusieurs facteurs :

- Un facteur d'organisation : il aurait été souhaitable d'espacer le plus possible les deux sessions, mais techniquement nous n'avons pu différer le second rendez-vous au-delà de la mi-novembre. Des critères purement logistiques nous ont conduit à choisir les journées du 12 et 13 novembre : c'est-à-dire sur le pont du 11 novembre.
- Une moindre disponibilité des membres du réseau, notamment des enseignants chercheurs.
- Des problèmes pour financer une deuxième mission dans l'année pour les non-CNRS.

A l'issue de la première session, 37 membres de RECIPROCS avaient choisi de prendre une part active à la vie du réseau et de ses groupes de travail. Or, sur ces 37 personnes, 22 ont pris part à la deuxième session ; ils représentent la quasi totalité des membres des groupes de travail. A ce titre, cette deuxième session de RECIPROCS est donc un succès.

La participation lors de cette deuxième session révèle un problème de communication interne au sein du réseau. Si l'aspect partage de compétences et forum de discussions du réseau a été clairement défini lors de la première session, le côté outil de valorisation de la cristallographie structurale auprès de nos instances de tutelle mériterait d'être plus développé pour permettre une meilleure attractivité de RECIPROCS vis-à-vis des chercheurs. C'est un point qui sera une des priorités du groupe de travail « Communication ».

Les objectifs de cette deuxième session étaient les suivants :

- Aborder les aspects professionnels non traités lors de la première session.
- Discuter de l'organisation du réseau.
- Mettre en place les groupes de travail.
- Maintenir la dynamique créée en juillet.
- Réaliser un premier bilan.

Le programme reposait, comme pour la première session sur la réalisation de tables rondes et, innovation : sur les premiers retours des groupes de travail sous le format de leur choix (intervention orale, discussion informelle, etc.). Les organisateurs avaient tenu compte des remarques des participants de la première session en augmentant le temps imparti à chaque table ronde pour permettre aux discussions d'aller à leurs termes ; ils avaient aménagé également des temps de discussions informelles supplémentaires.

Le programme étant moins dense, le déroulement et les horaires ont été respectés d'une bien meilleure façon que lors de la première session. La session après quelques mots d'introductions a débuté par la table ronde sur les bases de données qui n'avait pu avoir lieu lors de la première session. Vinrent ensuite les intervenants sélectionnés par les groupes de travail « Gestion », « Réglementation » et, « Résolution Structurale ».

Le groupe de travail « Réglementation » avait choisi une intervention interactive avec l'audience ; il a été convenu de limiter son activité à la radioprotection et d'adjoindre ce qui relève des règles de publication au groupe de travail « Bases de Données » qui devient donc le groupe de travail « Bases de Données et Contraintes Editoriales ».

Les groupes de travail « Méthodes de Pointes » et « Formation » n'ont pas produit de retour ; une discussion sur les causes du non-fonctionnement de ces groupes et sur les remèdes à apporter s'est tenue à la place dans chacun de ces cas. Une mauvaise définition de ces groupes a été diagnostiquée.

Il a été convenu que le contenu du groupe de travail « Méthodes de pointes » serait divisé en deux et viendrait enrichir les groupes « Instrumentation » et « Résolution Structurales ».

Le groupe travail « Formation » présente deux facettes : la formation continue et la formation académique. La formation continue vise à enrichir les connaissances de cristallographes dans des domaines particuliers. Un coordonnateur doit être nommé afin de recenser les besoins en formation et de mettre en place les actions nécessaires pour y répondre. La formation académique a, quant à elle, un objectif à plus long terme. Elle révèle la volonté de RECIPROCS de soutenir toute action nationale de type « mise en place d'une formation au niveau master 2 » visant à assurer une formation de qualité en cristallographie structurale.

Enfin les groupes de travail « Instrumentation » et, « Services et Recherche » (confondus pour l'occasion faute de participants suffisamment nombreux dans ces deux groupes), avaient choisi une intervention en interaction avec l'auditoire sur les notions de Services et de Recherches.

Comme lors de la première session, les fichiers PDF des interventions ont pu être mis en ligne pour les membres de RECIPROCS moins de 3 semaines après la session par Thierry ROISNEL (Rennes). Les comptes-rendus des discussions se trouvent ci-après avec les comptes-rendus des cinq tables rondes qui ont eu lieu ensuite sur :

- « Méthodes de travail »
- « Informatique appliquée à la Cristallographie Structurale »
- « Communication »
- « Organisation d'évènements »
- « Site web »

Ces tables rondes achevaient le tour complet de toutes les facettes du métier de Cristallographe Structuraliste. Il ne restait plus qu'à aborder l'organisation de RECIPROCS avant de conclure.

II. Table ronde « Bases de Données »

Plusieurs types de Bases de données sont disponibles :

CSD
FIZ
Brookhaven

Accès via le site de l'INIST, site web ou CDROM via l'INIST.

CSD :
Une licence pour un poste après demande auprès de l'INIST puis licence multi-site (>1000 £) ou licence de poste supplémentaire (70 £).
L'offre multi-site apparaît peu attrayante car on peut mettre une licence sur un serveur interrogeable par le réseau. Mais pour un coût équivalent, la CSD propose un accès WEB simplifié (en place dans le Royaume-Uni). But : rendre la consultation de la base plus populaire auprès des chimistes. Un des avantages est la mise à jour hebdomadaire contre trimestrielle de la base. Le côté positif d'un tel accès via internet est d'avoir accès à la structure de partout : c'est intéressant lorsqu'on travaille à distance, sur grands instruments.
Inconvénients : moins d'informations par le web.
Mais un tel accès permet il d'obtenir autant d'informations qu'un accès traditionnel ? Y a-t-il risque d'une connexion ralentie par le web ? (c'est le cas si on interroge la base via le site de l'INIST)

Suggestions :

- Demande de licence groupée nationale via le réseau ?
- Demander à l'INIST une licence multi-site par labo gratuite ?
- Le réseau pourrait-il demander à l'INIST plus d'une licence gratuite ? Un accès WEB facilité ?
- Appel à la négociation avec l'INIST : voir avec Jean-Claude DARAN (AFC).

Lors d'un dépôt à la CSD, si au bout de 3 ans, la structure n'a pas été publiée dans un journal, la CSD demande si on veut faire un « Private Communication ». Il possible d'accepter ou de refuser.

Avec la CSD, on a accès à de nombreux logiciels et notamment à :

Mercury

Griefs et souhaits :

- Il n'est pas possible de sauver les vues au format PostScript.
- Version gratuite au potentiel fortement amoindri par rapport à la version « payante » via le CD.
- On peut vérifier la validité de la géométrie et il y a beaucoup de fonctionnalités différentes.
- Il serait intéressant d'avoir des séminaires de la part de développeur de la CSD. A mettre à l'ANGD satellite de l'AFC en juillet 2010 ?

ICSD (FIZ en Allemagne ou NIST aux US)

Griefs et souhaits :

- Coût 800€ puis 300€ tous les six mois avec mise à jour. Version de démonstration sur moins de 5% des données totales.
- Pourrait-il y avoir une convention avec l'INIST ? Voir avec Jean-Claude DARAN (AFC).
- Cette base est moins "verrouillée" que la CSD. CD pouvant être copié sur tous les postes ou pouvant être mis sur un serveur.
- Il y a un accès Web via l'ILL.

Bases de données protéines : bases gratuites car financement gouvernemental américain (PDB).

Pour les échantillons polycristallins :
Licence monoposte, l'accès est très restrictif.
PDF2 et PDF4 : la licence multipostes est hors de prix pour le 1er poste puis 10% par poste.
Mise à jour annuelle hors de prix également. Ceci provient du fait que tous les fournisseurs de données sont rémunérés.
250000 à 350000 spectres dans la base, mais il y a beaucoup de doublons.
Option composés organiques : payante et très chère.
Les laboratoires de référence (comme Rennes) ont la possibilité de fournir (avec rémunération) des diagrammes expérimentaux avec indexation afin de compléter la base de données : permet de rentrer dans ses frais sans bénéfices, mais c'est un cas très particulier.

Question à mettre en avant suite à la table ronde : Est-il possible de mettre un champ obligatoire dans le CIF « Personne ayant réalisé la structure » ? Cela permettrait que le cristallographe soit toujours associé et reconnu même s'il ne fait pas partie des auteurs des publications.
A ce jour, il est possible d'introduire la mention « Personne faisant le dépôt » (ce champ est accessible en clair pour les utilisateurs de WingX).
Une des premières actions du réseau pourrait être de porter cette demande de champ cif au niveau de l'IUCr via l'AFC (ce champ pourrait être rendu obligatoire par le checkcif).

III. Gestion

Discussion ayant suivi la présentation de Magali Allain (Angers) :

La facturation au temps réel qu'elle a présenté n'est pas mise en pratique dans son laboratoire. Le mode de fonctionnement est plus « souple » :

Afin d'avoir un suivi et ainsi de gérer au mieux les demandes d'analyse, une fiche par composé signée par le chef de service est demandée avant tout travail. Cette fiche est archivée dans un classeur lorsque l'analyse est terminée avec annotations : désordre, façon dont le cristal a été traité, informations sur l'affinement de structure, …

Un recensement des coûts a alors été réalisé :

- Environnement de travail : amortissement sur 30 ou 50 ans pour les bâtiments.

On peut également rajouter les frais de gestion : coût et entretien du bâtiment en fonction de la surface de la pièce où est localisé l'appareil + électricité + eau + chauffage.

- Facturation de l'azote : 1€/l et 1l /heure donc 1 € de l'heure.
- Taux horaire de travail pour l'agent (ex : IE : 45€ /heure).
- Frais de gestion.
- Amortissement de l'équipement : Appareil amorti sur 10 ans (1an = 200 jours) ce qui permet de remonter à un coût par an et à un coût horaire (3,75€ /heure).
- Coût de maintenance.

La participation à l'achat de l'appareil par le membre fondateur (université) à hauteur de 10% du prix total de l'appareil induit une diminution des coûts.

Exemple de critères utilisés pour un prix calculé au « plus juste » :

- Temps de prise en charge d'un cristal : ≈ 30 minutes.
- Détermination de la maille : temps de mise en place du cristal sur le diffractomètre + lancement du logiciel.
- Prix pour :
    * Membres fondateurs : -10 %,
    * Hébergeur (université) : maintenance,
    * Laboratoires publics régionaux : maintenance + environnement de travail,
    * Etablissements privés : maintenance + environnement de travail + amortissement.
- Pour l'appareil le plus ancien : coût moindre.

Joël JAUD a alors présenté son expérience sur Toulouse :
Le service est financé à 50% par le laboratoire et à 50% par une facturation interne aux différents groupes du laboratoire. Dans le cas de prestations pour l'extérieur, la même facturation qu'en interne est appliquée. Il n'y a pas non plus de différence de tarif si le nom du cristallographe apparaît sur la publication ou non.
Pour les poudres : 30 €.
Pour les monocristaux : 120-150 € / structure (dépend du nombre d'atomes).

IV. Réglementation

Discussion ayant eu lieu au cours de l'intervention interactive du groupe de travail « Réglementation ».

N.B. Les règles de publication concernant assez peu ce groupe et étant très éloignées de la radioprotection, il a été décidé par les participants de confier ce travail à un groupe plus proche de ces thématiques, le choix s'est porté sur le groupe de travail « Bases de Données » qui devient donc le groupe de travail « Bases de Données et Contraintes Editoriales ».

La réglementation internationale est en train de changer. La norme française 74-100, la norme allemande et la norme espagnole devraient être fondues dans un même texte pour le milieu de l'année 2010.
Tous les nouveaux diffractomètres Bruker ont la norme 74-100. Pour les autres (KappaCCD, D5000), Veritas doit certifier les appareils. Il faut exiger des constructeurs de fournir cette norme.

Norme 15-160 (payante) : comprend entre autres (avec les normes d'installations électriques) l'étude de poste. C'est la PCR qui doit faire l'étude de poste.

Il faut être PCR pour être autorisé à travailler : cela pose la question de la reconnaissance de la qualité de PCR par les employeurs.

Il est suggéré de faire un sondage ou un état des lieux sur les autorisations ou demandes en cours auprès de l'ASN dans les différents laboratoires.

L'ASN comme la douane peut intervenir immédiatement sur tout le territoire et faire fermer un laboratoire.

Lors du dépôt du dossier de demande d'autorisation de détenir et d'utiliser des générateurs électriques de rayonnement ionisants auprès de l'Autorité de Sûreté Nucléaire (ASN), si on n'obtient pas de réponse au bout de 6 mois, cela ne veut pas dire que l'autorisation est acquise, au contraire c'est que la réponse est négative. Il faut donc appeler régulièrement l'ASN et ne pas attendre les 6 mois pour savoir où en est le dossier.

Si le dossier est préparé par l'APAVE ou Veritas, ils envoient simplement un document certifiant que l'appareil « peut fonctionner ». Le dossier a alors plus de chance d'être accepté.

Si le diffractomètre est « capoté », il n'y a pas besoin de lumière à l'extérieur de la pièce.

Dosimètres : les dosimètres mensuels peuvent servir de mesure d'ambiance.

Via le réseau, il serait bon de mettre en commun les dossiers. Ruben Vera propose de mettre en ligne la version pdf modifiable du formulaire.

V. Résolution structurale

Le choix du groupe de travail « Résolution structurale » s'est porté sur l'étude de macles. Deux interventions très pointues ont été présentées :

Isabelle Gautier-Luneau a présenté la "Résolution d'une macle pseudo-mériédrique".

Thierry Roisnel a ensuite présenté le cas du "Maclage non mérohédrique : utilisation de EVALCCD (Nonius)".

VI. Méthodes de pointes

Ce groupe de travail n'a malheureusement pas fonctionné. Un débat s'est engagé pour savoir si le cadre de ce groupe n'était pas un peu trop fermé et s'il ne convenait pas de l'élargir aussi à une rubrique « nouveautés, méthodes avancées » (travail hors routine en général). Cette motion a été adoptée.

Les participants ont décidé également de couper ce groupe de travail en 2 ensembles, en distinguant la partie instrumentation de la partie résolution structurale et que ces ensembles soient intégrés aux groupes de travail « Instrumentation » et « Résolution Structurale ».

VII. Formation

Ce groupe n'a malheureusement pas fonctionné. Il est pourtant d'une importance extrême pour le réseau. Toutefois, il faut noter que le débat qui a été lancé sur ce sujet lors de ces journées a été très riche et à conduit aux réflexions suivantes :

Il y a plusieurs types de formation :
- Professionnelle / Interne
- Académique
- Echanges inter laboratoires
- Sensibilisation

Formation professionnelle / interne

- Une formation en communication stratégique a été demandée pour 2010.

- Jana 2006 propose des workshops ayant lieu à Prague (dès 5 personnes inscrites).

- RECIPROCS pourrait proposer des formations plus techniques, pointues en complément des formations déjà données par les autres organismes comme des formations sur la densité de charge, comment traiter le désordre, …
Il est possible d'organiser une action sur plusieurs jours sur une technique bien précise.

Formation académique

- L'AFC a lancé une grande discussion afin de mettre sur pied un M2 au niveau national (pour petites molécules, grosses molécules biologiques, …).
Nancy est également en train de lancer un M2 au niveau européen.
Lors du prochain colloque AFC en Juillet 2010, une session sera consacrée à l'enseignement de la cristallographie. Lors de cette table ronde, il serait bien que RECIPROCS soit présent pour aider à trouver une solution.
RECIPROCS pourrait donc apporter un soutien logistique pour la mise en place de ces formations.
RECIPROCS pourrait également contribuer à la formation pratique des étudiants dans le cadre d'un M2.

- Existence de formation à destination des thésards dans le cadre d'écoles doctorales.
Par exemple, l'école doctorale Nantes-Angers-Le Mans propose une formation « La diffraction X pour tous » sur 2 jours pour 10-15 thésards : poudres, monocristaux, résolution de structures avec WingX.

Echanges inter laboratoires

Stage dans un autre laboratoire pour se spécialiser ou intervenant d'un autre laboratoire venant sur site. Les échanges inter laboratoires : bonne idée mais sur quels budgets ?

Divers

Thierry Roisnel (Rennes) se charge de recenser les compétences et spécificités des adhérents (qui seront mis en complément du recensement des équipements dans le projet RECIPROCS).

Il faudrait que les annonces de formations soient répertoriées et diffusées par RECIPROCS.

Le groupe de travail aurait besoin d'un coordonnateur afin de recenser les besoins en formation et de mettre en place les actions nécessaires pour y répondre. Corinne Bailly, s'est proposée quelques jours après la session pour effectuer ce travail.

Suggestion

On pourrait demander à ce que les différents membres du réseau mettent en signature de leurs e-mails l'adresse internet de la page de l'OMES présentant le réseau RECIPROCS : http://metiersit.dsi.cnrs.fr/index.php?page=ReseauMetiers&codeBap=B

VIII. Instrumentation / Services et Recherche

Les interventions des groupes de travail « Instrumentation » et, « Services et Recherche » ont été pour l'occasion (faute de participants suffisamment nombreux dans ces deux groupes) fondues en une seule. Toutefois, les participants ont signalé qu'ils souhaitaient maintenir ces 2 groupes de façon bien distincte à l'avenir. Pour la deuxième session, ces groupes s'étaient mis d'accord et avaient choisi une intervention en interaction avec l'auditoire sur : Services et Recherches.

Voici en plus de l'intervention disponible sur Internet quelques interventions résumées :

La cristallographie est plus qu'une technique, elle a donc besoin de chercheurs et pas uniquement d'ingénieurs. Il est donc nécessaire que RECIPROCS fasse comprendre aux instances que la cristallographie est une science et pas seulement une technique.

Erwann Jeanneau à Lyon forme les thésards, mais la part de formation est limitée car il y a de plus en plus de demandes de structures.

Dans les services, si les IR n'ont plus le temps de former les étudiants et si les directeurs ne veulent plus que les étudiants se forment à la cristallographie, il y a alors pertes des connaissances.

En France, l'activité cristallographique se fait de plus en plus dans les services car il y a de moins en moins d'équipes de recherche en cristallographie.

Pour beaucoup de cristallographes dans ces services, la cristallographie est le 2nd métier. Les personnes se disent chimistes faisant de la cristallographie ou biologistes faisant de la cristallographie, … Ce fait souligne un réel problème ! Notons qu'en informatique, matière où l'on pourrait rencontrer des problèmes d'identité identiques aux nôtres, les personnes se désignent avant tout comme informaticiens. Par la suite ils présentent leur spécialité : informaticiens faisant de la gestion, informaticiens faisant du calcul scientifique, … Il est nécessaire que chacun des membres de RECIPROCS soit prêt à revendiquer et défendre le titre de cristallographe.

Pourquoi parle-t-on de services et pas de collaborations ? Car de nombreuses personnes pensent que la cristallographie est « presse-bouton ». Il faut donc plus communiquer sur notre métier. Par exemple lors de manips à l'ESRF, ou d'autres grands instruments, on repart avec les données brutes et si on n'a pas les compétences en cristallographie, on n'arrivera pas à résoudre la structure. L'ESRF ne peut donc pas se passer des cristallographes de laboratoires CQFD.

RECIPROCS doit communiquer sur l'intérêt de la cristallographie et de conserver un savoir-faire. Il faut donc plus parler de l'aspect recherche.

La dénomination de Service = étiquette péjorative. A remplacer plutôt par Recherche Appliquée, plateforme, …

Les thésards sont-ils de moins en moins formés car les services sont finalement trop efficaces (travail réalisé de A à Z) ?

Il est néanmoins primordial que les services soient composés de plus d'une personne afin de pouvoir échanger sur des problèmes particuliers et assurer la pérennité de ces plateformes.

IX. Table ronde « Méthodes de travail »

Manipulation des cristaux :
Comment récupérer des cristaux se trouvant dans le solvant ? Avec de la graisse souvent sur un scotch repositionnable.

Matériels utilisés pour le tri des cristaux :
- Boîtes de Pétri

Outils pour manipuler les cristaux :
- Aiguilles d'acupuncteur
- Pic de dentiste (mais pas assez pointu)
- Fil de cuivre électrique dénudé
- Aiguille à coudre collée au bout d'un coton-tige

Outils pour couper les cristaux :
- Lames de rasoir
- Pointe d'inox écrasé et poli afin d'obtenir de petits couteaux

- Dumont pince n°5

Hampton Research commercialise une boîte de micro-outils (chère mais pratique !).

Montage du cristal sur la tête goniométrique
Plusieurs systèmes sont utilisés :
- tiges en verre ou aiguilles de cactus
- capillaires en verre
- cryoloops
- plumes : plus difficile à nettoyer que les cryoloops mais plus stables

Afin de « coller » le cristal, utilisation de :
- Araldite
- Graisse
- Paratone ou huile Fombrin (commercialisé par Solvay Solexis) avec les cryoloops.

Ciment dentaire (ne diffracte quasiment pas) pour les cristaux fragiles se dissolvant dans la colle.

Suggestion : l'huile de boîte de moteur (90-40) pourrait être testée afin de remplacer la Paratone moins onéreuse).

Afin que le cristal soit collé dans une bonne position, on peut laisser sécher la colle en mettant le cristal la tête en bas (utilisation de pâte à modeler).

Pour éviter le givrage, induire la tige (ou l'aiguille de cactus) de fart à ski après avoir collé le cristal.

Tige de verre plantée dans de la cire placée sur un petit rivet.

Pour les mesures à hautes températures
Utilisation de soufflettes haute température.
Les colles hautes températures microcristallisent et sont donc inutilisables. Utilisation à la place d'un genre de ciment réfractaire.

Insertion du cristal dans un capillaire de quartz. Le cristal est ensuite bloqué par des morceaux de quartz.

Il existe également des soufflettes azote pouvant monter jusqu'à 500K.

Cahier de laboratoire

Cahiers de laboratoire signés (contraignant et pas toujours adapté).
Les e-mails peuvent servir de cahier de labo (avec compositions chimiques, formules, …).

Automatisation des données se référant à un cristal :

Ruben Vera (Lyon) va créer un script pour diffractomètre Oxford afin d'avoir automatiquement dans un fichier le nom, les paramètres de maille, …

CrysAlis génère automatiquement un fichier CIF avec les paramètres de maille, les symétries, …

Mode de facturation :

Nancy : facturation par lots pour les poudres et au cas par cas pour les monocristaux

Lyon : 3000 spectres de poudres / an : automatisation pour dénombrer le nombre de spectre par labos/équipes, …

Suggestions des participants

Mettre des liens vers les fournisseurs sur le site web de RECIPROCS.
Faire une présentation de la base de données locale CSD lors de la prochaine réunion de RECIPROCS.

X. Table ronde « Informatique appliquée à la cristallographie »

Kappa CCD
Lors de l'installation de supergui sous Fedora 10 il manque des librairies. Pierre-Emmanuel Petit (Nantes) a réalisé un mode d'emploi qui se trouve sur le site de Nonius. Les librairies d'origine sont à laisser sous /usr/local.
Pierre-Emmanuel Petit se propose pour aider les personnes ayant des problèmes d'installation pour le Soft.
Supergui peut également être installé sous OpenSuse.

Suggestion : en cas de nécessité, faire héberger par RECIPROCS une copie du site de Nonius (avec l'accord de Bruker), afin de se prémunir d'une possible disparition du site.

Suite APEX II
Existence d'une base de données qui ralentit le système quand la base de données devient importante. Une des solutions : l'effacer.

Logiciel d'Oxford
Il existe des petits bugs, mais le soft est rapidement mis à jour.
Ce soft est le même pour tous les diffractomètres Oxford.
Les mises à jour sont gratuites.
Pas de problèmes de calibration, de taille d'image.
Possibilité d'installer sur son poste de travail une version (sans les options permettant de commander le diffractomètre) pour la réduction de données. Possibilité de faire l'installation sur différents postes de travail (pas de restrictions).

Dark
Le dark peut se faire après chaque image ou chaque scan : possibilité de régler la fréquence du dark.
Différence Dark-Blanc :
Le dark se fait avec l'échantillon, sans la source, obturateur fermé.
Le blanc se fait sans l'échantillon, avec la source, obturateur ouvert.

Mode de sauvegarde des données : DVD, CD, disque dur externe.

Programmation Scripts
CFML – Yoann Rodriguez – petits modèles.
L'IDRIS propose des formations Fortran.

Shelx et WingX
Shelx peut-être parallélisé.
La source de Shelx est libre, elle peut donc être compilée sous PC.
Possibilité de télécharger les compilateurs sur la page internet d'Intel.

Dans la dernière version de WingX, il faut récupérer la version de Shelx sur le site de Sheldrick et l'interfacer dans WingX.

WingX permet de rajouter facilement une option dans les menus en rajoutant des liens.

Platon
Nouvelles versions très régulièrement.

Affichage 3D

Logiciels :

- Coot 3D (Crystallographic Object-Oriented Toolkit) pour les macromolécules
- Discovery 3D

Fournisseurs :

Pixel Tech : fournit des lunettes 3D, des écrans stéréo, …

XI. Table ronde « Communication »

Thierry Bataille et Philippe Benas s'étaient proposés dès la première session pour s'occuper de ce groupe de travail à venir. Ils ont dirigé une discussion interactive autour d'une présentation. Voici ce qui y a été dit.

Il est important de communiquer auprès des tutelles et des sociétés savantes : Association Française de Cristallographie naturellement, mais aussi Société Chimique de France, Société Physique de France, … en plus de la communication tournée vers le grand public.

Il faut commencer par communiquer sur ce qui se fait de bien dans les laboratoires. Non seulement par le biais de publications mais également par des articles dans les communiqués du CNRS, le journal du CNRS, CNRS-Hebdo ainsi que dans des journaux de vulgarisation scientifique.

Publications :

Réaliser des publications purement cristallographiques. Problème : le facteur d'impact d'Acta est de 0.8, donc intérêt des cristallographes à publier avec des chimistes dans des journaux à fort facteur d'impact. Les structures non publiées pourraient paraître dans Acta afin de ne pas pénaliser les chercheurs.

Advanced Materials et Chemicals Materials acceptent des articles avec démonstration plus « technique ».

Idées de communication :

Participation à la Fête de la Science et à d'autres manifestations.

Journées thématiques organisées par le réseau à destination d'autres personnes.

Réalisation d'un film de 3 minutes (qui pourrait tourner en boucle sur le site Web) avec des photos marquantes.

Réalisation de Tee-shirts RECIPROCS (soucis d'identification des membres du réseau dans les congrès), …

Site Web :

Plaque tournante du réseau.

La 1ère page est importante.

Hébergement du site par l'Institut de Chimie avec des liens depuis les autres instituts ?

Une annonce sera faite par Philippe BENAS au GTBio afin de présenter RECIPROCS à la communauté des cristallographes structuralistes des macromolécules.

XII. Table ronde « Organisation d'évènements »

ANGD demandée pour 2010
Une formation en communication stratégique qui aurait lieu à la fin du printemps 2010 si l'ANGD est acceptée. Il serait bien que chaque groupe de travail y envoie au moins 1 personne.

Colloque AFC et journée satellite RECIPROCS en Juillet 2010
Le colloque de l'AFC ayant lieu à Strasbourg du 07 au 10 juillet 2010, une journée RECIPROCS aurait lieu en satellite le 06 Juillet 2010. Il faudrait donc commencer à penser au programme de cette journée pour le mois de mars.
Afin de prévoir l'hébergement du mardi soir, il faudrait fixer la date limite de réponse vers la fin Mars. L'hébergement sera à la charge des laboratoires.
Lors du congrès de l'AFC représenter la partie RECIPROCS par poster, communications orales, tenu d'un stand avec posters, plaquettes, logo RECIPROCS, …

ANGD 2011
La date de dépôt de dossier d'ANGD pour 2011 est en Septembre 2010. Il faut donc réfléchir sur la forme de cette ANGD : 2 jours ? A Paris ou dans un autre lieu ? Pour combien de personnes ? Il faudra une réponse à Strasbourg.

Workshops
Comment financer un workshop ? Financement CNRS, financements industriels, frais d'inscription, sponsors, …

Manifestations
Participer à des manifestations locales (Fête de la Science, …) au nom de RECIPROCS.
Contribuer à l'exposition « Voyages dans le cristal » lorsqu'elle a lieu dans notre ville.

XIII. Table ronde « Site Web »

Format du site Web :

Pages statistiques : présentation du réseau, présentation du métier de cristallographes, news, méthodologie, …

Pages dynamiques : forum + wiki (ou autre) pour le bilan du forum

Un intranet est plus compliqué à mettre en place (Pierre-Emmanuel Petit peut se renseigner auprès des informaticiens de son laboratoire).

En attendant d'avoir un site web, il serait intéressant d'avoir une liste de diffusion. Lydia Brelot peut se renseigner pour savoir si Strasbourg peut héberger la liste de diffusion avec modérateur ? Si ce n'est pas possible, Ruben Vera peut se renseigner pour Lyon.

Il faudrait commencer à réfléchir sur le contenu des pages en attendant l'officialisation du réseau et l'accord pour un site Web sur la base de la charte graphique du CNRS.

Pour mettre en place le site Web, il faut que les groupes de travail « Communication » et « Site Web » travaillent ensemble.

XIV. Organisation

Voici en résumé les points majeurs abordés au cours des discussions sur ces sujets :

Groupes de travail :

Gestion : Le groupe continu à l'identique.

Réglementation : Ce groupe se consacre désormais pleinement à la radioprotection, la partie publications étant attribuée au groupe « Bases de données ».

Bases de données : Le groupe essaiera de travailler aux conditions d'accès aux différentes bases de données. Pourrait-il aussi essayer de faire ajouter ou supprimer des champs dans les bases de données ? Ces 2 points doivent être abordés conjointement avec l'AFC. Le groupe devrait aussi faire de la veille dans ces domaines.

Les participants ont décidé de lui adjoindre l'aspect réglementaire des publications (checkcif, etc.…)

Résolution Structurale : Il serait bien que la diffraction par les poudres soit abordée par ce groupe dans une prochaine réunion. Les participants ont décidé de rajouter une partie méthodes de pointe en résolution structurale.

Instrumentation : De même, les participants ont décidé de rajouter une partie méthodes de pointes pour l'instrumentation.

Service et Recherche : C'est un groupe de réflexions plus stratégiques qui doit aboutir à des actions de communication.

Formation : Le groupe a besoin d'un coordonnateur pour les besoins en formations professionnelles du réseau. Corinne Bailly s'est portée volontaire pour ce rôle.

Méthodes de travail : Comment rendre possible les échanges inter laboratoire ? Ce groupe peut aller jusqu'à la normalisation de procédures.

Informatique appliquée à la cristallographie structurale : Ce groupe est chargé de plusieurs choses : l'aspect pilotage des diffractomètres, un aspect plus logiciel, la réalisation de scripts.

Organisation d'événements : Ce groupe est non permanent : il est constitué d'un petit comité d'organisation créé pour la mise en place de chaque réunion et dissout par la suite.

Site Web : Ce groupe de travail doit fonctionner de manière intime avec la communication.

Actions pour 2010

Une Action Nationale en communication stratégique a été demandée auprès de l'Institut de Chimie. Si celle-ci est acceptée, il serait bon que chaque groupe de travail y envoie au moins une personne.

RECIPROCS est complémentaire de l'AFC et pour favoriser les synergies avec notre société savante, une réunion satellite du colloque de l'AFC aura lieu à Strasbourg le 6 Juillet.

Les participants proposent la périodicité suivante pour des actions du réseau : 2 fois / an (dans l'idéal tous les 6 mois) ou 1 fois / an + workshop (ou autre). Lors des réunions, il faut prévoir un retour des groupes de travail (la moitié des groupes par session et suivant l'avancée de leurs thèmes) ainsi que du temps libre afin de laisser du temps aux autres groupes de travail pour discuter et échanger.

Attractivité vis-à-vis des chercheurs

Constat : lors de cette 2ème session, le pourcentage de chercheurs présents a diminué de près de moitié. D'après les participants, cela est dû à un problème de disponibilité (les enseignants-chercheurs ayant du mal à décaler leurs enseignements). Il manque peut-être également certaines thématiques de recherche. Le recensement des spécificités au sein du réseau permettra de le vérifier.

Dossier de reconnaissance officiel par le CNRS

La mise à jour du jour du dossier actuel avec rajout des spécificités (méthodologie, thématique) doit être entreprise dans ce but. Ce dossier doit être complété par le rajout des différentes communautés de cristallographes structuralistes qui nous rejoindront après élargissement. Le présent Compte-rendu de l'ANGD 2009 y sera joint ainsi que le projet pour l'an prochain. Les statistiques seront complétées et mises à jour en collaboration avec l'OMES.

Conseil

Un conseil de réseau sera créé après la reconnaissance officielle du réseau par le CNRS. Pour l'instant le mode de fonctionnement actuel est prolongé.

Elargissement

Les participants décident d'élargir le réseau à toutes les composantes de la Cristallographie Structurale française: minéralogie (Pierre Emmanuel Petit prendra contact), macromolécules (Philippe Bénas prendra contact au cours du GT Bio) ou physique, ceci, quels que soient les statuts ou les appartenances (EPST, industriels (Joël Jaud prendra contact), etc.).

XV. Bilan de l'évaluation et conclusion

L'évaluation ci-dessous a été faite sur 21 questionnaires retournés, elle montre que les participants se sont approprié leur réseau et qu'ils ont commencé à s'investir dans les groupes de travail. L'évaluation montre également les attentes des membres et notamment la nécessité d'un site web interactif, chose qui n'est pas réalisable à l'heure actuelle puisque le réseau n'est pas encore reconnu officiellement par le CNRS.

Comme lors de la première session, les suggestions seront prises en compte.

L'avenir immédiat passe dans un premier temps par la réalisation d'un nouveau dossier pour permettre la reconnaissance officielle du réseau ainsi que par la gestion de l'élargissement du réseau aux autres composantes de la Cristallographie Structurale.

Groupes de Travail actualisés

Réglementation Nicolas BARRIER Pascal BOULET Olivier LEYNAUD Pierre-Emmanuel PETIT Pascal RETAILLEAU Arie VAN DER LEE Ruben VERA	**Gestion** Erwann JEANNEAU Stéphane MASSIP Olivier PEREZ Christian PHILOUZE	**Instrumentation** Joël JAUD Brice KAUFFMANN Olivier LEYNAUD (aide ponctuelle) Olivier PEREZ Emmanuel WENGER **Méthodes de pointes** David FLOT Brice KAUFFMANN Olivier LEYNAUD (aide ponctuelle) Emmanuel WENGER
Résolution Structurale Nicolas BARRIER Thierry BATAILLE Lydia BRELOT Isabelle GAUTIER-LUNEAU Christian JELSCH Brice KAUFFMANN Olivier LEYNAUD (aide ponctuelle) Thierry ROISNEL Laure VENDIER **Méthodes de pointes** Pascal ROUSSEL	**Organisation d'événements** Thierry PRANGE Yoann ROUSSELIN	**Formation** Corinne BAILLY Nathalie DUPONT Enrique ESPINOSA Joël JAUD (aide ponctuelle)
Service et Recherche Magali ALLAIN Pascal BOULET Michel GIORGI Luc ORTEGA Stanislav PECHEV Olivier PEREZ Emmanuel WENGER	**Bases de données et contraintes éditoriales** Jean-Claude DARAN Michel GIORGI Luc ORTEGA Pascal RETAILLEAU	**Méthodes de travail** Jean-François LOHIER Stanislav PECHEV Emmanuel WENGER
Informatique appliquée à la cristallographie Philippe BENAS (aide ponctuelle) Pierre-Emmanuel PETIT Thierry ROISNEL	**Site Web** Carole BARBEY Nicolas GUIBLIN Thierry ROISNEL Yoann ROUSSELIN	**Communication** Carole BARBEY Thierry BATAILLE Philippe BENAS

Délégation Centre-Poitou-Charentes
Comité d'organisation scientifique & bureau Formation Permanente

Bilan Questionnaire ANGD
RECIPROCS : 12 & 13/11/09
(bilan réalisé sur 21 questionnaires)

Nom, prénom :

Statut : **12** - IR **3** - IE **1** - Tech **2** - CR **1** - Pr **2** - MCF

******

1. Merci de préciser les présentations qui vous ont le plus intéressé (par ordre croissant, vous pouvez indiquer 1 ou plusieurs thèmes appréciés de façon ex aequo) :

Liste des présentations les plus appréciées par ordre décroissant

Résolution structurale
Table ronde : méthodes de travail
Table ronde : informatique appliquée à la cristallographie structurale
Instrumentation / Services & recherche
Gestion
Table ronde : base de données
Table ronde : site Web
Organisation : Elargissement, perspectives, statuts
Réglementation
Méthodes de pointes
Formation
Table ronde : communication
Table ronde : organisation d'évènements

2. Que pensez-vous de l'organisation ?

	Très Bien	Bien	Satisfaisant	Moyen
des espaces d'échanges informels	**14**	**5**	**1**	**0**
de la durée/chaque thème abordé	**12**	**7**	**0**	**0**
de la durée globale	**13**	**7**	**0**	**0**
de l'accueil	**15**	**4**	**0**	**0**
des repas & hébergement	**9**	**8**	**3**	**0**
du lieu	**8**	**9**	**2**	**0**

3. Ce module complémentaire va-t-il suffire à la mise en place du réseau ? Pourquoi ?

Oui **15**

Mise de contact plus importante mais nécessite encore un effort.

Non **3**

Encore un peu flou. Une autre séance pour finir de définir clairement les objectifs.
C'est un long processus haletant et passionnant de travail. Il faut persévérer.
Il faut une reconnaissance du CNRS.

On verra bien **1**

4. Ce module complémentaire était-il nécessaire ? Pourquoi ?

Oui **17** Non **0**

1 - Concrétisation du réseau et prise de conscience de sa nécessité.
1 - Pour la structuration du réseau.
6 - Afin de préciser le rôle, les missions et les objectifs des groupes de travail et de RECIPROCS.
2 - Pour pouvoir aborder tous les thèmes nécessaires à la mise en place du réseau RECIPROCS.

1 - Tous les groupes de travail ont pu faire part de leurs réflexions à l'ensemble des participants et avancer par l'échange.
1 - Continuité des choses mises en place lors de la 1ère session.

3 - Pour mieux connaître ses interlocuteurs afin de lancer l'activité des groupes de travail.
1 - Pour nouer des liens.
1 - Pour mieux interagir.
1 - Pour la motivation du groupe.

1 - Pour recenser les personnes prêtes à s'investir.

1 - Groupe plus restreint avec des meilleurs échanges.
1 - Echanges intéressants.

1 - Car n'ayant pu assister à la 1ère session pour une question de chevauchement de dates.

5. Si vous êtes membre d'un groupe de travail : quelles difficultés avez-vous rencontrées pour la mise en place de celui-ci ?
5 - Manque de temps.
1 - Manque de disponibilité.

1 - Pas si facile de se mobiliser suffisamment longtemps à l'avance : peut-être essayer de mettre en œuvre un planning.

1 - Manque de communication.
1 - Echange d'informations par mail. Manque de contact direct avec les collègues.
1 - Ne connaissait pas les autres personnes du groupe de travail.

1 - Manque de prise d'initiative.

1 - Difficultés à réagir rapidement et à décider ensemble.

1 - Manque de motivation.

1 - Sujet (méthodes de pointes) très vaste, à recadrer.

1 - Groupes de travail Communication et Organisation d'évènements : inertie initiale imposée par la mise en place nécessaire des actions.

6. Si vous n'êtes pas membre d'un groupe de travail souhaitez-vous vous investir dans un des groupes suivants ?

☐ Réglementation ☐ Gestion ☐ Instrumentation ☐ Résolution Structurale
☐ Méthodes de pointes ☐ Formation ☐ Service et Recherche

Des personnes supplémentaires se sont proposées pour s'investir dans un ou plusieurs de ces groupes de travail (voir composition des groupes de travail).

7. Souhaitez-vous vous investir dans un des nouveaux groupes de travail ?

☐ Bases de données ☐ Méthodes de travail ☐ Informatique appliquée à la cristallographie
☐ Communication ☐ Site Web ☐ Organisation d'événements
☐ Autre (Précisez)

Des personnes souhaitent s'investir ces nouveaux groupes de travail (voir composition des groupes de travail).

8. Avez-vous des suggestions afin d'améliorer le fonctionnement des groupes de travail ?
2 - Mettre en place un forum de discussion sur le site web, une boîte à idée ou une liste de diffusion pour communiquer entre nous.

1 - Désigner un animateur par groupe.

1 - Ne pas forcément aborder tous les thèmes à chaque fois mais approfondir des sujets donnés.

1 - Laisser plus de temps libre pour favoriser les échanges et la synthèse des tables rondes par les petits groupes de travail.

1 - Il faut laisser le temps au temps …

9. Quelle périodicité souhaiteriez-vous pour les réunions du réseau ?
7 - 2 fois / an (dont **4** – tous les 6 mois)
1 - 1 fois / an + 1 journée thématique
8 - 1 à 2 fois /an
2 - Tous les 9 mois
4 - 1 fois / an

10. Avez-vous des attentes spécifiques vis-à-vis du réseau ? Si oui, lesquelles ?
2 - Reconnaissance et évolution du métier de cristallographe.

1 - Rôle d'information, de conseils.
1 - Un soutien et une aide dans l'exercice du métier.
1 - Echanges d'informations avec les collègues.
3 - Echanges sur des problèmes communs, entre aide face à des problèmes spécifiques.
1 - Des améliorations pour le travail.

1 - Mise en relation, échanges entre labos, échanges de savoir-faire.
1 - Diffusion des savoirs faire, des astuces.

1 - Nouvelles connaissances (méthodes, logiciels).

1 - Ateliers pratiques.

1 - Conférence sur diffraction RX par des nano particules.

1 - Parler plus d'instrumentation.

11. Dans le cadre du réseau, quels seraient vos besoins en formation ?
6 - Besoin en résolution structurale dont :
- **1** - Résolution structurale par la méthode d'entropie maximale.
- **1** - Méthodes de résolution dans les cas complexes.
- **1** - Diffraction de poudre : affinement structural par méthode de Rietveld.
- **1** - Résolution structurale sur poudre.

2 - Utilisation de logiciels dont :
- **1** - Nouveaux logiciels.
- **1** - Initiation à l'utilisation de certains logiciels (ex : Jana 2006).

2 - Méthodes de travail dont :
- **1** - Formation pratique sur des méthodes de travail (software ou autre).

1 - Aller dans un laboratoire pour apprendre de nouvelles techniques.

1 - Création et gestion de bases de données.
1 - Méthode de pointes.
1 - Informatique.
1 - Analyse chimique.

1 - Communication.

12. Connaissez-vous des cristallographes structuralistes absents du réseau qui seraient susceptibles d'être intéressés par RECIPROCS ? Si oui, lesquels ?
Une liste de noms a été communiquée.

13. Autres commentaires ou suggestions :
1 - Discussions réalisées très intéressantes dans l'ensemble.

1 - ANGD appréciée dans l'ensemble même si l'instrumentation a été peu abordée. Partie « résolution structurale » bien appréciée.

1 - Faire des sessions moins chargées à l'avenir (suggestion : la moitié des thèmes abordés par session).

ANGD : RECIPROCS : 12 & 13 novembre 2009

Une évolution du métier de Cristallographe Structuraliste

PROGRAMME *2ème Session : Rapport des ateliers et structuration*

1ère journée

09h45 – 10h30 Accueil
10h30 – 10h35 Introduction
10h40 – 11h25 Table ronde Bases de données
11h30 – 12h10 Gestion

Déjeuner

14h25 – 14h45 Réglementation
14h50 – 15h35 Résolution structurale
15h35 – 16h35 Méthodes de pointes

Pause

17h15 – 18h15 Formation
18h20 – 19h30 Instrumentation / Services et Recherche
19h35 – 20h00 Discussion libre

Dîner

2ème journée

8h00 – 9h00 Table ronde Méthodes de travail
9h05 – 10h05 Table ronde Informatique appliquée à la cristallographie structurale

Pause

10h35 – 11h35 Table ronde Communication
11h40 – 12h10 Table ronde organisation d'événements
12h15 – 12h40 Table ronde Site web

Déjeuner

15h00 – 16h00 Organisation : Elargissement, Perspectives, Statuts
16h05 – 16h10 Conclusion

Liste des participants à la 2ème session de l'ANGD de RECIPROCS (12-13 Novembre 2009)

ALLAIN Magali	magali.allain@univ-angers.fr	CIMA, ANGERS
BAILLY Corinne	Corinne.Bailly@ujf-grenoble.fr	DCM, GRENOBLE
BARBEY Carole	carole.barbey@smbh.univ-paris13.fr	CSPBAT, VILLETANEUSE
BATAILLE Thierry	thierry.bataille@univ-rennes1.fr	Sciences Chimiques de Rennes, RENNES
BENAS Philippe	philippe.benas@parisdescartes.fr	Laboratoire de cristallographie et RMN biologiques, PARIS
BOULET Pascal	pascal.boulet@mines.inpl-nancy.fr	Institut Jean-Lamour, NANCY
BRELOT Lydia	brelot@chimie.u-strasbg.fr	Institut de Chimie de Strasbourg, STRASBOURG
FAUVET Gérard	gerard.fauvet@bruker-axs.fr	BRUKER AXS
GAUTIER-LUNEAU Isabelle	isabelle.gautier-luneau@grenoble.cnrs.fr	Institut Néel, GRENOBLE
GUBLIN Nicolas	nicolas.guiblin@ecp.fr	Structures, propriétés et modélisation des solides, CHATENAY MALABRY
JAUD Joël	jaud@cemes.fr	CEMES, TOULOUSE
KAUFFMANN Brice	b.kauffmann@iecb.u-bordeaux.fr	IECB, PESSAC
LEYNAUD Olivier	olivier.leynaud@grenoble.cnrs.fr	Institut Néel, GRENOBLE
LOHIER Jean-François	jean-francois.lohier@ensicaen.fr	LCMT, CAEN
ORTEGA Luc	luc.ortega@grenoble.cnrs.fr	Institut Néel, GRENOBLE
PECHEV Stanislav	pechev@icmcb-bordeaux.cnrs.fr	ICMCB, PESSAC
PEREZ Olivier	olivier.perez@ensicaen.fr	CRISMAT, CAEN
PEREZ Philippe	p.perez@elexience.fr	ELEXIENCE
PETIT Pierre-Emmanuel	pierre-emmanuel.petit@cnrs-imn.fr	Institut des matériaux Jean Rouxel, NANTES
PHILOUZE Christian	Christian.Philouze@ujf-grenoble.fr	DCM, GRENOBLE
RETAILLEAU Pascal	pascal.retailleau@icsn.cnrs-gif.fr	ICSN, GIF SUR YVETTE
ROISNEL Thierry	thierry.roisnel@univ-rennes1.fr	Sciences Chimiques de Rennes, RENNES
SELKTI Mohamed	mohamed.selkti@univ-paris5.fr	Laboratoire de cristallographie et de RMN biologiques, PARIS
VERA Ruben	ruben.vera@univ-lyon1.fr	Centre de diffractométrie Henri Longchambon, VILLEURBANNE
WENGER Emmanuel	emmanuel.wenger@crm2.uhp-nancy.fr	CRM2, VANDOEUVRE LES NANCY