



RESUMES DES CONTRIBUTIONS

Classés par ordre alphabétique des auteurs

De l'importance de la cryo-nanosonde par fluorescence X synchrotron pour l'étude des métaux à l'intérieur des cellules

Sylvain Bohic

Institut neurosciences, Grenoble

Il est bien admis que les métaux jouent un rôle important dans de nombreux mécanismes biologiques/biochimiques au sein des cellules et de leurs organelles avec plus d'un tiers des protéines utilisant un ion métallique pour assurer leur fonction ; l'homéostasie des ions métalliques étant quant à elle régulée par un grand nombre de machineries cellulaires complexes et souvent « metal-spécifique ». Les développements en chimie bioorganométallique ont quant eux montré toute leur importance ouvrant de nouvelles approches thérapeutiques. Que ces métaux soient dits essentiels car participant au fonctionnement de nos cellules, toxiques et donc délétères pour nos cellules en fonction de leur espèce chimique et leur concentration, ou encore utilisés à des fins thérapeutiques, l'étude des métaux et plus largement des éléments chimiques au sein des cellules reste un défi important de la chimie analytique. Dans cette présentation, nous montrerons l'importance de la cryo-nanosonde à fluorescence X excitée par le rayonnement synchrotron pour étudier et imager quantitativement les éléments chimiques au sein de la cellule entière cryopréservée (congelée-hydratée) proche donc de son état natif, et ce en 3-dimension à une échelle de l'ordre de 30 nm. Ces développements récents seront illustrés par des résultats notamment ayant contribué à mieux comprendre les mécanismes d'actions de certains complexes organométalliques. Nous essaierons de montrer comment l'arrivée de sources synchrotron extrêmement brillantes de 4^{ème} génération pourra être utile au développement de ce champ de recherche qui vous aura été présenté.



Catalyse et Energie : des gagnants des synchrotrons de 4^{ème} génération

Valérie Briois

Synchrotron SOLEIL, Gif-sur-Yvette

Dans le cadre de la réflexion scientifique pour une évolution de la source SOLEIL vers une source de 4^{ème} génération, une série de conférences a été organisée entre janvier 2018 et juillet 2019 visant à discuter des opportunités d'une telle source dans le panorama des sciences traitant de ***l'énergie et de l'environnement pour un développement durable***. Des scientifiques parmi les principaux acteurs du domaine en France ont ainsi pu donner leur point de vue sur les limitations actuelles de leur champ de recherche et nous ont permis d'identifier les techniques pour lesquelles une augmentation de la brillance et de la cohérence telle qu'offerte par une source de 4^{ème} génération serait un levier puissant pour surmonter certains de ces verrous scientifiques. Cette présentation sera focalisée sur ***les sciences de l'énergie*** [2-7] en couvrant les domaines de la production d'énergie par conversion catalytique, la restitution d'énergie stockée dans les liaisons chimiques, la conversion de l'énergie solaire et le stockage de cette électricité durable par les batteries à ions lithium. La localisation du site actif en catalyse hétérogène, la compréhension de la formation de l'interface électrode-electrolyte au sein d'une batterie, l'amélioration de l'activité et stabilité des piles à combustibles sans platine ou de la durabilité des cellules photovoltaïques de nouvelles générations seront présentées comme quelques exemples représentatifs des questions tant fondamentales qu'appliquées qui pourraient être adressées avec une machine de 4^{ème} génération. Les réponses à ces questions tireront partie du gain en résolution spatiale des techniques d'imagerie avec contraste chimique ou contraste structural pour mieux comprendre la complexité et grande hétérogénéité de ces matériaux et profiteront du gain en résolution temporelle pour caractériser ces matériaux en conditions *operando*.

[1] Table ronde « **Energie et Environnement pour un Environnement Durable** », SOLEIL, organisateurs : V. Briois et Delphine Vantelon, coordinateurs : F. Berenguer, C. La Fontaine, S. Belin, B. Lassalle, C. Rivard, G. Landrot.

[2] **F. Dumeignil**, « Valorisation catalytique des bioressources : concepts et caractérisations avancées », SOLEIL, 29 janvier 2018

[3] **F. Jaouen**, « Matériaux Catalytiques pour les piles à combustible à électrolyte polymère », SOLEIL, 9 avril 2018

[4] **M. Robert**, « Solar fuels from CO₂, H₂O and N₂ catalytic electrochemical and photochemical reduction. The revolution to come », SOLEIL, 5 mai 2018

[5] **J. F. Guillemoles**, « Perspectives in photovoltaic conversion of solar energy & materials sciences issues » SOLEIL, 10 septembre 2018

[6] **J. M. Tarascon**, « What can we really learn about battery materials from operando synchrotron techniques or others? », SOLEIL, 25 mars 2019

[7] **A. Singer**, « Nucleation of Dislocations and Their Dynamics in Layered Oxides Cathode Materials during Battery Charging », SOLEIL, 10 juillet 2019



Opportunities for angle-resolved photoemission offered by 4th generation synchrotrons

Véronique Brouet

Laboratoire de Physique des Solides, Orsay

After a brief introduction to the photoemission technique, I will illustrate how a smaller beamspot could lead to much improved data in angle-resolved photoemission of various materials, from cleaved bulk samples to 2D materials' flakes. This should also facilitate the implementation of new functionalities, like applying strain, current or gate voltage in-situ. I will compare different methods for reducing the beam size, available today or with the advance of 4th generation synchrotrons.

Investigation of bacterial efflux pumps mechanism by combination of multiple structural biology approaches

Isabelle Broutin

Laboratoire CiTCoM (Cibles Therapeutiques et Conception de Médicaments, Paris)

Bacterial infections remain a major public concern due to the accelerated increase in the appearance of antibiotic resistance. Among the different mechanisms used by bacteria to resist to antibiotics, the active efflux plays a major role. In Gram-negative bacteria, this is achieved by tripartite efflux pumps that form a macromolecular assembly spanning both membranes of the cellular wall. In *Pseudomonas aeruginosa*, an opportunistic pathogen highly involved in nosocomial diseases, the constitutive pump is OprM-MexAB. A lot of questions concerning the assembly, the mechanism of efflux, and the opening of the whole pump are a matter of active research, as the blockage of these pumps could restore the utility of the actual therapeutic arsenal.

Owing to a combine approach linking antibiotic MICs measurements performed on modified *P. aeruginosa* strains with Xray crystallographic structures of forceful opened OprM mutants solved from data sets recorded on SOLEIL and ESRF diffraction beam lines, we proved the outer membrane factor cannot be opened without the presence of the two other protein partners. In order to study the operation of the whole pump we turned to cryo-EM revealing the conformation changes leading to the opened form of the assembly.

This project highlight the need for cryo-EM access for structure determination of big complexes. This has to be taken in account in the future developpements of synchrotron SOLEIL.



Integrated biology at Synchrotron SOLEIL - example of in vivo crystallography

Leo CHAVAS

Synchrotron Soleil, Gif sur Yvette

Motivated by the need to support rapid changes in innovative science as closely as possible, Synchrotron SOLEIL is planning to enter a phase for a machine upgrade, which should improve the quality of the synchrotron beam, and hence open a window for new technological and methodological developments using the advantages brought by these new radiation sources. The timing appears then suitable to boost the beamline instrumentation and their associated facilities, laboratories, and infrastructure. With the recent explosion of interest in cryo-electron microscopy and integrated methods, the contribution from synchrotron facilities to the biological community needs to be adapted to a quickly evolving field. The biology and health scientific section, also known as HelioBio, at Synchrotron SOLEIL regroups a large set of instruments with specific equipment dedicated to biological applications. To illustrate the foreseen novelties in synchrotron access modes proposed by the HelioBio community, the seminar will present the prevalent technologies favored by the Synchrotron SOLEIL biology users, complemented by the state-of-the-art methodologies envisioned by the expert communities.

Taking full advantage of these foreseen developments, the in vivo protein crystallography (ivMX) has shown fantastic results at Synchrotron SOLEIL. All efforts possible were provided by members of HelioBio to deeply characterise the big principles behind the naturally occurring crystallisation events (the base of ivMX) and set up a fully integrated platform. Reflecting the output of these experiments, two main aspects will be introduced. First, the HelioBio is willing to provide on-site emerging/pioneering methods that have a major impact in modern biology and will complement existing approaches at Synchrotron SOLEIL, such as the implementation of cryo-electron microscopy/tomography and soft x-ray tomography. These additional methods should be implemented together with the upgrade of the current beamlines to stay at the state-of-the-art of the performed experiments, and improve compatibilities with other beamlines and flexible, reliable and reactive scheduling of experiments on biological samples.

Members of HelioBio are dedicated to pushing these changes forward, and thus promote better experiments targeted towards the biological user community and more specifically towards projects in need of fully integrated approaches.



Static serial crystallography; prospects and limits at 3rd and 4th generation synchrotrons sources

Jacques-Philippe Colletier

IBS, Grenoble

We will introduce room-temperature serial synchrotron crystallography (SSX), highlight the importance of mitigating radiation damage in such experiments, and present results obtained by raster-scanning SSX on microcrystals of the orange carotenoid protein, which afforded new insights into its mechanism of non-photochemical quenching of excessive light energy. We will last review cases where static SSX can be useful to structural biologists.

Bragg coherent X-ray diffraction imaging at 4th generation synchrotron sources

Thomas Cornelius

Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence, IM2NP, Marseille

Coherent X-ray diffraction imaging (CDI) facilitates the 3D mapping of nanostructured samples in a non-destructive way [1, 2]. This method retrieves the sample scattering function from a coherent X-ray diffraction data set using computational inversion algorithms to determine the phase of the scattered amplitude which is not directly measurable by a detector [3, 4, 5]. In Bragg condition, the retrieved phase is directly related to the displacement field and, thus the strain, within a crystal. After the imaging of perfect crystals, the study of individual defects in nano-objects came into the focus of research. Improvements both of existing beamlines and of phase retrieval algorithms rendered possible *in situ* and *operando* studies of the strain and defects within nanostructures while applying external stimuli. For instance, the propagation of the entire network of dislocations within an individual calcite crystal during repeated growth and dissolution cycles was demonstrated [6] as well as the evolution of strain in a single $\text{LiNi}_{0.5}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ particle, which is used in lithium ion batteries during charging and discharging [7].

The upgrade of existing 3rd generation synchrotrons to 4th generation sources will tremendously increase the coherent flux available facilitating BCDI on much shorter timescales which are the actual timescales governing the physical processes under study and even time-resolved BCDI may become feasible. On the other hand, the increased coherent flux will allow for imaging actual nanostructures with few tens of nanometers in size. Moreover, upgraded synchrotron sources will further improve the spatial resolution, which nowadays is of the order of 10 nm.

The actual state-of-the-art of BCDI and improvements expected thanks to 4th generation synchrotron sources will be illustrated by representative examples.

[[1]] P. Thibault, V. Elser, C. Jacobsen, D. Shapiro, D. Sayre, [Acta Crystallogr. A](#) 62 (2006) 248 – 261

[2] Y. Nishino, Y. Takahashi, N. Imamoto, T. Ishikawa, K. Maeshima, Phys. Rev. Lett. 102 (2009) 018101

[3] J.R. Fienup, Optics Letters 3 (1978) 27–29

[4] J.R. Fienup, Applied Optics 21 (1982) 2758–2769



- [5] S. Marchesini, H. He, H.N. Chapman, S.P. Hau-Riege, A. Noy, M.R. Howells, U. Weierstall, J.C.H. Spence *Phys. Rev. B* 68 (2003) 140101
- [6] J.N. Clark, J. Ihli, A.S. Schenk, Y.-Y. Kim, A.N. Kulak, J.M. Campbell, G. Nisbet, F.C. Meldrum, I.K. Robinson, *Nature Materials* 14 (2015) 780 – 784
- [7] A. Ulvestad, J.N. Clark, A. Singer, D. Vine, H.M. Cho, R. Harder, Y.S. Meng, O.G. Shpyrko, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (2015) 10551 – 10555

La biologie structurale des systèmes enzymatiques impliqués dans la dégradation de la biomasse : du cliché ‘instantané’ vers la dynamique des protéines et leurs interactions

Mirjam Czjzek

Sorbonne Université, CNRS, UMR 8227, Integrative Biology of Marine Models, Station Biologique de Roscoff, CS 90074, Roscoff, Bretagne, France

Le cycle du carbone implique la transformation de la matière du vivant en énergie nécessaire pour entrainer les processus biologiques. Ce sont les micro-organismes qui jouent un rôle clé en enclenchant ce processus de transformation [1,2]. Comme souvent pour des processus biologiques primordiaux, les différents genres d'organismes ont inventé diverses stratégies, pour en tirer au maximum leur épingle du jeu. Le point commun des différents stratégies rencontrés, est l'implication de multiples acteurs moléculaires, surtout des enzymes, mais également les protéines de détection, de transport et régulation, souvent co-localisés dans les compartiments cellulaires, voir formant de gros complexes multi-protéiques [3-5]. Pour comprendre en détail le fonctionnement des systèmes souvent hautement complexes, et comportant jusqu'à plusieurs dizaines de protéines et enzymes, la biologie structurale combiné à de nombreuses méthodes de biochimie des protéines est l'approche de choix. Plusieurs récentes études intégrées ont démontré l'importance et la complexité des systèmes de dégradation de la biomasse carbonée dans divers environnements [6-9]. Ainsi, la cristallographie des protéines au synchrotron apporte l'image 3D de l'arrangement spatial et atomique des sites actifs, des interactions enzyme-ligand, des interactions protéine-protéine, des boucles/domaines/modules potentiellement flexible. Elle permet de comprendre les bases mécanistiques liés à la reconnaissance, la spécificité, l'activité et l'interactivité des acteurs moléculaires, substrats et enzymes, ligands et récepteurs, dans ces processus finement régulés [10-12]. La combinaison de méthodes structurales à divers échelles, tels que la cristallographie et la résonance magnétique nucléaire, la diffusion des rayons-X aux petits angles (SAXS), la spectrométrie de masse et la cryo-microscopie électronique, avec d'autres méthodes de biologie fonctionnelle permet ensuite de placer ces mécanismes moléculaires dans le contexte de la cellule, des tissus ou encore de l'environnement. La perspective des synchrotrons de la 4^{ième} génération ouvre potentiellement la porte vers des analyses structurales avec une échelle de temps permettant d'analyser la dynamique des mécanismes protéiques/enzymatiques impliqués.

[1] Field CB, Behrenfeld MJ, Randerson JT, Falkowski P. **1998**. Primary production of the biosphere: integrating terrestrial and oceanic components. *Science* 281, 237-240.

[2] Malhi Y. **2002**. Carbon in the atmosphere and terrestrial biosphere in the 21st century. *Philos Trans A Math Phys Eng Sci* 360, 2925-2945.

[3] Wilson DB. **2011**. Microbial diversity of cellulose hydrolysis. *Curr. Opin. Microbiol.* 14, 259-263.

[4] Smith SP, Bayer EA, Czjzek M. **2017**. Continually emerging mechanistic complexity of the multi-enzyme cellulosome complex. *Curr. Opin. Struct. Biol.* 44, 151–160

[5] Grondin JB. et al. **2017**. Polysaccharide Utilization Loci: Fuelling microbial communities. *J. Bacteriol.* 199,



e00860–16.

[6] Larsbrink J. et al. **2014**. A discrete genetic locus confers xyloglucan metabolism in select human gut Bacteroidetes. *Nature* 506, 498–502.

[7] Cuskin F. et al. **2015**. Human gut Bacteroidetes can utilize yeast mannan through a selfish mechanism. *Nature* 517, 165–169.

[8] Ndeh D, Rogowski A. et al. **2017**. Complex pectin metabolism by gut bacteria reveals novel catalytic functions. *Nature* 544, 65–70.

[9] Ficko-Blean E. et al. **2017** Carrageenan catabolism is conferred by a complex regulon in marine heterotrophic bacteria. *Nature Commun.* 8, 1685.

[10] Czjzek M, Fierobe HP, Receveur-Bréchet V. **2012**. Small-angle X-ray scattering and crystallography: a winning combination for exploring the multimodular organization of cellulolytic macromolecular complexes *Methods Enzymol.* 510, 183-210.

[11] De Diego I. et al. **2016**. The outer-membrane export signal of *Porphyromonas gingivalis* type IX secretion system (T9SS) is a conserved C-terminal β -sandwich domain. *Sci. Rep.* 6, 23123.

[12] Glenwright, A.J, Pothula, K.R. et al. **2017**. Structural basis for nutrient acquisition by dominant members of the human gut microbiota. *Nature* 541, 407-411.

Spectroscopie THz: l'apport des sources synchrotrons pour l'étude des dynamiques magnéto-électriques

Sophie de Brion

Institut Néel, Grenoble

La spectroscopie THz s'est considérablement développée ces 20 dernières années grâce à la découverte de nouvelles sources qui ont permis de combler le gap THz. Le rayonnement synchrotron en fait partie. Dans la matière condensée à plusieurs degrés de liberté (magnétiques, électriques, réseau...), le domaine THz permet de sonder les dynamiques associées (magnons, phonons, excitations hybrides...) pour révéler les mécanismes de couplage impliqués et ouvrir la voie vers de nouvelles technologies de communication. On discutera ici l'apport du rayonnement synchrotron, passé et futur en environnement extrême (basse température, haute pression).



Micro-spectroscopie d'absorption X et source de 4^{ème} génération: du micro au nano, du multi-spectral à l'hyperspectral. Nouvelles possibilités et défis

Marine Cotte

ESRF, Grenoble et Laboratoire d'archéologie moléculaire et structurale, Paris

Dès la construction de l'ESRF, les intérêts de lignes dédiées à la micro- spectroscopie d'absorption X dans les X-tendres (~2-7keV) et dans les X durs (~7-20keV) ont été pressentis, motivant le développement de la ligne ID21 et ID22, respectivement. Cette technique combine les avantages de la spectroscopie d'absorption X (identification des éléments et des espèces; excellente sensibilité en mode de fluorescence X, même dans des matériaux complexes) avec les avantages de la microscopie (localisation des espèces et corrélation avec d'autres méthodes d'imagerie, notamment visible); elle connaît un grand succès pour l'étude de la spéciation des éléments dans des matériaux hétérogènes, notamment dans les domaines des analyses du patrimoine culturel, des sciences de l'environnement ou de la géologie. Avec les sources de 4^{ème} génération, et à condition de développements parallèles des optiques et des détecteurs notamment, les performances des instruments vont être poussées vers des faisceaux plus intenses, plus petits et plus stables (jusqu'à ~100nm), et des acquisitions plus rapides. Ceci se traduira en des cartes de spéciation mieux résolues latéralement, à champ de vue constant, voire plus grand. Une amélioration de la vitesse d'acquisition permettra aussi de passer d'analyses multi-spectrales (basée sur l'acquisition qualitative de cartes de fluorescence à quelques énergies) vers des acquisitions hyper-spectrales (basée sur l'acquisition quantitative de cartes de fluorescence à des centaines d'énergies). Cependant, ces nouvelles possibilités soulèvent aussi de nouveaux défis en termes de préparation et préservation d'échantillon, et de traitement de données.

Les nanomatériaux multifonctionnels

Véronique Dupuis

Institut lumière matière, Lyon

L'élaboration des matériaux sous forme nano-structurée et l'étude de leurs propriétés structurales, dynamiques, électroniques, leur modélisation jusqu'à une mise en œuvre potentielle sont au cœur de la science de la matière condensée. L'étude de la structure de ces nanomatériaux et de leurs défauts, basée sur les notions d'ordre et de désordre à différentes échelles, du nanomètre jusqu'au micron, sur les concepts de symétries et sur la cristallographie est en progrès constant. Avec les développements instrumentaux des sources synchrotrons poussant les techniques à leurs limites, il est possible d'explorer la matière dans des conditions de plus en plus extrêmes. L'utilisation accrue de méthodes couplant plusieurs techniques et l'étude simultanée de différentes propriétés s'avère aussi fructueuse. L'assemblage de nanomatériaux en dispositifs, les matériaux nanocomposites ou multifonctionnels suscitent depuis une dizaine d'années un grand intérêt en recherche fondamentale et sont au centre d'une activité très dynamique tant théorique qu'expérimentale. En particulier l'utilisation des effets magnétoélectriques dans la future brique de commutation qui se substituera au transistor pour permettre le fonctionnement de dispositifs de calcul ou de mémoires à très faible consommation est envisagée.



Synchrotron multimodal methods for lipid droplets in living cells

Marine Froissard

IJPB, INRA AgroParisTech, CNRS, Université Paris Saclay, France

Frédéric Jamme¹, Yann Gohon², Jean-David Vindigni², Alexandre Giuliani³, Frank Wien¹, Thierry Chardot², Matthieu Réfrégiers¹, Eva Pereiro⁴, Bertrand Cinquin⁵, Marine Froissard²

1: Soleil Synchrotron, France

2: IJPB, INRA AgroParisTech, CNRS, Université Paris Saclay, France

3 CEPIA, U1008 INRA, France

4: ALBA synchrotron, Spain

5: LBPA, CNRS, ENS Paris Saclay, France

In all organisms, storage lipids are maintained in the cytoplasm in specialized organelles called lipid droplets (LDs). These nanoparticles consist mainly of a core of neutral lipids (triacylglycerols and/or steryl esters) enclosed in a monolayer of phospholipids, and contain a number of proteins which vary considerably with the species. More than inert fat balls, LDs are complex organelles and their abnormal dynamics is associated with several diseases (virus-induced steatosis, diabetes, atherosclerosis and myopathies). In the context of green chemistry, LDs are promising sources of lipid-derived molecules for chemistry, food, medicine and cosmetics. For these reasons, understanding LD structure and way of life is of major importance.

Combination of synchrotron radiation techniques enable us to go deeper into the comprehension of LD biology. First, we investigated the structure of a peculiar class of highly hydrophobic LD proteins called Class I LD proteins. These proteins exhibit structural convergence with a hairpin folding that target and anchor the protein to the LD. We developed a genetic approach using heterologous expression in yeast to perform comparative functional and structural study of seed oleosins [1, 2], mammalian caveolin and hepatitis C virus core protein. We obtained circular dichroism spectra of oleosin AtOle1 inserted in LD [3]. Second, we investigated the ultrastructure of the LD core using label-free imaging techniques, deep ultra violet on living yeast and transmission X-ray microscopy on cryo-fixed cells. We confirmed the ultrastructural lipid heterogeneity of LD and its concentric layer organization.

1. Froissard, M., et al., *Heterologous expression of AtOle1, a plant oil body protein, induces lipid accumulation in yeast*. FEMS Yeast Res, 2009. **9**(3): p. 428-38.
2. Jamme, F., et al., *Single Cell Synchrotron FT-IR Microspectroscopy Reveals a Link between Neutral Lipid and Storage Carbohydrate Fluxes in *S. cerevisiae**. PLoS One, 2013. **8**(9): p. e74421.
3. Vindigni, J.D., et al., *Fold of an oleosin targeted to cellular oil bodies*. Biochim Biophys Acta, 2013. **1828**(8): p. 1881-88.



Le défi des textures d'aimantation tridimensionnelles

Olivier Fruchart
SPINTEC, Grenoble

Par textures d'aimantation tridimensionnelles, on entend une distribution d'aimantation disposée sur un réseau en trois dimensions. Alors qu'il s'agit d'une situation classique mais très complexe dans les matériaux massifs, les nano-objets de taille quelques dizaines de nanomètres ou plus permettent encore l'expression de ces configurations d'aimantation non-uniformes, cependant, avec un nombre de degrés de liberté limité et donc une plus grande facilité d'identification et d'adressage. Sur le plan fondamental, ces architectures magnétiques tridimensionnelles sont susceptibles d'apporter des effets nouveaux, du fait d'une topologie spécifique qui n'existe pas en dimension deux ou moins. Les connaissances et capacités instrumentales dédiées à des objets sont également utiles pour les applications, qui pour des raisons de fonctionnalités ou de densité surfacique, cherchent à exploiter la troisième dimension. Le rayonnement synchrotron est amené à jouer un rôle clef dans les techniques d'imagerie et de tomographie de ces situations.

Nano-imagerie des tissus osseux: un bref retour aux sources

Aurélien Gourrier
Laboratoire Interdisciplinaire de Physique, Grenoble

Après plus d'un siècle, l'analyse radiologique de rayons X constitue encore une modalité majeure pour le diagnostic clinique. Si les sources synchrotron n'ont connu jusqu'ici qu'un développement limité (au regard des potentialités et des besoins) sur le plan thérapeutique et du diagnostic, l'évolution des techniques d'imagerie et d'analyse X synchrotron a très fortement contribué à l'analyse biomédicale des mécanismes pathologiques fondamentaux. Dans de nombreux champs d'applications, les techniques développées constituent un "gold standard" pour la validation d'autres instruments ou, a minima, permettent d'établir les preuves de concepts scientifiques à la base de développements cliniques conséquents.

Ainsi, le développement technologique de la micro-imagerie par contraste de diffusion de rayons X (qsSAXSI) constitue un exemple type de l'importance du perfectionnement continu des sources synchrotron et de leur environnement dans l'émergence d'une innovation scientifique. Nous montrerons, en particulier comment l'amélioration conjointe de la brillance de la source, de l'optique et des détecteurs pour rayons X a permis de passer en 20 ans d'une technique expérimentale de physiciens avertis à une nouvelle modalité biomédicale pour l'analyse histologique des tissus osseux. À la lumière de ce retour d'expérience, nous soulignerons l'importance d'une approche holistique, intégrative, dans un projet d'upgrade.



La spectroscopie d'absorption X : un outil de prédilection à l'étude de la spéciation (forme chimique) d'élément trace. Etat de l'art et perspective sur les synchrotrons de quatrième génération

Jean-Louis Hazemann
Institut Néel, Grenoble

Scruter les formes chimique et structurale d'éléments de plus en plus dilués est un objectif majeur dans les sciences de la Terre et de l'environnement, de la biologie, la chimie et les sciences des matériaux...

Pour répondre à ce challenge, la spectroscopie d'absorption X (XAS), sonde de l'ordre local et de la structure électronique d'un élément cible, est l'une des méthodes idéales. Elle permet de couvrir la majeure partie des éléments d'intérêt, d'être « non destructif » et d'accueillir des environnements échantillon complexes, pour faire par exemple des mesures *in situ* ou *operando*.

Si les lignes XAS « classiques » permettaient déjà de sonder des éléments cibles jusqu'à des concentrations de l'ordre de 50 à 20 ppm (parties par million), les avancées techniques effectuées ces dernières années, notamment sur les systèmes de détection de fluorescence, permettent aujourd'hui de lever une grande partie des différents verrous expérimentaux. En effet, certaines nouvelles lignes actuelles permettent d'effectuer d'ores et déjà des mesures jusqu'à 1 ppm voire en deçà, en s'appuyant autant sur un accroissement du flux de photons sur l'échantillon que sur la qualité des détecteurs. Nous présenterons cette évolution et montrerons comment ces nouveaux moyens d'analyse, en fort développement sur les lignes d'absorption X conventionnelles, ouvrent réellement de nouveaux outils d'analyse, autant en terme de limite de détection que de résolution spectrale, d'autant plus si ces mesures bien mieux résolues sont associées à des calculs de structure de seuil, aujourd'hui toujours plus précis et rapide.

Les spécificités de ces "nouvelles" spectroscopies seront illustrées par de nombreux exemples, mettant en exergue les possibilités à la fois de traquer des espèces hautement diluées jusqu'en deçà du ppm et de mieux discriminer des environnements locaux proches en profitant de la meilleure résolution des structures de seuils. Ces exemples seront principalement issus des communautés des sciences des matériaux, de la chimie et des sciences de l'environnement qui sont très friandes de ces nouveaux outils d'analyse.

Par ailleurs, avec la perspective des différentes jouvences des synchrotrons de troisième génération évoluant vers la quatrième génération, nous mettrons en exergue l'apport de ces nouvelles sources de rayons X, plus brillantes et plus cohérentes, à ces domaines de recherche et les perspectives qui en découlent.



Status of soft (hard) x-ray resonant scattering and perspectives in the view of next generation storage rings

Nicolas Jaouen

Synchrotron SOLEIL, Gif sur Yvette

In the first part of my presentation, I will review the use of resonant x-ray scattering (REXS) in condensed matter physics. After a short introduction of the basics of REXS, I will show through selected examples that nowadays REXS is one of the most powerful techniques to study the different kinds of order (magnetic, electronic, structural and orbital) relevant in condensed matter physics. In particular it allows accessing spin/charges/orbital configuration in one experiment with element selectivity, by selecting the x-ray energy corresponding to a core-level, and with a spatial resolution limited only by the x-ray wavelength. Another important asset of REXS is that it allows for versatile sample environments (magnetic & electric fields, low/high temperature, pressure, pump/probe time resolved scheme...), thanks to the space available around the sample, characteristic of a scattering experiment.

In the second part I will present examples of recent studies that use the x-ray coherence available at the 3rd generation light sources, which already allow imaging the above mentioned spin/charge/orbital configuration in real space. I will conclude by discussing the limitations that, at present, hamper the development of these experimental approaches in the soft x-ray range and the potential gain expected with the advent of a new generation of storage rings.

Perspectives scientifiques pour la diffusion inélastique des rayons X sur les synchrotrons de 4e génération

Amélie Juhin

Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie, Paris

La diffusion inélastique des rayons X (IXS) au sens large regroupe différentes techniques utilisant deux photons (l'un entrant, l'autre sortant) et permettant de mesurer l'énergie et la dispersion d'excitations variées dans les matériaux. Cette richesse tire son origine de la possibilité de réaliser les mesures de façon résonante (spectroscopie RIXS) ou de façon non-résonante (spectroscopie IXS, spectroscopie Raman XRS), et de faire varier indépendamment l'énergie, le vecteur d'onde et la polarisation de chacun des deux photons. Ceci permet d'explorer la nature d'une large gamme d'excitations dont l'énergie va de quelques meV à plusieurs centaines d'eV : phonons, magnons, orbitons, excitations électroniques de valence, plasmons, excitations électroniques de cœur. Relativement jeunes, et au départ utilisées par des communautés spécifiques, ces techniques se sont popularisées grâce aux avancées techniques et aux résultats spectaculaires obtenus sur les synchrotrons de 3^e génération. J'illustrerai cette évolution par des cas scientifiques récents, puis je discuterai les différentes perspectives scientifiques qui s'ouvrent sur les sources de 4^e génération.



Établir la relation Force – Distance – Structure

Patrick Kekicheff

ICS, Strasbourg

La nouvelle instrumentation mise au point après un effort continu de dix années, et dénommée SFAX, a déjà permis de comprendre l'origine et le mécanisme de l'attraction longue portée entre surfaces macroscopiques hydrophobes (centaine de nanomètres de portée ; amplitude deux à trois ordres de grandeur supérieure à celle des forces de dispersion de van der Waals) [1,2], sujet en débat depuis 40 ans et à présent clos. Notre SFAX couple la technique de mesure des forces de surface classique (mesure du profil force – distance par SFA, Surface Force Apparatus) avec une détermination de la structure du milieu confiné et sous contrainte par diffusion – diffraction X sur synchrotron (SAXS, WAXS). Il permet ainsi d'ouvrir le vaste champ inexploré de la *relation force – distance – structure* pour la matière condensée, les fluides supramoléculaires, et les interfaces. L'accent est mis sur la compréhension et le contrôle des interactions à la fois de courte et longue portée générées par la structure et l'organisation au voisinage des interfaces, qu'elles soient minérales, organiques, métalliques, électriées (comportement des liquides ioniques avec applications pour batteries), ou modifiées par l'adsorption de polymères, nanocolloïdes, tensioactifs, composites, protéines ou d'entités biologiques. L'upgrade de SOLEIL avec une qualité de faisceau encore meilleure (micro-faisceau, parallélisme, cohérence) permettra de mener des investigations encore plus fines. Ainsi, le rôle de l'ordre et du désordre au voisinage des surfaces, des défauts de structure, de micro-cavités, de nano-structuration, d'organisation orientationnelle (paramètre d'ordre), et les transitions de phase induites par confinement et sous contrainte seront particulièrement examinés. Les interactions directionnelles (dues à l'hydratation, aux complexes de coordination, aux dipôles et multipôles...) ou / et spécifiques (ligands – récepteurs, reconnaissance biologique, etc.) seront un champ d'investigation novateur et porteur, car leur mesure directe est un domaine encore vierge.

[1] Kékicheff, P. ; Iss, J. ; Fontaine, P. ; Johner, A.

Direct measurement of lateral correlations under controlled nano-confinement.

Physical Review Letters 120 (2018)118001.

[2] Kékicheff, P.

The long-range attraction between hydrophobic macroscopic surfaces.

Advances in Colloid and Interface Science 270 (2019) 1-25.



Dynamiques structurales photo-induites : apport des synchrotrons 4G aux échelles de temps ps- μ s

Claire Laulhé

Synchrotron Soleil, Gif sur Yvette

L'étude des dynamiques structurales aux échelles de temps picoseconde et sub-microseconde est un élément clef de la compréhension des cycles fonctionnels des protéines et des réactions chimiques, mais aussi des interactions fondamentales et instabilités de la matière condensée. La ligne de lumière CRISTAL@SOLEIL, dédiée à la diffraction des rayons X durs, propose l'étude des dynamiques structurales (ultra)rapides induites par impulsion laser [échelles de temps : 10 ps et plus]. Dans le cadre d'une prochaine jouvence de SOLEIL, les expériences dans le domaine temporel pourraient s'enrichir sous plusieurs aspects :

- **Résolution temporelle de l'ordre de 3 ps**, contre 10 ps actuellement, tout en gardant un flux de photons raisonnable pour les expériences.
- **Meilleures propriétés de cohérence du faisceau**, donnant accès à l'imagerie 3D résolue en temps.
- **Usage d'un faisceau polychromatique**, ouvrant la possibilité de résoudre des structures avec une résolution temporelle de l'ordre de la μ s.

L'exposé présentera ces différentes opportunités et leur impact scientifique.

Challenges in nanomaterials for batteries

Sandrine Lyonnard

IRIG-SyMMES, Grenoble

The in situ characterization of battery materials is needed to help designing safer and more efficient electrochemical devices. In particular, following in real-time the lithiation and ageing mechanisms require to use advanced non-destructive tools capable to probe the system during cycling. In this regard, synchrotron techniques provide unique capabilities in terms of spatial and time resolution to access the chemical, morphological and structural changes inside the electrodes and electrolytes at the relevant lengthscales, from molecular level to nano-, meso and micro-scales. We will survey the actual status of research on operando characterizations on batteries using the most advanced spectroscopic, imaging and scattering techniques.



Matière quantique : systèmes corrélés et isolants topologiques

Daniel Malterre

Institut Jean Lamour, Nancy

Les spectroscopies à haute énergie sont des techniques puissantes pour étudier les propriétés électroniques, magnétiques ... des matériaux quantiques. Cela sera illustré sur deux problématiques : les systèmes fortement corrélés (composés fermions lourds et supraconducteur haut T_c) et les isolants topologiques.

Les systèmes fortement corrélés sont caractérisés par plusieurs échelles d'énergie : typiquement une échelle d'énergie associée aux interactions électron-électron (quelques eV) et une échelle d'énergie émergente température Kondo ou gap supraconducteur (quelques meV ou dizaines de meV) ; ces différentes échelles d'énergie sont accessibles aux spectroscopies dans le domaine UV et X.

Nous expliquerons également comment l'obstruction à définir la phase des états de Bloch conduit à une topologie non triviale de la structure électronique des isolants. Cette topologie des états du volume se manifeste par des états de bord métalliques, polarisés en spin, que l'on peut étudier par photoémission.

Intérêt des techniques d'imagerie cohérente dans l'étude des matériaux complexes naturels et manufacturés

Laurent J. Michot

Laboratoire Phenix, Paris.

La plupart des géomatériaux solides étudiés en science de l'environnement (sols, sédiments, ...) ainsi que de très nombreux matériaux manufacturés (ciments, bétons, plâtres...) sont des objets à structure multi-échelle qui présentent une variabilité et une hétérogénéité importante. La compréhension et la prédiction de la réactivité, du transport, des propriétés mécaniques... de ces systèmes nécessite donc de combiner de multiples outils de simulation et de caractérisation. Parmi ces derniers, les techniques d'imagerie de rayons X tant dans le régime des X durs que des X mous présentent des intérêts spécifiques. L'augmentation de la brillance et de la cohérence apportée par le développement des nouvelles sources synchrotron pourrait dans ce cadre procurer de nouvelles opportunités. Sur la base d'exemples choisis de la littérature récente, nous tenterons donc d'analyser les gains potentiels de l'utilisation de sources X très cohérentes dans l'étude des matériaux complexes naturels et manufacturés.



Spectroscopie d'absorption X pour une approche moléculaire en sciences de l'environnement

Guillaume Morin

Institut de minéralogie, de physique des matériaux et de cosmochimie, Paris

La compréhension du fonctionnement de notre environnement nécessite d'identifier les mécanismes responsables des échanges d'éléments chimiques depuis les échelles moléculaires jusqu'à celles des interfaces terre-eau-biota-atmosphère. La spectroscopie d'absorption X qui sonde sélectivement l'état redox, la coordinance, les premiers ligands et l'environnement moléculaire d'un élément chimique donné dans des matrices complexes, est devenue incontournable en sciences de l'environnement. Ceci concerne par exemple la compréhension des réactions bio-géo-chimiques qui contrôlent la dispersion, l'immobilisation et la bio-remédiation des polluants. A partir de quelques exemples récents et un bref aperçu des possibilités actuelles, quelques enjeux méthodologiques seront présentés pour le futur.

Agrégats et complexes moléculaires sondés par du rayonnement VUV

Laurent Nahon

Synchrotron SOLEIL

La phase gaz permet l'étude d'objets isolés, libres de tout solvant ou substrat et sans interactions mutuelles, dont seules les interactions intra-systèmes sont à considérer. Dans ce contexte, un axe majeur d'étude de la matière diluée repose, dans une approche bottom-up de la complexité moléculaire à s'intéresser aux processus de croissance (agrégations) : de la molécule isolée à la phase condensée. Ces édifices supra-moléculaires (complexes de VdW, agrégats à base de liaisons H, peptides, jusqu'aux nanoparticules), possèdent des propriétés électroniques, structurales et de réactivité, spécifiques à leur taille, et que le Rayonnement Synchrotron permet d'étudier dans un régime linéaire, via des expériences résolues en fréquences.

L'un des grands enjeux du domaine repose sur la possibilité de travailler sur des agrégats triés en taille. L'excitation VUV, entraînant en général des fragmentations modérées et parfois contrôlées, associée à une détection électron/ion en coïncidence (i^2 PEPICO), offre des possibilités intéressantes d'accéder aux structures moléculaires et électroniques comme nous l'illustrerons dans le cas de clusters neutres de PAHs et d'eau triés en masse. Nous verrons aussi comment une observable chiroptique, telle que celle liée au dichroïsme circulaire de photoélectron (PECD), peut être une sonde fine de l'agrégation, voire de la nano-solvatation de la matière chirale.

Nous aborderons enfin le prolongement de ce type d'expérience dans le contexte de l'upgrade de SOLEIL, moins basé sur la qualité des photons à venir que sur l'amélioration et le développement de nouveaux dispositifs expérimentaux.



Resistance Mechanisms in Gram-negative bacteria under Synchrotron Lighting: new tools illuminating the antibiotic transport across biological membranes

Jean-Marie Pagès

UMR_MD1, U-1261, Aix-Marseille Univ, INSERM, IRBA, Marseille, France

The challenge in antibacterial research is a better understanding of factors that control the antibiotic penetration across bacterial membranes and its internal accumulation. These pivotal steps strongly depend on membrane-associated mechanisms of resistance that are the first line of bacterial defense and control the antibiotic concentration inside the cell. Consequently, the key point is to determine the real concentrations of antibiotics inside bacterial cell to characterize the factors modulating this internal accumulation.

New concepts, "Resident Time Concentration Close to Target" (RTC2T) and "Structure Intracellular Concentration Activity Relationship" (SICAR) are developed for studying the relationship between membrane permeability and antibiotic accumulation. The development of original methods of microfluorimetry and mass spectrometry combined with adapted protocols has enlightened the role of membrane transporters and of drug structure in the accumulation. The SICAR and RTC2T are now evaluated on - bacterial population and - individual bacterial cells, allowing the study of the interplays between the drug properties and the membrane-associated mechanisms of resistance.

Regarding the drug translocation through the biological membrane barrier, these approaches represent a breakthrough for understanding the antibiotic uptake and pave the way to generate structurally improved molecules with better access and retention within bacteria to combat the drug resistance.

Spectroscopie moléculaire à haute résolution spectrale dans l'IR lointain. Etat des lieux et perspectives

Olivier Pirali

Institut des sciences moléculaires d'Orsay

Notre équipe exploite l'émission synchrotron extraite par la ligne AILES du centre de rayonnement synchrotron SOLEIL pour étudier différentes familles de molécules dans l'IR lointain. Nous avons développé plusieurs dispositifs expérimentaux qui, associés à l'interféromètre Bruker de la ligne AILES, permettent d'obtenir des spectres résolus rotationnellement d'un grand nombre d'échantillon moléculaires. De plus, nos progrès récents concernant le mélange de la source synchrotron avec différentes sources laser nous permettent d'envisager d'importantes perspectives pour la spectroscopie moléculaire à ultra-haute résolution dans cette gamme du spectre.



Introduction à la diffusion cohérente et la diffraction en temps résolu

Sylvain Ravy

Laboratoire de Physique des Solides, Orsay

Cet exposé introduira de manière simple les notions de cohérence et de diffusion cohérente, tant du côté de l'imagerie (CDI: coherent diffraction imaging) que de celui des études de dynamique (XPCS: X-ray photocorrelation spectroscopy). Ceci mènera à une présentation rapide des expériences de diffraction pompe-sonde. L'influence des sources de 4e génération sur ces expériences sera discutée.

Synchrotron deep ultraviolet: recent evolutions and challenges

Mathieu Réfrégiers

Synchrotron Soleil, Gif sur Yvette

*Alexandre Giuliani, Frédéric Jamme, Frank Wien, Valérie Rouam, Mathieu Réfrégiers
Synchrotron SOLEIL*

Between vacuum ultraviolet and near ultraviolet, lies an energy range called deep ultraviolet (DUV), spanning from around 100 nm to 350 nm. Those wavelengths cover a wide range of band gaps in oxides and semiconductors and S0->S1 transitions in organic molecules. Therefore, it is perfect for absorption and emission spectroscopies; photoionization, photoactivation and photodetachment energies can be precisely measured. Moreover, widefield and raster-scanning imaging in the DUV are useful for markerless imaging.

A small selection of recent results collected at DISCO, a bending magnet beamline at synchrotron SOLEIL covering the unusual 1-21 eV energy range will be presented to illustrate some possibilities of DUV.

For example, the use of DUV fluorescence opens up new possibilities in biology because, it does not need external specific probes or labeling, but instead takes profit of the intrinsic fluorescence that arise from many biomolecules under deep ultraviolet excitation. Indeed, observation of label free biomolecules or active drugs ensures that the label will not modify the biolocalisation or any of its properties. UV monophotonic excitation does present real spectral excitation, leading the way to excitation imaging and a better selectivity of the chromophores. DUV excitation may also be used to track exogenous drugs or toxic compounds that present different spectral behaviour. Moreover, due to diffraction limits the lateral resolution is always increased when looking in the UV range allowing around one hundred nanometers spatial resolution as compared to visible lasers.

Lamps and lasers do not guarantee the high tuneability and stability of synchrotron radiation in this range. Another interesting property of synchrotron emission is very useful in the DUV; it is the natural elliptical emission of the photons with opposite directions in the vertical plane. It is useful for circular dichroism spectrography of organic molecules in solutions.

Concerning communities, synchrotron DUV is attracting users from ancient materials, biomedical sciences, geobiology, biophysics, physico-chemistry, chemistry and astrophysics. It is the only synchrotron energy range where one can study living cells in physiological conditions.

In the context of synchrotron upgrades toward diffraction limited emittance in the X-Rays, the possibility to extract DUV, keeping the natural properties of synchrotron radiation will be presented. Synchrotron radiation is already diffraction limited in the DUV, however the increase in the coherent fraction of the beam could be used to improve the lateral resolution and a dedicated extraction would enhance the DUV flux.



Effets d'interfaces pour la spintronique

Nicolas Reyren

Unité Mixte de Physique CNRS/Thales, Palaiseau

La spintronique, ou électronique de spin, évolue depuis une quinzaine d'année vers ce qu'il est convenu d'appeler la "spin-orbitronique". Cette désignation souligne l'importance du rôle de l'interaction spin-orbite dans l'évolution de la recherche. L'interaction spin-orbite permet, par exemple, de générer ou détecter des courants de spin purs (sans courant de charge associé), ou de stabiliser des textures magnétiques particulières à travers l'interaction Dzyaloshinskii-Moriya. Dans cet exposé, j'expliquerai d'abord comment les états de surfaces (interfaces Rashba ou surfaces d'isolants topologiques) peuvent être exploités pour détecter des courants de spin ou pour agir sur l'aimantation de couches magnétiques adjacentes au moyen de l'effet Edelstein. Pour bien comprendre ces phénomènes, il est crucial de bien caractériser les états de surface, non seulement la structure de bande, mais aussi la polarisation en spin de ces bandes. L'ARPES (résolu en spin) est donc un outil idéal. J'illustrerai aussi comment nous avons utilisé l'ARPES pour vérifier que les états de surfaces d'un isolant topologique particulier (l'étain gris en couche mince) peuvent être modulés ou supprimés lorsque d'autres matériaux (MgO, Al, Fe, Ag) sont déposés à sa surface pour exploiter ses propriétés dans un dispositif spintronique.

Environmental time-dependent XPS and the challenge of SOLEIL upgrade

François Rochet

Laboratoire de chimie physique-matière et rayonnement, Paris

Recently, XPS experiments in near-ambient pressure conditions (up to 20 mbar in the the soft X-ray regime) have shown that "realistic" solid/liquid, solid/gas and liquid/gas interfaces can be analysed by XPS, whereas this spectroscopy had long been confined to UHV conditions. XPS has also been extended to higher pressures (up to the atmosphere) in dedicated cells but these experiments require higher photon energies (in the tender to hard regime, as fas as silicon nitride windows are used). The advent of high brilliance, coherent sources are both a challenge but offer several facinating opportunities. NAP-XPS needs already a lot a flux due to the attenuation by the gas phase at pressures greater than 1mbar. Already for present synchrotrons, photon flux and doses may so high that fragile samples are destroyed. We shall discuss these adverse effects taking as an illustrative example, the case of confined water in a porous material (clays).

However, it is very sad that the first common reaction when the upgrade is considered is to tackle this damage issue by detuning the undulator! In fact, high brilliance small X-ray spots should offer unique advantages for instance in the field of combinatorial chemistry, when high-throughput experimental outputs are needed from an array of spots where various reactants with various concentrations are mixed to react. In fact the main issue lies in the fabrication of such arrays, where likely advanced microfluidics should be used. The second advantage of a



higher flux is the possibility of carrying out fast photoemission and follow kinetics with chemically meaningful spectra at a pace in the ms range or less. First attempts were realized at TEMPO beamline not so long ago with useful spectra measured every 20 ms or so. This can be clearly improved by a higher flux. The question of beam damage should also be tackled, by displacing the spot. Electron analyzers more efficient than classical hemispherical ones could also be envisaged (TOF?).

Finally the coherent nature of the radiation should also be considered and combined with photoemission. Coherent diffractive imaging could be used to study the morphology of clusters on surfaces, with ad hoc (thin) samples. This combination may be particularly useful in some topics such as catalysis, where the active nanoparticles are dynamically affected during the reaction. The question of combining both soft and tender/hard X-rays on the same sample could be particularly interesting if coherent Bragg diffraction imaging is combined with photoemission. It is remarkable that many environmental beamlines in the world combine both soft and hard X-rays undulators.

La recherche exploitant les caractéristiques du rayonnement synchrotron sur la ligne AILES

Pascale Roy

Synchrotron Soleil, Gif sur Yvette

Au sein de la ligne AILES, l'exploitation du rayonnement synchrotron permet de couvrir une gamme spectrale très large s'étendant du visible aux TéraHertz. Nous présenterons différentes études spectroscopiques pour lesquelles l'utilisation du rayonnement synchrotron a été nécessaire, notamment pour la caractérisation d'échantillons de très petites dimensions, pour l'extension des mesures à de très basses énergies ou pour les mesures à très haute résolution.

Nous montrerons que dans le cadre de "l'upgrade" du synchrotron SOLEIL, l'extension vers des énergies encore plus basses avec des gains en intensité dans le térahertz et les lointains infrarouges présenterait des avantages pour de nombreux systèmes.



New opportunities in glass science with X-ray photon correlation spectroscopy

Benoit Rufflé,

Laboratoire Charles Coulomb, Montpellier

The dramatic increase in the coherence of the x-ray beam delivered at ESRF-EBS will provide new exciting opportunities for coherence based applications. We will review the implications for X-ray Photon Correlation Spectroscopy (XPCS) applied to glass science.

XPCS is actually the sole technique able to probe the dynamics at the atomic length scale and over time scales corresponding to the glass transition region.

Dichroïsmes magnétiques, circulaires et linéaires à l'aube de l'avènement des sources de 4e génération

Philippe Saintavit

Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie, Paris

Nous présenterons les caractéristiques essentielles que les lignes de lumières doivent posséder pour permettre la réalisation de mesures de dichroïsmes dans le domaine des rayons durs et mous (X-ray Magnetic Circular Dichroism, X-ray Magnetic Linear Dichroism, X-ray Natural Linear Dichroism, X-ray Natural Circular Dichroism et X-ray Magneto-Chiral Dichroism). En illustrant par quelques résultats emblématiques obtenus sur les anneaux européens, nous soulignerons les éléments nécessaires des lignes et des sources de 3^e génération : stabilité spectrale, degré de polarisation, sources accordables.

Dans une démarche prospective, nous montrerons comment les up-grades de l'ESRF et de SOLEIL pourront être une opportunité pour la réalisation de mesures dichroïques avancées. Nous tâcherons aussi de souligner les éventuelles contraintes que ces nouvelles sources pourraient faire peser et les solutions qui pourraient se dessiner.



Dynamique femtoseconde et subfemtoseconde observée par photoémission en phase gazeuse dans le domaine des rayons X durs

Marc Simon

LCPMR, Paris

La photoémission à haute énergie d'atomes et de molécules en phase gazeuse permet l'observation de fort recul translationnel, vibrationnel et rotationnel [1-3]. Les surfaces de potentiel moléculaires des états créés après relaxation Auger peuvent être si répulsives que des dynamiques nucléaires sub-femtosecondes sont observées [4-5]. La spectroscopie des états à doubles lacunes en couche interne, dont les surfaces de potentiel peuvent être déterminées [6], a été mesurée à haute énergie [7-8]. Le processus Auger en cascade ayant lieu après l'ionisation en couche profonde donne lieu à un effet post-collisionnel très fort [9]. Les ions très multiplement chargés formés permettent d'étudier la localisation des lacunes créées [10]. Le gain en brillance après l'upgrade de SOLEIL vers 10 keV ouvrira la voie à des recherches absolument inédites.

[1] M. Simon et al., Nature Communications 5 4069 (2014)

[2] E. Kukk et al., Physical Review Letters 121 073002 (2018)

[3] D. Céolin et al., PNAS 116 4877 (2019)

[4] O. Travnikova et al., Physical Review Letters 116 213001 (2016)

[5] O. Travnikova et al., Physical Review Letters 118 213001 (2017)

[6] T. Marchenko et al., Physical Review Letters 119 133001 (2017)

[7] R. Püttner et al., Physical Review Letters 114 093001 (2015)

[8] G. Goldsztejn et al., Physical Review Letters 117 133001 (2016)

[9] R. Guillemin et al., Physical Review Letters 109 013001 (2012)

[10] R. Guillemin et al., Nature Communications 6 6166 (2015)



Amélioration drastique des performances d'imagerie X 2D/3D multi technique et multi-échelle sur une source fortement cohérente et d'émission extrêmement réduite

Andrea Somogyi

Synchrotron Soleil, Gif sur Yvette

L'émission extrêmement réduite et le fort gain en cohérence des sources de 4^{ème} génération va permettre d'ouvrir des méthodes révolutionnaires d'imagerie X par balayage appliqué à l'exploration quantitative de systèmes hétérogènes. En effet ces techniques d'imagerie X vont directement profiter des propriétés exceptionnelles de ces nouvelles machines et vont permettre d'augmenter drastiquement la cohérence et le flux de photons (~deux/trois ordres de grandeur) des nano faisceaux. Par conséquent, les méthodes considérées aujourd'hui comme lentes tels que la tomographie par fluorescence X, la ptychography ainsi que les techniques d'imagerie combinées deviendront suffisamment rapides pour être proposées comme technique standard à l'ensemble de la communauté des utilisateurs. Cette possibilité unique permettra d'explorer les distributions 2D/3D d'éléments de trace et ultra-traces dans leur contexte morphologiques et chimiques de façon statistiquement significative. Par exemple, l'étude d'interfaces et de couches minces de quelques nanomètres dans les conditions naturelles ou « in operando » profitera fortement de ces nouvelles performances d'imagerie X. La richesse des informations multimodales et multi-échelles qu'il sera possible d'extraire et que seules ces techniques pourront apporter, permettra de répondre à des questions scientifiques cruciales aujourd'hui non élucidées.

Durant cet exposé, je présenterai tout d'abord l'apport de l'upgrade du Synchrotron Soleil sur l'amélioration des performances d'imagerie X par balayage puis j'illustrerai les bénéfices d'une telle évolution technique par quelques exemples mesurés actuellement sur Nanoscopium en les projetant sur une source de 4^{ème} génération.



Ordres magnétiques et électrique chiraux dans les matériaux multiferroïques

Michel Viret

SPEC, CEA, CNRS, Université Paris Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France.

La chiralité, un concept fondamental en science, peut exister aux parois de domaines ferromagnétiques ou dans des objets topologiques comme les skyrmions. Une abondante littérature est apparue ces dernières années sur les applications possibles de ces objets et en particulier leur potentiel dans la logique basée sur le magnétisme. Des textures chirales devraient aussi exister dans d'autres ordres ferroïques comme les antiferromagnétiques pour lesquels des études théoriques prédisent qu'elles peuvent bouger plus vite et à plus basse énergie, ainsi que dans les ferroélectriques où elles sont attendues plus petites et avec des topologies plus exotiques. De nombreux efforts sont maintenant déployés dans la communauté pour générer ces structures, mais avec un succès pour l'heure limité.

Je présenterai ici les premières observations de ces objets chiraux dans les multicouches ferromagnétiques et aux parois de domaines dans l'antiferromagnétique ferroélectrique BiFeO_3 . Ces observations combinent des techniques d'observation spatiales comme la magnétométrie en centre NV, mais surtout la diffraction résonnante en X mou. Ces mesures sont illustrées par des simulations numériques qui reproduisent les structures observées. Les mécanismes responsables de leur apparition seront discutés et leur pertinence pour la spintronique évoquée.

Microscopie à émission de photoélectrons (PEEM) pour l'imagerie chimique et magnétique de surfaces, couches minces et nanostructures

Jan Vogel

Institut Néel, Grenoble

L'imagerie PEEM utilise la sélectivité chimique et magnétique de l'absorption des rayons X pour l'étude de surfaces, couches minces et nanostructures. Elle permet d'obtenir des informations détaillées sur les configurations magnétiques non-colinéaires avec une résolution spatiale de l'ordre de 20-25 nm, avec une sensibilité de moins d'une monocouche. En combinaison avec la structure temporelle des rayons X, elle permet aussi l'étude de la dynamique de l'aimantation en mode pompe-sonde. Des développements pour améliorer les résolutions spatiale et temporelle en relation avec les nouvelles sources de rayons X, ainsi que les limites, seront discutés.



Time-resolved crystallography to watch proteins at work

Martin Weik

IBS, Grenoble

Proteins are the molecular engines of life. Their broad range of biological tasks and functions is reflected in the large diversity of specific dynamical characteristics they display on a broad time scale. A large number of experimental techniques exist that each opens a specific window onto macromolecular dynamics on a particular time scale. Among those, time-resolved crystallography allows watching proteins *at work* at atomic resolution. Recently, the advent of X-ray free electron lasers pushed the resolution in time-resolved crystallography down to sub-picoseconds, allowing to follow ultra-fast macromolecular processes such as vision, bioluminescence and other phenomena. Most biomolecular processes, such as enzyme catalysis, are much slower, however, and take place on the micro- to millisecond time scale. The increased flux of 4th generation synchrotron sources will allow those micro- to millisecond motions to be studied by serial synchrotron crystallography.

