



Programme – vue d’ensemble

	Mardi 2 juillet	Mercredi 3 juillet
8h00	Enregistrement	
8h30	Ouverture/accueil	
9h00	CP1 chimie	CP2 physique
9h30		
10h00	Pause café et thé	
10h30	MS2	MS7
11h00	Cristallographie en	MS9
11h30	science des matériaux	Biologie et chimie pour
12h00		la santé
12h30	Assemblée Générale	
12h30	Pause déjeuner	
13h00		
13h30	Pause déjeuner	
14h00	Communication Malvern-Panalytical	
14h30	MS6	Prix de thèse
15h00	Multisources, multitechniques	
15h30		Affiches II - pause café et thé
16h00	Affiches I - pause café et thé	
16h30		MS1a/MS1b
17h00		Croissance cristalline
17h30	Prix Guinier	
18h00		
18h30		
19h00	Apéro dinatoire	
19h30		
20h00		Conférence grand public
20h30		



Programme – vue d’ensemble

	Jeudi 4 juillet	Vendredi 5 juillet
8h00		
8h30		
9h00	L'AFC invite (CCDC)	CP3 biologie
9h30		
10h00	Pause café et thé	Pause café et thé
10h30	MS3	MS13
11h00	Matériaux pour l'énergie	Cristallographie à
11h30	et la conversion	l'échelle nano
12h00	MS5/MS10	MS4
	Interaction et	Modélisation et
	reconnaissance	méthodes
	moléculaire, exposome	Clotûre
12h30	Communication Bruker	
13h00	Pause déjeuner	
13h30		
14h00		
14h30	MS11	
15h00	Enseignement et médiation scientifique	
15h30		
16h00		
16h30	Affiches III - pause café et thé	
17h00		
17h30	MS12	
18h00	Grands instruments	
18h30		
19h00		
19h30		
20h00	Soirée gala	
20h30		

Programme détaillé (mardi 2-7-2024)

8h30 : Antigone 1

8h30 : Antigone 2

8h30 : Antigone 3

8h30

Accueil et introduction

9h00

Conférence plénière chimie

animatrice: Stéphanie Kodjikian

Philippe Boullay (CRISMAT, Caen)

3D ED : un puissant outil de caractérisation structurale pour la chimie.

10h00

Pause café et thé

10h30

MS2

Cristallographie en science des matériaux

animateurs: Elisabeth Hillard et Édouard Boivin

- Invitée: Hélène Serier-Brault (IMN Jean Rouxel, Nantes) : *Luminescent Coordination Polymers or MOFs as Temperature Sensors.*
- Julian Oberdisse (Laboratoire Charles Coulomb, Montpellier) : *Controlled formation of multi-scale porosity in ionosilica templated by ionic liquid*
- Marianne Quiquandon (IRCP, Paris) : *Cristallographie des bicouches tournées : les plus simples des quasicristaux.*
- Artem Mikhailov (CRM2), Vandœuvre-lès- Nancy): *Photocrystallography of switchable palladium and rhodium nitro complexes.*
- Olivier Pérez (CRISMAT, Caen) : *Ordres complexes élucidés en combinant la diffraction des rayons X et des électrons dans les séries $Sr_2Sb_2O_{2+x}S_{3-x}$ et $Sr_2Sb_2O_{2+x}Se_{3-x}$.*

10h30

MS9

Biologie et chimie pour la santé

animateurs: Cédric Leyrat et Pavlina Dubois

- Invité: Nicolas Triomphe (CBS, Montpellier): *2D self-assembly of shape-complementary DNA origamis.*
- Marine Le Berre (I2BC, Orsay): *Characterizing the AP2-I/BDP1 complex as an antimalarial drug target.*
- Céline Rougeot (Sanofi, Montpellier): *The 3D Electron Diffraction Revolution: when a complete crystal structure with details similar to that obtained with X-ray diffraction data is achieved but from a crystal one million times smaller.*

- Gian Luca Freiherr von Scholley (ESRF, Grenoble): *Uncovering novel drug targets of polyproteins of SARSCoV-2.*
- Maxime Fillaudeau (IBMM, Montpellier): *Structure-based SUMOylation Inhibitors as innovative treatment against acute myeloid leukemia.*

12h30

Pause déjeuner

14h00

Communication par Malvern-PanAlytical (Loïc Mazé)

animateur: François Hoh

14h30

MS6

Multisources, multitechniques

animateurs: Danielle Laurencin et Stefano Trapani

- Invité: Olivier Lemaire (Max Planck Research Group Microbial Metabolism, Brème): *An integrative approach for the characterization of metalloenzymes from an anaerobic gas converter.*
- Invité: Clément Falaise (Institut Lavoisier de Versailles, Versailles): *Assemblages supramoléculaires à base de nano-ions : des complexes hôte-invité aux microtubules artificiels.*
- Nicolas Caramello (Universität Hamburg; European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble): *Décrypter un cryptochrome par cristallographie résolue dans le temps et spectroscopie in crystallo résolue dans le temps, de la nanoseconde à la seconde en XFEL et synchrotron.*
- Nathalie Guillou (Institut Lavoisier de Versailles, Versailles): *Résolution structurale de MOFs par diffraction : apport de la poudre et du monocristal.*

16h00

Affiches I - pause café et thé

17h30

Prix Guinier

animateur: Claude Sauter

Pascale Launois (LPS, Orsay)

Quelques études de cristallographie

19h00

Apéritif dînatoire

Programme détaillé (mercredi 3-7-2024)

8h30 : Antigone 1

8h30 : Antigone 2

8h30 : Antigone 3

9h00

Conférence plénière physique

animatrice: Claire Colin

Pauline Martinetto (Institut Néel, Grenoble)

Cristallographie et matériaux du patrimoine culturel : des mesures non invasives sur les œuvres à l'analyse quantitative semi-automatique de phases.

10h00

Pause café et thé

10h30

MS7

Cristallographie sous haute pression

animateurs: Claire Levelut et Julien Haines

- Invitée: Nathalie Colloc'h (ISTCT, Caen): *Cristallographie des protéines à haute pression hydrostatique (HPMX), outil puissant pour induire la liaison d'inhibiteur spécifique de des états excités : l'exemple de Ras.*
- Romain Viennois (ICGM, Montpellier) : *Étude du système Ba-Si sous hautes pressions par calculs ab-initio.*
- Laetitia Laversenne (Institut Néel, Grenoble): *Étude par diffraction de neutrons des composés NaMgD_3 et KMgD_3 sous haute pression.*
- Thierry Prangé (CITCoM, Paris) : *Pressure dependency of the collagen-type triple helix analyzed by high pressure macromolecular crystallography (HPMX) up to 1GPa.*

10h30

MS8

Approches in situ, in-operando, in vivo, temps réel

animateurs: Olivier Leynaud et Thierry Azaïs

- Invité: Ovidiu Ersen (USIAS, Strasbourg): *Microscopie électronique in situ pour l'étude de la matière : naissance, vie et transformation des nanomatériaux.*
- Frédéric Leroy (CINaM, Marseille): *In-operando GISAXS study of helium bubbles growth in tungsten.*
- Matthew Suchomel (ICMCB, Bordeaux) : *In-situ ED-XRD studies of iron incorporation limits in Na-based post-spinel type compounds.*
- Damien Alloyeau (Université Paris Cité, Paris): *In situ insights into the thermal stability and oxygen reactivity of high-entropy nanoalloys.*

12h00

Assemblée générale de l'AFC

animateur: Claude Sauter

13h00

Pause déjeuner

14h30

Prix de thèse

animateurs: Solange Morera, Matias Velazquez, Claire Colin

Biologie: Quentin Gaday (Institut Pasteur, Paris)

Mechanistic insights into corynebacterial divisome complexes involved in cell septation.

Chimie: Palmerina Gonzalez Izquierdo (Institut Laue Langevin, Grenoble)
Synthesis and physico-chemical characterization of novel organic-Inorganic hybrid halometallate compounds.

Physique: Clément Atlan (CEA, LEPMI, Grenoble)

On strain in platinum and palladium nanoparticles in an electrochemical environment.

15h30

Affiches II - pause café et thé

16h30

MS1

Croissance de cristaux en biologie, chimie et physique

animateurs: Monika Spano et Valéry Dupray

- Invité: Sandra Peña-Revellez (Institut Néel, Grenoble): α -GeO₂ : *Croissance et applications.*
- Gabin Gbabode (SMS, Univ. Rouen Normandie): *Crystallization (or not) of active pharmaceutical ingredients in thin films.*
- Hugo Cercl (SMS, Univ. Rouen Normandie): *Couplage de la microfluidique de gouttes et de la microscopie à génération de seconde harmonique pour le criblage in situ de phases cristallines.*
- Philippe Veber (West University Timisoara, Timisoara, Roumanie): *Smart growth, from combined crystal growth methods to artificial intelligence management: control of the chemical composition and improvement of single crystal performance.*
- Éric Girard (Institut de Biologie Structurale, Grenoble): *Instant protein crystallization induced by the nucleating agent crystallophore.*

18h30

Prenez un tour sur l'esplanade!

20h00

Conférence grand public (au Centre Rabelais)

Pierre Teissier (Centre François Viète, Université de Nantes)

La minéralogie de Jacques Curie entre Paris et Montpellier; les sciences expérimentales sous la Troisième République (1870-1940).

Programme détaillé (jeudi 4-7-2024)

8h30 : Antigone 1

8h30 : Antigone 2

8h30 : Antigone 3

9h00

L'AFC invite

animateur: Arie van der Lee

Andy Maloney (CCDC, Cambridge)

With our powers combined... The CSD and its applications across structural science

10h00

Pause café et thé

10h30

MS3

Matériaux pour l'énergie et la conversion

animateurs: Laetitia Laversenne et François Goutenoire

- Invitée: Judith Monnier (ICMPE, Thiais): *Structural and computational analysis of $Y_{0.88}Ni_{3-x}Mn_x$ compounds to understand the localization of Mn.*
- Fatiha Azrour (ICGM, Montpellier): *Étude structurale sous pression et températures cryogéniques des cristaux piézoélectriques $LnCa_4O(BO_3)_3$, avec $Ln = Y, La, Pr, Nd, Gd, Er, Tm$.*
- Clément Ribart (UGA, CEA/IRIG/DEPHY/MEM/NRX, Grenoble): *Cartographies de microstructures par micro-diffraction Laue sur une nouvelle génération de gaines de combustible nucléaires en Zirconium revêtues Chrome.*
- Carmelo Prestipino (CRISMAT, Caen): *L'activité stéréochimique du Sn^{2+} est-elle un facteur crucial pour la génération d'une faible conductivité thermique dans les sulfures à base d'étain ?*

10h30

MS5/MS10

Interaction et reconnaissance moléculaire, exposome

animatrices: Albane Lemaire et Rachel Cerdan

- Invité: William Bourguet (CBS, Montpellier): *Ce que la biologie structurale nous apprend sur le mode d'action et la détection des perturbateurs endocriniens.*
- Invité: Sylvain Engilberge (IBS, UGA, CEA, Grenoble): *New Tools for Studying Protein Dynamics by X-ray crystallography.*
- Anais Chrétien (European XFEL, Schenefeld): *Characterization of the BLUF photoreceptor PAC using time-resolved crystallography.*
- Manon Mallet (CBS, Montpellier): *Characterization of nuclear receptors from parasitic nematodes to overcome anti-infectious drug resistance.*

- Patrice Gouet (MMSB, Lyon): *FoldScript: a new webserver for interpreting artificial intelligence in structural biology.*
- Jean-Denis Pédelacq (IPBS, Toulouse): *Mécanisme d'action des 4'-phosphopantéthéinyl transférases de type II.*

12h30

Communication par Bruker (Damien Cochet)

animateur: François Hoh

13h00

Pause déjeuner

14h30

MS11

Enseignement et médiation scientifique

animateurs: Delphine Cabaret et Enrique Espinosa

- Invité: Philippe Guionneau (ICMCB, Bordeaux): *Enseigner la cristallographie en tant que telle à l'université : Don Quichotte, Sisyphe ou Héraclès ?*
- Claude Sauter (ARN, IBMC, Strasbourg): *La cristallographie : un formidable outil de communication scientifique.*
- Lise-Marie Chamoreau (IPCM, Paris): *École Diffraction des rayons X sur poudre et monocristaux à Paris.*
- Section Jeunes AFC: *Section Jeunes AFC. Retour sur la journée satellite et sa Table Ronde.*
- Table Ronde

16h30

Affiches III - pause café et thé

17h30

MS12

Grands instruments

animatrice: Giorgio Schiro et Pascale Launois

- Invité: Vincent Jacques (LPS, Orsay): *Les systèmes à ondes de densité de charge à la lumière des rayons X produits sur grands instruments.*
- Pierre Legrand (Synchrotron SOLEIL, St-Aubin): *La nouvelle plateforme de CryoEM @ SOLEIL.*
- Elisabeth Hillard (ICMCB, Pessac): *X-ray natural optical activity beyond chirality.*
- Florence Porcher (ESS, Lund): *DREAM : Le futur diffractomètre de neutrons pour la cristallographie à l'ESS*

19h00

Prenez un tour sur l'esplanade!

20h00

Soirée gala au Mo.Co

Programme détaillé (vendredi 5-7-2024)

8h30 : Antigone 1

8h30 : Antigone 2

8h30 : Antigone 3

9h00

Conférence plénière biologie

animatrice: Solange Morera

Jean-Philippe Rameau (Molecular Design Sciences, Sanofi, Paris)

Drug discovery driven by artificial intelligence

10h00

Pause café et thé

10h30

MS13

Cristallographie à l'échelle nano

animateurs: Vincent Jacques et Christophe Lepoittevin

- Invitée: Marie-Ingrid Richard (ESRF, CEA, Grenoble): *Structural evolution of nanoparticles in the light of in situ Bragg coherent diffraction imaging.*
- Stéphanie Kodjikian (Institut Néel, Grenoble): *Résolution de structure dans un microscope électronique en transmission : 3D-ED et combinaison des techniques.*
- René Guinebretière (IRCER, Limoges): *Déformations à l'échelle nanométrique dans des polycristaux denses. Étude in situ à haute température par diffraction des rayons X sur source synchrotron.*
- Emre Yörük (Institute of Physics, Praha): *Facteurs de diffusion sphériques de Hirshfeld dans les affinements contre des données 3D ED.*

10h30

MS4

Modélisation et méthodes en cristallographie

animateurs: Claudine Mayer et Arie van der Lee

- Invité: Thibault Tubiana (I2BC, Paris): *Deciphering viral protein-protein interactions using AlphaFold.*
- Guillaume Maurin (ICGM, Montpellier): *Computational-aided development of MOF water sorbents for heat reallocation.*
- Isabelle Callebaut (IMPMC, Paris): *Exploiting proteome-scale predictions of AlphaFold2 to reveal foldable segments with unexplored characteristics.*
- Mathieu Marchivie (ICMCB, Pessac): *Exploiter la base de données CSD: vers l'utilisation du "machine learning" pour optimiser les propriétés de complexes à conversion de spin.*

12h00

Clôture et remise des prix d'affiche

Liste des affiches

MS1: Croissance de cristaux en biologie, chimie et physique

- MS1-A1: Claude Sauter *et al.* (ARN - IBMC - CNRS - Unistra, Strasbourg): *Puces microfluidiques pour la croissance de cristaux biomoléculaires et leur analyse par cristallographie sérielle*
- MS1-A2: Philippe Veber *et al.* (West University Timisoara, Timisoara): *Smart growth, from combined crystal growth methods to artificial intelligence management: control of the chemical composition and improvement of single crystal performance*
- MS1-A3: Chaima Tizaoui (Institut national de recherche et d'analyse physico-chimique, Bizerte, Tunisie): *The persistence and crystallization behavior of atorvastatin calcium amorphous dispersions in polyvinylpyrrolidone*

MS2: Science des matériaux

- MS2-A1: Natacha Henry *et al.* (Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, Univ. Artois, UMR 8181 - UCCS - Unité de Catalyse et Chimie du Solide, F-59000 Lille, France): *Pyromellitate de lanthanides hydratés (La, Ce, Pr, Dy, Yb) : MOF 3D avec des tunnels encapsulant des espèces de diméthylammonium et d'eau et sa transformation cristal*
- MS2-A2: Lamia Bendjeddou ((Département de chimie, Faculté des Sciences Exactes, Université Constantine 1 Frères Mentouri, Constantine, Algérie): *Synthèse, étude structurale, analyse de surface Hirshfeld et luminescence d'un polymère de coordination à base de l'euporium et du ligand l'acide 1H-benzimidazole-5 carboxylique*
- MS2-A3: Christian Philouze *et al.* (Institut de Chimie Moléculaire de Grenoble, Gières): *La cristalochimie à l'Institut de Chimie Moléculaire de Grenoble (ICMG) en 2024*
- MS2-A4: Mehiedinne Bouatrous *et al.* (Université 20 août 1955 Skikda, Algérie): *Synthesis and characterization of Zinc Silicate ceramic nanoparticles via sonochemistry*
- MS2-A5: Christophe Lepoittevin *et al.* (Institut Néel, CNRS and Université Grenoble Alpes, Grenoble): *Structure resolution of the new Ca₂MnO₃X (X = Cl, Br) oxyhalides*
- MS2-A6: Nezha Sekkal (Civil Engineering and environnement Laboratory, Sidi Bel Abbas, Algérie): *From Soil to Bio-Natural Sources: Exploring the Potential of Algerian Clay*
- MS2-A7: Charef Tabti (LTPS, Université de Mostaganem, Mostaganem, Algérie): *Structural investigation of Lithium Niobate between 293 and 100 K*
- MS2-A8: Ahlem Linda Boulkedid *et al.* (Département de chimie, Faculté des Sciences Exactes, Université Constantine 1 Frères Mentouri, Constantine, Algérie): *Synthèse, étude structurale et propriétés magnétiques de deux complexes dinucléaires de bases de Schiff Zn²⁺/Ln³⁺*

- MS2-A9: Elzbetia Trzop *et al.* (Institut de Physique de Rennes): *Stabilizing low symmetry-based functions of [Fell(PM-PEA)2(NCS)2] at room temperature through isosymmetric electronic bistability*

MS3: Matériaux pour l'énergie et la conversion

- MS3-A1: Mickaël Beaudhuin *et al.* (ICGM, Montpellier): *A multiscale approach to enhance the thermoelectric properties of α -SrSi₂*
- MS3-A2: Elen Duverger-Nédellec *et al.* (ICMCB, Pessac): *Développement de céramiques moléculaires à conversion de spin*

MS5/MS10: Interaction et reconnaissance moléculaire, exposome

- MS5-MS10-A2: Belkis Selsabil Yeddiou *et al.* (Université Frères Mentouri - Constantine 1, Unité de Recherche de Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale CHEMS, Constantine, Algérie): *Synthèse, étude structurale et analyse des surfaces Hirshfeld d'un nouveau complexe de coordination à base de HgII et tétrazole-2-pyridyl.*
- MS5-MS10-A3: Pauline Lizondo-Balderas (IPBS, CNRS, Université Paul Sabatier, Toulouse): *Engineering, biophysical and structural characterization of new Jo/In complexes for the design of artificial cellulosomes*
- MS5-MS10-A4: Michel Giorgi *et al.* (Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Méditerranée, FSCM, Marseille): *Photopolymérisation in cristallo de cyclopropanes donneurs-accepteurs : quand tout se met en place !*
- MS5-MS10-A5: Jakub Gruszczyk *et al.* (CBS/Inserm, Montpellier): *Cryo-EM structure of the agonist-bound Hsp90-XAP2-AHR complex*
- MS5-MS10-A6: Coralie Carivenc *et al.* (Centre de Biologie Structurale, Montpellier) *Crystallographic studies of the xenobiotics receptor PXR bound to pharmaceutical and environmental compounds*
- MS5-MS10-A7: Savannah Sirounian *et al.* (Centre de Biologie Structurale, Montpellier): *Identification and characterisation of the importin complexes involved in the nuclear translocation of the aryl hydrocarbon receptor*
- MS5-MS10-A8: Grégory Excoffier *et al.* (Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, FSCM, Spectropole, Marseille): *Quantification de molécules invitées dans différents hôtes : une étude combinée DRXm/Analyse Élémentaire*

MS6: Multisources - multitechniques

- MS6-A1: Thierry Prangé *et al.* (CITCoM UMR 8038 - CNRS Faculté de Pharmacie, Paris): *Structure de la séquence répétitive -(Pro-Hypro-Gly)n- par diffraction électronique et RX*

MS7: Cristallographie sous haute pression

- MS7-A1: Claire Colin *et al.* (Institut Néel, CNRS & UGA, Grenoble); *High-pressure structural and magnetic phase diagram of NiFe₂O₄*

MS8: Approches in situ/in operando/in vivo/temps réels

- MS8-A1: Laurent Loos et al. (Rigaku Europe SE, Neu Isenburg): *Challenges and Victories: Variable Temperature MicroED on Small Molecules*

MS12: Grands instruments

- MS12-A1: Ricardo Guillermo Torres-Ramírez *et al.* (Institut de Physique de Rennes): *Time-resolved streaming crystallography on the study of persistent photoinduced phase transition in RbMnFe prussian blue analogue*