



**DOSSIER DE  
DEMANDE D'AVANCEMENT  
AU TITRE DE LA CAMPAGNE  
2014**

Indiquez le grade pour lequel vous demandez un avancement : DRCE1

**Nom d'usage :** .....LE BAIL..... **Prénom :** .....Armel.....

**Date de naissance :** ....16 juin 1950.....

**Section du Comité national :** .....15.....

**Affectation** (code et intitulé de l'unité de recherche) : UMR6283 / Institut des Molécules et des Matériaux du Mans (IMMM)

**Ville :** .....Le Mans..... **Nom du directeur** .....Jean-Marc GRENECHE.....

\*\*\*\*\*

# FICHE-RÉSUMÉ

## 1 – Contributions scientifiques

Les travaux effectués ont conduit à 194 publications (dont 49 comme unique auteur) en caractérisation et modélisation du solide, développement de méthodes ou applications de ces méthodes, en diffraction des rayons X ou neutrons ou par EXAFS, sur poudre ou monocristal, de composés cristallisés ou d'amorphes, de fluorures ou d'oxydes, réels ou virtuels. Plus de 3600 citations au Web of Knowledge, plus de 250 par an avec tendance à la hausse (soit une forte probabilité de d'atteindre 6000 citations d'ici 10 ans); index de Hirsch actuel  $h = 28$  qui devrait rapidement dépasser les 30.

L'originalité réside dans le fait que beaucoup de ces caractérisations structurales ou microstructurales en chimie du solide ont été permises par des développements personnels spécifiques de nouveaux algorithmes et logiciels innovants, utilisés pour l'interprétation des données de diffraction de poudre de composés cristallisés ou amorphes, le traitement des problèmes de maclages (etc) ou encore, dernièrement, la prédiction des structures cristallines. Douze logiciels "maison" sont encore distribués en mode « Open Source »: SIZEDIST (estimation de distribution de taille des domaines homogènes de diffraction cohérente), ARIT (méthode de Rietveld, anisotropie des élargissements des raies de diffraction, extraction des intensités par "méthode Le Bail"), ARITVE (modélisation de la structure des amorphes), HKLGEN (calcul de listes d'indices de Miller), OVERLAP (traitement du chevauchement des réflexions d'un diagramme de poudre), TMACLE (affinement de structure sur monocristal en dépit d'un maillage), STRUVIR (représentation graphique VRML), NOCHAOS (construction de modèles de structure pour amorphes), GLASSVIR (représentation graphique VRML pour amorphes), ESPOIR (détermination de structure sur poudre dans l'espace direct), McMaille (indexation des diagrammes de poudre), GRINSP (prédiction de structures inorganiques). Mais seuls les 3 derniers sont encore fréquemment utilisés.

Les travaux au plus fort impact scientifique concernent donc les méthodes de détermination de structure *ab initio* par diffractométrie des poudres. Environ un millier de structures (plus de 50% du total) ont été déterminées d'après des intensités extraites de diagrammes de diffraction de poudre par la "méthode Le Bail" (dont plus d'une soixantaine au Mans), incorporée dans la plupart des codes de type Rietveld (GSAS, Fullprof, WinMPROF, RIETAN, TOPAS, etc). Mon article le plus cité (>1300 fois dans la *Science Citation Index*) s'intitule "Ab-initio structure determination of  $\text{LiSbWO}_6$  by X-Ray powder diffraction" (A. Le Bail, H. Duroy & J.L. Fourquet, *Mat. Res. Bull.* **23** (1988) 447-452) et est l'article le plus cité du journal *Material Research Bulletin*. C'est aussi l'article le plus cité jamais publié à l'Université du Maine, de très loin, les rares suivants plafonnent à ~500 citations.

Le "rayonnement international" se mesure par 38 invitations à donner des conférences; par le fait que la liste de discussion SDPD (Structure Determination by Powder Diffractometry) créée en 1999 avec Lachlan Cranswick (décédé en 2010) a été proche des 800 abonnés (mais fermée cette année). En outre, une cinquantaine d'étudiants de niveau PhD (en grande majorité étrangers) se sont inscrits au « **SDPD Internet Course** » créé en 1999 (<http://sdpd.univ-lemans.fr/DU-SDPD/>). Plus de 4000 fichiers en rapport avec la cristallographie sont téléchargés chaque jour sur le site Web <http://www.cristal.org/> et ses miroirs. La "méthode Le Bail" est dorénavant passée dans le domaine du classique, la plupart du temps exploitée sans que cela conduise à une référence bibliographique, simplement citée dans le texte et le résumé des articles scientifiques par "Le Bail fitting" ou "Le Bail method" (pour un exemple d'utilisation intensive sans citation voir *Acta Cryst B* **66**, 2010, 184-195). Le nombre réel des articles scientifiques y faisant appel pour diverses raisons est donc très supérieur aux >1300 citations du Web of Knowledge (Thomson - ISI) ou aux >1600 de Google Scholar. Une invitation à rédiger un article sur ce sujet pour le futur Volume H (Powder Diffraction) des **Tables Internationales de Cristallographie** représente une touche finale de reconnaissance, 27 ans après l'établissement de cette méthode.

Les activités originales les plus récentes étaient orientées dans le domaine de la prédiction des structures de composés inorganiques. Logiciel GRINSP, bases de données PCOD et P2D2 contenant >1000000 composés virtuels, conduisant à une dizaine de publications, incluant la prédiction des structures d'octaèdres connectés par sommets ( $\text{MX}_3$ ), ce qui change des sempiternelles zéolithes prédites à millions (tétraèdres connectés par sommets -  $\text{MX}_2$ ). Projet blanc ANR refusé en 2005, dommage, c'est un avenir pourtant incontournable que la prédiction, conséquence logique d'une réelle et parfaite connaissance de l'état cristallin qui manque encore, c'est manifeste.

### **Choix de 5 de vos publications les plus significatives (références complètes)**

#### **Sélection d'articles ou de chapitres de livres à signature unique.**

- 1) "Structure Solution." A. Le Bail, Chapter 7 in "Principles and Applications of Powder Diffraction, Ed. A. Clearfield, J.H. Reibenspies & N. Bhuvanesh, Wiley-Blackwell, Oxford (2008) 261-309.
- 2) "The profile of a Bragg reflection for extracting intensities." A. Le Bail, Chapter 5 in: Powder Diffraction: Theory and Practice, Ed. R.E. Dinnebier & S.J.L. Billinge, Royal Society of Chemistry, Cambridge (2008) 134-165.
- 3) "Inorganic structure prediction with GRINSP." A. Le Bail, *J. Appl. Cryst.* **38** (2005) 389-395.
- 4) "Modelling the Silica Glass Structure by the Rietveld Method." A. Le Bail, *J. Non-Cryst. Solids*, **183**, 39-42 (1995).

5) "Whole powder pattern decomposition methods and applications - A retrospection". A. Le Bail, *Powder Diffraction* **20** (2005) 316-326.

Production scientifique	depuis le début de votre carrière	dont ces 10 dernières années	dont ces 4 dernières années
Nombre de publications dans des revues avec comité de lecture	153	40	18
Nombre de publications dans des actes de colloque avec comité de lecture	35	12	2
Nombre de logiciels	13	3	0
Nombre de conférences invitées dans des congrès internationaux	38	16	0 acceptée
Nombre d'ouvrages ou de participations importantes à des ouvrages	6	3	1 ↓

### Programme de recherche (titre et ésumé)

#### Oxydes et Fluorures, caractérisations

Publication prévue de 7 articles entre septembre 2014 et juin 2015, date de départ à la retraite. Applications de mes logiciels (McMaille, ESPOIR) de cristallographie à des problèmes de détermination de structure sur poudre.



"Data reduction to  $|F_{hkl}|$ " A. Le Bail, *International Tables for Crystallography, Vol. H, Powder Diffraction, to be published (2015).*

## 2 - Enseignement, formation et diffusion de la culture scientifique

### Enseignement

- Maître assistant à l'Université d'Oran, 1977-1981. Cours, TD et TP de chimie minérale, atomistique, cristallographie, etc.
- de 15 à 20 heures de cours par an de 1992 à 2006 au niveau Master 2 (méthodes avancées en diffraction de poudre).
- 40 heures équivalent TD par an de 1999 à 2006 calculées pour la prise en charge annuelle de 8 étudiants (niveau PhD) à distance du Diplôme d'Université SDPD (Structure Determination by Powder Diffractometry) (<http://sdpd.univ-lemans.fr/course/>) dont je suis le créateur.

### Organisation de Workshop

- 1999 : Ecole thématique : IUCr Kunming Workshop (Chine) – Méthode de Rietveld et détermination de structure par diffractométrie des poudres - seul intervenant avec R.A. Young.
- 2000-2008 : Membre des comités de programmes de diverses écoles et workshops de cristallographie en Egypte, au Maroc, en Algérie.

### Encadrement (ayant conduit à 38 publications co-signées)

- 1985-2010 : Co-encadrement ponctuel et non officiel de 12 thésards au Laboratoire des Fluorures.
- 1988-2010 : Divers stagiaires espagnols (P. Amoros, R. Ibanez) ou algérien (S. Ouhenia) pour initiations aux méthodes de détermination de structure sur poudre.
- 1994-1995 : Post-doc européen (Bourse "Capital Humain et Mobilité" = bourse Marie Curie) Thomas Hansen, actuellement permanent à l'ILL.
- 1999-2006 : 49 étudiants suivis à distance dans le cadre du diplôme d'université SDPD (Structure Determination by Powder Diffractometry).
- 2001 : Accueil de Xiaolong Chen (Académie des Sciences de Beijing) pendant 3 mois pour une collaboration dans le domaine des déterminations de structure par la méthode des poudres. Grave accident de voiture 15 jours après son arrivée (11 septembre 2001), partis tous les deux chercher des champignons, un samedi, une voiture en face perd le contrôle dans un virage et nous percute. Au moins, lui est indemne.
- 2006 : Accueil d'un stagiaire de Master 2 ( Massinissa Oumsalem) sur le sujet de la prédiction de structure cristalline.

### Diffusion de culture scientifique

- 1995 : Création d'un site Web spécialisé en cristallographie (<http://www.cristal.org/>)
- 1998 : Organisation du SDPD Round Robin : test en aveugle pour évaluer l'efficacité des méthodes de détermination de structure par diffractométrie des poudres.
- 1998 : Hébergement Web des archives de la liste de discussion sur la méthode de Rietveld, avec moteur de recherche.
- 1999 : Co-fondation avec Lachlan Cranswick de la liste de discussion SDPD (> 800 inscrits jusqu'en 2014).

- 2002 : Organisation du SMRR (Search-Match Round Robin) et du SDPDRR-2 (Structure Determination by Powder Diffractometry Round Robin 2).
- 2003/4 : Organisation des UPPWs (Unindexed Powder Pattern of the Week) et proposition des "indexing benchmarks".
- 2005 : Organisation de la "Petition for Open Data in Crystallography" en Mai 2005. Plus de 1800 signatures, dont celle de Richard J. Roberts, prix Nobel et Karimat El-Sayed, Prix L'Oréal-Unesco.
- 2008 : Organisation du SDPDRR-3 (Structure Determination by Powder Diffractometry Round Robin 3).

### 3 - Transfert technologique, relations industrielles et valorisation

#### **Contrats ayant permis de survivre (achat d'ordinateurs, de logiciels, financement de déplacements aux congrès) :**

- 1995 : Contrat de 5000 US\$ avec la société Procter & Gamble (New York) pour une détermination de structure sur poudre (subsalicylate de bismuth).
- 1997 : Contrat de 5000 US\$ avec la société Hydro-Aluminum (Hollande) pour la détermination de structure de  $\alpha$ -NaCaAlF<sub>6</sub>.
- 2000 : Contrat de 20000 US\$ avec la Compagnie Dupont de Nemours (Richard Harlow, USA) pour améliorer le logiciel ESPOIR de détermination de structure par diffractométrie des poudres.
- 1999-2006 : environ 30000€ de droits d'inscription au cours Internet SDPD.
- 1999-2009 : Contrats pour recherches sur des composés pharmaceutiques divers, en particulier, analyses quantitatives de mélanges de variétés  $\alpha$  et  $\beta$  de thalidomide par la méthode de Rietveld, structure du chlorure de bethanechol, etc.

#### **Banques de données (disponibles sur un serveur dans mon bureau ou ailleurs, actuellement en Lituanie) :**

- 1992 : Création de SDPD-D (Structure Determination by Powder Diffractometry-Database)
- 2003 : Organisation de la "Crystallography Open Database" (COD) : <http://www.crystallography.net/>.
- 2004 : Organisation de la "Predicted Crystallography Open Database" (PCOD) : <http://www.crystallography.net/pcod/>
- 2007 : Lancement de P2D2 (Predicted Powder Diffraction Database) : <http://www.crystallography.net/pcod/P2D2/>
- 2007 : L'IUCr donne son accord pour l'incorporation systématique de ses fichiers CIF dans la COD.
- 2008 : Transfert de la coordination de la COD et du lieu d'hébergement de la base de donnée du Mans à Vilnius (Lituanie).

Ces bases de données COD/PCOD/P2D2 sont adoptées et distribuées par la plupart des fabricants de diffractomètres à poudre et/ou des vendeurs de logiciels d'identification de phase par "search-match" (Bruker, Rigaku, PANalytical, Crystal Impact). La base des composés réels (COD) contient ~300000 entrées, en forte augmentation annuelle (~60000/an).

#### **Logiciels (derniers développés)**

- 1999-2001 : programme ESPOIR (détermination de structure dans l'espace direct)
- 2002-2006 : programme McMaille (indexation de diagramme de poudre par méthode Monte Carlo).
- 2004-2010 : logiciel GRINSP (prédiction de structure cristalline)

### 4 - Responsabilités collectives et management de la recherche

#### **Comités de lecture**

Journal of Applied Crystallography; Acta Crystallographica A, B, C, E; Zeitschrift für Kristallographie; Powder diffraction; Journal of Solid State Chemistry; Solid State Sciences

#### **Communauté scientifique internationale**

A diverses reprises, membre de commissions de l'Union Internationale de Crystallographie (Crystallographic Computing Commission, etc).

#### **Instances d'évaluation**

Section 33 - Université du Maine (membre suppléant jusqu'en 2006).

#### **Management**

**-1990-1995:** Créateur et responsable d'un thème de recherche reconnu au Laboratoire des Fluorures. Ce thème n'a été présenté que dans un seul des rapports scientifiques du laboratoire : dissolution autoritaire, conséquence des restructurations forcées, passage obligé du nombre de thèmes de 6 à 2, élimination des thèmes horizontaux (multidisciplinaires) survivance des seuls thèmes verticaux (fluorures cristallins et vitreux, oxydes).

**-2003-2008:** Coordinateur du conseil d'administration de la COD (Crystallography Open Database: <http://www.crystallography.net/>) et de PCOD (P=Predicted) dont les membres actuels sont Daniel Chateigner, Xiaolong Chen, Marco Ciriotti, Lachlan M.D. Cranswick, Robert T. Downs, Saulius Grazulis, moi-même, Luca Lutterotti, Yoshitaka Matsushita, Peter Moeck, Miguel Quirós Olozábal, Hareesh Rajan, Alexandre F.T. Yokochi. Cette banque de données s'inscrit dans le courant "Open Data" visant à rendre accessibles les données cristallographiques de petites

molécules et composés inorganiques gratuitement sur le Web (ainsi qu'il est possible pour les protéines avec la base de données PDB). Les membres communiquent sur une liste de discussion (CRYOD: <http://fr.groups.yahoo.com/group/cryod/>). En janvier 2008, Saulius Grazulis prend la relève et devient coordinateur. Le serveur principal migre de mon bureau en Lituanie. Une équipe lithuanienne de développeurs motivés assure la pérennité.

## 5 - Mobilité

### Interne

1974-1976 - Thèse de 3ème Cycle, Rennes. DEA et thèse de cristallographie après une formation de géologue.

1977-1981 : Séjour professionnel prolongé à l'étranger : maître assistant à l'Université d'Oran, Algérie.

1981 : Recrutement CNRS (chargé de recherche) au Mans, sur le sujet de la structure des verres fluorés (EXAFS, Diffusion des rayons X, neutrons, modélisation. Thèse d'Etat en 1985.

### Externe

Pratiquée via l'Internet depuis 1993. A ce propos, l'Internet est un excellent moyen d'irrigation pour certains sujets de recherche méthodologiques (création et suivi de listes de discussion - "faire école" - ou de sites Web spécialisés).

### Thématique

1976 : Elargissement des raies de diagrammes de diffraction (thèse de 3ème Cycle).

1981 : Verres fluorés : approche de la structure par EXAFS et méthodes de diffraction (R.X., neutrons) (Thèse d'Etat).

1987 : Méthodes de détermination de structure *ab initio* par diffractométrie des poudres.

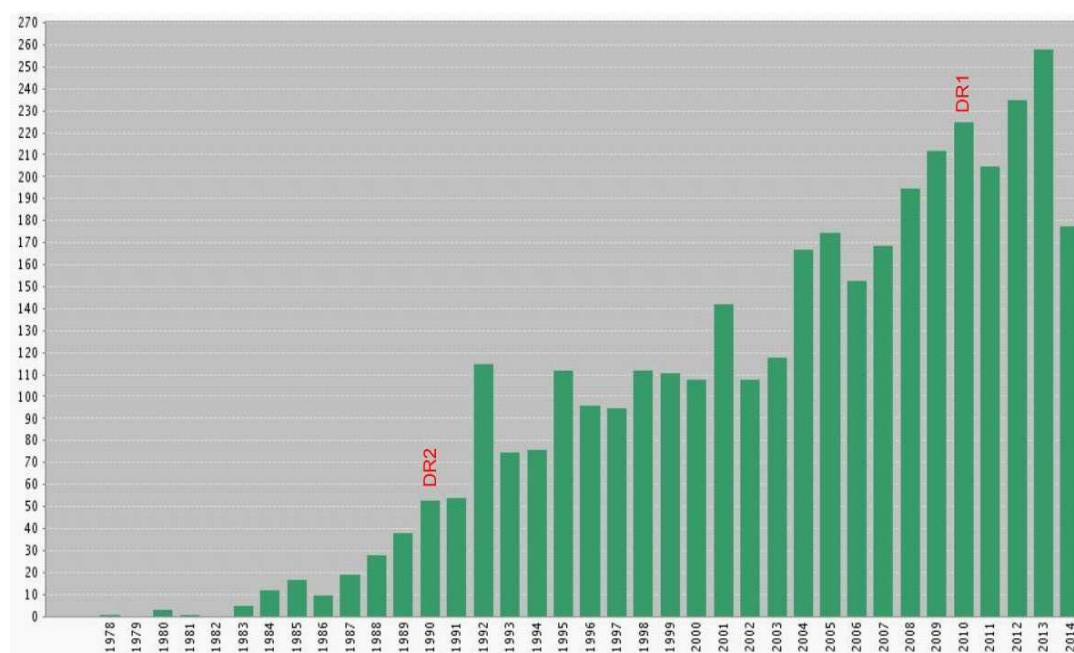
2000-2010 : Méthodes Monte Carlo (logiciels ESPOIR, McMaille, GRINSP).

2004-2014 : Prédiction de structures et propriétés cristallines – C'est clairement l'avenir de la chimie du solide : être capable de prévision globale des structures et propriétés de tout ce qui est physiquement et chimiquement possible, afin de choisir les synthèses à réaliser en toute connaissance de cause (pour une application précise). La pertinence de l'objectif me paraît totale: ce sera la fin des méthodes d'investigation qualifiées de "pêche à la ligne". Ce n'est pas pour tout de suite, naturellement, mais il faut s'y atteler dès maintenant. Pour moi, c'est LE grand défi pour la chimie théorique du 21<sup>ème</sup> siècle, nécessitant une approche pluridisciplinaire (appel aux spécialistes des calculs *ab initio* pour classer les modèles structuraux par énergie et prédire les propriétés, réclamant aussi un considérable et décisif développement de la physique quantique pour application en modélisation).

2009-2014 : Reprise d'une activité principale de caractérisation cristallographique d'oxydes et de fluorures.

### Thématiques dans un futur proche

Juin 2015 : Retraite en partie consacrée à la production de fichiers CIF pour la base de données COD.



Citations des 147 articles répertoriés par le Web of Science (septembre 2014). Il manque 5 chapitres de livres, et 35 articles publiés dans des comptes rendus de colloques, newsletters de cristallographie, etc. Enfin, 7 articles sont à paraître en 2015 dont un chapitre du futur Volume H des Tables Internationales de Cristallographie : une 'consécration' finale, quelque part.

The End