

XLIV CONGRESSO DELL'ASSOCIAZIONE ITALIANA



CRISTALLOGRAFIA

*Eleonora Conterosito¹, Gianluca Croce¹, Domenica Marabello²,
Marco Milanese¹, Valentina Toson¹*

¹Dipartimento di Scienze

e Innovazione Tecnologica (DiSIT)

Università del Piemonte Orientale

²Dipartimento di Chimica

Università di Torino

marco.milanesio@uniupo.it



UNIVERSITÀ DEL PIEMONTE ORIENTALE

Centoottanta cristallografi operanti nei campi di chimica, scienza dei materiali, biologia strutturale, scienze della terra, fisica e ingegneria hanno partecipato al XLIV congresso AIC (Vercelli, settembre 2015). Al programma scientifico multidisciplinare di altissimo livello si sono aggiunti vari eventi satellite tra cui il I incontro nazionale dei biologi strutturali e l'accordo tra CRUI/CARE e CCDC, per diffondere l'uso della banca dati CSD a vantaggio dell'intera comunità scientifica italiana.

Il XLIV Congresso dell'Associazione Italiana di Cristallografia (AIC) (<http://www.cristallografia.org/congresso2015/>) è stato organizzato a Vercelli, nei giorni 14-18 settembre 2015, presso il Complesso Universitario "San Giuseppe" dell'Università del Piemonte Orientale dal locale gruppo di ricerca cristallografica, presieduto da Marco Milanese, con il supporto di Domenica Marabello dell'Università di Torino. Il congresso chiude la serie di attività svoltesi in Piemonte per celebrare l'anno internazionale della cristallografia, culminati con la mostra "Cristalli... ad arte!"



(<https://www.facebook.com/mostracristalliadarte>) e, idealmente, li collega agli eventi che si organizzeranno nel 2017, anno in cui ricorrerà il 50° anniversario della fondazione dell'Associazione Italiana di Cristallografia (<http://www.cristallografia.org/>).

Hanno affiancato il Congresso due *satellite meetings*, il primo intitolato "Multivariate DOE and PCA Methods in Materials Science", organizzato da Valentina Gianotti (UNIUPO) e da Rocco Caliandro (IC-CNR, Bari), il secondo intitolato "1st Annual Gathering of Italian Structural Biologists" (organizzato da Menico Rizzi (UNIUPO) e da Rita Berisio IBB-CNR, Napoli). Nell'insieme, i tre eventi hanno portato a Vercelli oltre 180 scienziati operanti in chimica, scienza dei materiali, biologia strutturale, scienze della terra, fisica e ingegneria, tra cui alcuni ospiti stranieri come Jan Pieter Abrahams (PSI, Villigen) e Lukas Palatinus (Institute of Physics, ASCR, Praga), pionieri dello studio delle strutture atomiche di proteine e di materiali mediante tecniche di diffrazione elettronica. La multidisciplinarietà dell'evento ha permesso un fruttuoso scambio di conoscenze e la nascita di nuovi progetti e collaborazioni. Il Congresso AIC di Vercelli verrà infine ricordato per aver riunito per la prima volta la gran parte dei biologi strutturali italiani. Durante la cerimonia di inaugurazione, a cui erano presenti la Direttrice del Dipartimento DiSIT, Graziella Berta, in rappresentanza dell'Università del Piemonte Orientale, il Presidente dell'AIC, Giuseppe Zanotti (UNIPD), Alessia Bacchi (UNIPR), Presidentessa della European Crystallographic Association (ECA), e Marco Milanese (UNIUPO), chairman del comitato organizzatore, sono stati consegnati i premi a Stefano Canossa (UNIPR) e a Fabio Orlandi (UNIPR), rispettivamente per la miglior tesi di laurea e di dottorato. Sono inoltre stati conferiti i premi Nardelli e Mammi a Ferdinando Costantino (UNIPG) e ad Angelo Gavezzotti (UNIMI).

Oltre al programma scientifico, i congressisti hanno apprezzato l'efficienza del Polo Universitario S. Giuseppe e della sua aula informatica utilizzata per le esercitazioni pratiche, la bellezza dell'Aula Magna e l'accoglienza della residenza universitaria Dal Pozzo. Inoltre, negli eventi collaterali, i congressisti hanno potuto assaporare le peculiarità gastronomiche del vercellese e le sue bellezze turistiche, specialmente durante la "passeggiata serale per Vercelli".

Il programma scientifico

Il programma preparato dal comitato scientifico (Enrico Mugnaioli - UNISI, Mauro Gemmi - IIT Pisa, Patrizia Rossi - UNIFI, Silvia Rizzato - UNIMI, Angela Altomare - IC CNR Bari, Antonino Martorana - UNIPA, Alessandro Gualtieri - UNIMORE, Dorian Lamba - IC CNR Trieste) ha rispecchiato la multidisciplinarietà dell'argomento includendo 7 microsimeposi, 4 plenary lectures, 2 poster sessions.

Le plenary lectures hanno introdotto ogni giornata del congresso e sono state tenute da scienziati di rilievo, quali Jan Pieter Abrahams e Lukas Palatinus, di cui si è detto sopra, Bartolomeo Civalieri, uno degli sviluppatori di CRYSTAL14, codice di riferimento per il calcolo *ab initio* di strutture periodiche, e Marco Cammarata, pioniere nel campo degli studi ad altissima risoluzione temporale di strutture in movimento.

I 7 microsimeposi, di cui sono riportati tutti i contributi orali nel programma, sono stati introdotti da due keynote lectures e hanno coperto i diversi campi di applicazione e le nuove frontiere della caratterizzazione strutturale, spaziando dalla biochimica alla scienza dei materiali e dagli sviluppi teorici alle applicazioni, descritti dal punto di vista di E. Conterosito e V. Toson, che hanno gestito le sale dove si è tenuto il congresso.



Il primo microsimeposio "From Nature to Advanced Materials: Structure Characterization at the Nanoscale" è stato curato dai chair Mauro Gemmi ed Enrico Mugnaioli, i quali hanno contribuito in maniera rilevante allo sviluppo ed al recente successo delle tecniche di diffrazione elettronica. Durante il microsimeposio si è parlato della complementarità tra le tecniche di diffrazione da polveri e diffrazione elettronica (Wei Wan), della diffrazione

elettronica tomografica (Jeremy David) e delle potenzialità offerte dall'introduzione della precessione del fascio (Partha P. Das). Centro Ricerche Eni, rappresentata da Michela Bellettato, ha presentato un interessante caso applicativo riguardante la soluzione della struttura di silicati al carbonio, mentre Lara Gigli ha presentato le architetture ordinate create da coloranti in zeoliti. Rocco Caliandro ha invece presentato un nuovo approccio investigativo nel campo strutturale che accoppia alla già affermata *Pair Distribution Function* la *Modulation Enhanced Diffraction* di più recente sviluppo.

In parallelo, nel microsimeposio "New Topics in Crystal Growth Research" (chair Silvia Rizzato) si è discusso del ruolo del solvente (Matteo Salvalaglio) e dell'energia di adesione delle superfici nei processi di nucleazione e crescita dei cristalli (Linda Pastero). Nuove tecniche e metodi di cristallizzazione e self assembling sono stati presentati grazie ai contributi di Alessia Bacchi, Marzio Rancan, Andrea Zappettini e Giancarlo Terraneo.

Il giorno seguente, nel microsimeposio "Investigating Structure-Property Relationships in Complex Molecular Systems by a Multi-Technique Approach" (chair Patrizia Rossi) si sono analizzate le possibilità di combinare tecniche complementari per arrivare a risolvere strutture di materiali complessi o che presentano delle criticità; partendo dalla cocristallizzazione del farmaco Indometacina e l'utilizzo di biomolecole per costruire strutture di coordinazione complesse con le keynotes di Valeria Ferretti e Donatella Armentano, rispettivamente, si è giunti ai rotori molecolari in strutture porose covalenti (Silvia Bracco), all'analisi del comportamento dinamico di peptidi ciclici allo stato solido (Consiglia Tedesco) e infine allo studio degli aspetti strutturali e funzionali di polimeri di coordinazione fluorurati (Simona Galli). Ha concluso il microsimeposio la presentazione di Stephen Maginn, del Cambridge Crystallographic Database, che ha illustrato le recenti migliorie e implementazioni dell'importante database di strutture organiche.

Anche in questo caso, in parallelo, si è tenuto il microsimeposio "Crystal Chemistry of Inorganic Compounds for the Understanding of Their Properties and Stability" (chair Alessandro Gualtieri) che ha accolto contributi sulle innovazioni nei campi della cristallografia e cristallochimica volte allo studio delle proprietà fisicochimiche, tecnologiche e della stabilità vs. temperatura e pressione di composti inorganici sia naturali che sintetici, dalle nanofasi a materiali microporosi. Le keynotes di Norberto Masciocchi e Elisa Borfecchia hanno riguardato, rispettivamente, lo studio di nanocluster di magnetite mediante tecniche di total scattering, seguito dalla loro

ossidazione *in situ*, al fine di ricavarne i parametri termodinamici e cinetici, e l'utilizzo della radiazione di sincrotrone per lo studio di cristalli di composti di coordinazione con nuove tecniche e setup per seguirne le variazioni di struttura e proprietà elettroniche durante reazioni e processi che li coinvolgono. Il microsimsposio è proseguito con le presentazioni di Elisa Rodeghero, Paolo Lotti e Gennaro Ventruti, riguardanti studi *in situ* dell'adsorbimento/desorbimento di inquinanti derivati da combustibili nella zeolite ZSM-5, interazioni cristallo-fluido in materiali a framework aperto ad alta pressione e studio ad alta temperatura della fibroferrite, rispettivamente. John Ross Angel ha discusso, in occasione del recente centenario delle tecniche di diffrazione, l'evoluzione della strumentazione e dei metodi per studi cristallografici, mettendo in luce i punti di forza, i miglioramenti ottenuti e l'importanza dei modelli utilizzati per la risoluzione e l'affinamento delle strutture, mentre Francesco Mezzadri ha presentato come, attraverso la completa caratterizzazione e analisi strutturale della perovskite magnetoresistiva Pb_2FeMoO_6 , sia stato possibile ottenere un'accurata interpretazione delle proprietà fisiche del sistema.

Il microsimsposio "Advanced Theoretical and Experimental Methods in Crystallography" (chair Angela Altomare) ha riguardato i più recenti ed innovativi approcci metodologici sviluppati nei campi teorici, computazionali e



sperimentali, sia per quanto riguarda la diffrazione sia le tecniche complementari (scattering, spettroscopia, calorimetria, modeling molecolare, microscopia ecc.). La keynote di Benedetta Carrozzini ha descritto i nuovi algoritmi sviluppati per la soluzione della struttura di macromolecole *ab initio*, mentre la keynote di Matteo Leoni ha riguardato gli sviluppi nell'analisi della microstruttura di materiali con difetti, i quali rendono spesso difficile se non impossibile e poco significativa un'analisi con i metodi convenzionali come il metodo di Rietveld. Marta Corno ha dimostrato le possibilità offerte dal codice CRYSTAL14 che, sfruttando l'approccio del calcolo periodico abbinato alla Density Functional Theory ed il calcolo in parallelo, permette di ottenere, attraverso metodi di simulazione quantomeccanica *ab initio* ed in un ragionevole lasso di tempo, struttura ed energie di cristallizzazione di piccole proteine, sfruttando le prestazioni dei moderni calcolatori. Alessandra Forni ha invece descritto uno studio sperimentale e teorico svolto sfruttando l'analisi topologica della X-ray multipole refined charge density su derivati dello iodotetrafluoroetilimidazolo. Eleonora Conterosito ha presentato lo studio di materiali lamellari con difetti strutturali utilizzando tecniche combinate (TGA-GC-MS, diffrazione da polveri e

diffrazione elettronica), al fine di ottenere una caratterizzazione della loro struttura e delle proprietà, mentre Gianluigi Marra ha presentato uno studio che combina riflettanza di raggi-X e *Positron Annihilation Spectroscopy* per indagare la distribuzione di nanoparticelle di argento su compositi a base polimerica.

Nel microsimsposio "Nanostructures and Nanoscale Phenomena" (chair Antonino Martorana) si è discusso invece degli studi strutturali avanzati che sono essenziali a stabilire le relazioni tra proprietà e struttura al fine di elaborare nuovi nanomateriali per applicazioni tecnologiche, focalizzando l'attenzione sulle tecniche sperimentali e sulle procedure di analisi strutturale particolarmente indicate alla scienza dei materiali. La keynote di Carlo Lamberti ha riguardato la caratterizzazione di materiali nanostrutturati dal punto di vista strutturale ed elettronico mediante tecniche da sincrotrone e ha presentato tre casi in cui queste tecniche hanno permesso di indagare le proprietà di materiali utilizzati nei laser per comunicazioni su lunga distanza, di whiskers superconduttivi e di un granato di importanza dal punto di vista geologico per lo studio dei processi di subduzione. Lorenzo Malvasi ha invece presentato l'applicazione dei metodi di *total scattering* allo studio di materiali per ottenere energia pulita, permettendo in questo modo di ottenere dettagliate informazioni strutturali necessarie alla piena comprensione dei meccanismi di funzionamento di questi materiali, spesso non ottenibili a causa dei problemi legati alla loro difettività. Federica Bertolotti ha presentato i risultati dell'analisi strutturale di *quantum dots* di calcogenuri di piombo colloidale effettuata utilizzando la *Debye Function Analysis*, seguita da Luca Gregoratti che ha presentato la nuova tecnica di microscopia spettroscopica a scansione da fotoemissione, la quale permette di superare le limitazioni sulla risoluzione spaziale della spettroscopia fotoelettronica convenzionale e può essere applicata con successo allo studio di superficie di materiali. Infine,

Francesco Giannici ha descritto l'utilizzo delle tecniche microEXAFS e micoXANES combinate per lo studio di celle a combustibile a ossidi solidi ed i risultati ottenuti, che hanno permesso di far luce sui meccanismi che governano la compatibilità tra elettroliti ed elettrodi e le performance elettrochimiche delle celle.

L'ultimo microsimsposio, "Imaging Biomolecular Machines in Action through Cryo-Electron Diffraction and Cryo-Electron Microscopy" (chair Dorian Lamba) ha costituito un ponte verso i temi del workshop sulla biologia strutturale. Il microsimsposio ha riguardato i recenti sviluppi che stanno permettendo alla microscopia elettronica e alla diffrazione elettronica a bassa temperatura di raggiungere il campo della risoluzione a livello atomico, finora dominato da diffrazione di raggi X e NMR, aprendo la possibilità di nuovi scenari in cui è possibile osservare la struttura di macchine molecolari molto grandi che è difficile ottenere in forma cristallina. Xiao-chen Bai ha descritto l'utilizzo di nuovi detector per elettroni e metodologie di correzione che stanno portando la microscopia



elettronica a rivaleggiare con la risoluzione ottenibile dai raggi X, presentando il caso dello studio del complesso gamma-secretasi la cui struttura è stata risolta con una risoluzione di 3,4 Å. Marina Mapelli ha descritto come attraverso uno studio strutturale sia stato possibile far luce sui meccanismi molecolari che determinano la divisione asimmetrica delle cellule. Giampiero Garau ha descritto il comportamento di NAPE-PLD, importante proteina legata al metabolismo dei lipidi, sia a livello molecolare che cellulare combinando microscopia e diffrazione elettronica. Matteo De March ha presentato i risultati dell'indagine cristallografica, elettrofisiologica e computazionale che ha permesso di spiegare come la minore selettività dei canali

ionici CNG (Cyclic nucleotide-gated) rispetto ai, pur molto simili, canali K^+ sia dovuta alla flessibilità dei loro pori. La struttura della fosfatasi alcalina microbica PhoX, che rende capaci microorganismi di ottenere il fosfato attraverso la rottura di composti, laddove non sia disponibile nell'ambiente, è stata presentata da Pietro Roversi mentre Adriana Miele ha presentato i risultati del saggio ad alta capacità (high throughput screening) delle interazioni tra le proteine secrete dal parassita *Schistosoma mansoni* e i componenti della matrice extracellulare umana al fine di comprendere, per scopi terapeutici, come riescano a sfuggire al sistema immunitario.

Durante i microsimsposi è stato lasciato spazio alla discussione e interazione con i relatori, spesso proseguita durante i momenti di aggregazione e relax, grazie all'atmosfera rilassata ed informale del Congresso che ha consentito di poter confrontare e scambiare esperienze e stringere nuove collaborazioni.

I 42 poster sono stati disposti nella sala pranzo e *coffee break* e separati per attinenza ai microsimsposi, per facilitarne la fruizione. Questa collocazione ha permesso di estendere le sessioni poster non solo alle pause pranzo del secondo e del terzo giorno, bensì anche ai *coffee break*, facilitando le interazioni tra i congressisti.

La Software Fayre

Durante la *Software Fayre*, ospitata presso l'aula informatica del Polo Universitario, sono state presentate, anche attraverso sessioni pratiche ed esercitazioni, le ultime versioni dei software per la determinazione strutturale SIR2014 e EXPO2014, sviluppate presso il CNR-Istituto di Cristallografia di Bari, e del codice di calcolo periodico *ab initio* CRYSTAL14, sviluppato dal gruppo di Chimica Teorica dell'Università degli Studi di Torino.



Nella prima giornata della *Software Fayre*, Giovanni Luca Cascarano e Corrado Cuocci (IC-CNR) hanno rispettivamente illustrato, anche attraverso esempi, le potenzialità di SIR2014 e EXPO2014 per poter risolvere strutture cristallografiche da dati di diffrazione di raggi X da cristallo singolo e da polveri. Hanno anche brevemente illustrato gli algoritmi da loro sviluppati, ed implementati nei suddetti software, per la risoluzione strutturale tramite l'approccio dei Metodi Diretti e/o dei Metodi di Spazio Reale.

Nella seconda giornata, Bartolomeo Civalleri (UNITO) ha spiegato le potenzialità di utilizzo del codice CRYSTAL14 in

chimica, fisica dello stato solido e scienza dei materiali. La sessione pratica è stata utilizzata per permettere ai partecipanti di familiarizzare con le potenzialità del codice per lo studio delle proprietà di solidi cristallini, superfici, polimeri e molecole.

L'incontro CCDC-CARE per la banca dati CSD

È stato organizzato da Marco Milanese e Consiglia Tedesco un incontro tra i cristallografi italiani e CCDC, distributore della banca dati CSD (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/>) e con CARE (Coordinamento per l'accesso alle risorse elettroniche (<http://www.crui-risorselettroniche.it>)). L'obiettivo è stato quello di spostare la gestione della risorsa CSD dal singolo utente interessato ad un unico interlocutore per l'Italia (CARE per l'appunto). Questo ha



avuto il vantaggio immediato di semplificare la gestione economica e ottenere le licenze come "campus" per tutti gli utenti. Inoltre nella stessa licenza, oltre alla banca dati CSD, il pacchetto offre altri interessanti software (tra cui DASH per la diffrazione da polveri e GOLD per il structure-based drug design, come dettagliato sul sito di CCDC). In prospettiva, allargando la base degli utenti italiani si spera di poter abbassare il costo medio per utente ed arrivare alla licenza "nation wide" come avviene in altri Paesi. Questo risultato sottolineerebbe una volta di più l'importanza strategica della cristallografia nel panorama scientifico italiano. La collaborazione

continuerà nel 2016 con due workshop organizzati da CCDC dal titolo "Uses and Applications of Crystallographic Data in Structural Chemistry and Drug Discovery" e "Uses and Applications of Crystallographic Data in Studies of Solid State Properties and Behaviour", organizzati rispettivamente presso l'Università di Salerno (14 giugno 2016) e l'Università di Parma (16 giugno 2016).

IYCr Legacy

Un'occasione di discussione dell'eredità dell'Anno Internazionale della Cristallografia (IYCr2014) è stata la Tavola Rotonda, organizzata da Michele Zema, in veste di Project Manager per IYCr2014, e da Alessia Bacchi, responsabile delle attività IYCr in Italia. La tavola rotonda ha avuto come obiettivo la presentazione di alcune tra le attività di successo italiane di IYCr2014, al fine di proporre strategie per costruire progetti di divulgazione e visibilità per i prossimi anni. Le numerose mostre sui cristalli organizzate in tutta Italia hanno permesso l'avvicinamento alla disciplina non solo dei bambini delle scuole primarie ma anche delle famiglie, grazie all'organizzazione di attività di laboratorio e di gioco. Per la divulgazione scientifica nelle scuole superiori è stato redatto un libro dal titolo "Cristallografia: la visione a raggi X", distribuito gratuitamente e scaricabile online (<http://www.cristallografia.org/libro.asp>). La peculiarità di questo



volume è la presenza di due simpatici amici, Crystal Panda e Crystal Kraken che, con esempi di vita quotidiana, spiegano i concetti fondamentali della cristallografia. Inoltre, il concorso nazionale di "Crescita dei Cristalli", organizzato da Marco Bruno, ha coinvolto un buon numero di scuole superiori; i progetti migliori sono stati esposti durante il Congresso. Nel 2017, queste celebrazioni troveranno un seguito speciale in Italia, in quanto ricorre il 50-esimo anniversario della fondazione di AIC.



I workshop satelliti

I due workshop satelliti hanno accompagnato l'apertura e la chiusura del congresso, coinvolgendo numerose persone, tra cui alcuni congressisti, in un percorso alla scoperta delle nuove frontiere della cristallografia. Il satellite "Multivariate DOE and PCA Methods in Materials Science" ha dimostrato come le tecniche statistiche di progettazione degli esperimenti e di analisi dei risultati possano essere degli ottimi strumenti per la cristallografia. Dopo una breve introduzione alle tecniche, sono stati mostrati esempi di applicazione

di queste tecniche, combinate alla cristallografia, nel mondo della chimica dei materiali. Un interessante esempio è lo studio riguardante il confronto della PCA (Principal Component Analysis) con la PSD (Phase Sensitive Detection) applicate al MED (Modulation Enhanced Diffraction), che ha dimostrato che la PCA è uno strumento efficace, semplice e veloce anche per dati XRPD raccolti durante esperimenti risolti in tempo in condizioni non ambiente. Il secondo meeting satellite intitolato “1st Annual Gathering of Italian Structural Biologists” si è tenuto al termine del Congresso e ha riunito i biologi strutturisti italiani. Questo meeting ha mostrato la forte interazione tra la biologia strutturale e le tecniche di analisi diffrattometriche e cristallografiche e l’interesse dei biologi strutturali a partecipare alla vita associativa dell’AIC. Durante il meeting sono state effettuate presentazioni che hanno evidenziato l’eccellenza degli studi biocristallografici portati avanti in Italia.

L’organizzazione del Congresso

L’intera logistica e la gestione del Congresso sono state veicolate attraverso l’uso di una piattaforma web. Infatti, AIC ha da alcuni anni dedicato, sul proprio spazio web, un’area riservata per i Congressi. In questo modo il sito web di AIC sta diventando una memoria storica dei suoi passati Congressi. Si è poi deciso di avvalersi di alcune



tecnologie di largo uso, come ad esempio Facebook, creando una pagina *ad hoc*, raggiungibile anche da smartphone via QR code. Gli organizzatori del Congresso hanno sfruttato la capacità di questi social media di condividere contenuti testuali, immagini e video per aggiornare velocemente i partecipanti sulle ultime novità; hanno poi cercato di interagire in tempo reale con i partecipanti in modo da condividere alcuni momenti dell’evento. Per la prima volta, il Congresso è stato interamente digitale, poiché sia il programma delle giornate di lavoro, sia gli atti sono stati resi disponibili esclusivamente in formato elettronico, compatibile con il

maggior numero di smartphone e tablet in commercio. Gli atti sono stati distribuiti, sotto forma di e-book, anticipatamente ed esclusivamente nei formati riconosciuti dai principali devices elettronici. In un’ottica di economia di scala ed ecologica, questo approccio ha permesso di ridurre notevolmente i volumi di carta distribuita. Questo “esperimento digitale” ha avuto un riscontro molto positivo da parte dei partecipanti.

Gli sponsor

Il successo di partecipazione, soprattutto per quanto riguarda i giovani cristallografi, è stato reso possibile, oltre che dalla concessione delle infrastrutture in uso gratuito da parte dell’Università del Piemonte Orientale, dal generoso contributo degli sponsor tecnici: Assing, Bruker, CRYSTAL solutions, dfp technologies, The Cambridge Crystallographic Data Centre-CCDC, Dectris, GNR, NanoMEGAS, PANalytical, Rigaku Oxford Diffraction. Il contributo dell’Università di Torino e del centro interdipartimentale CrisDi hanno permesso la partecipazione di relatori stranieri ed italiani, per quanto riguarda le plenary lectures. Da segnalare, infine, l’importante contributo della Fondazione Cassa di Risparmio di Vercelli, che ha permesso di incentivare la partecipazione dei giovani con 14 borse di studio per coprire totalmente le spese di registrazione e soggiorno e 18 borse per coprire le spese di registrazione. Alcune ditte, specializzate nello sviluppo di strumentazioni e software utilizzati in ambito cristallografico, hanno partecipato anche a Commercial Presentations e Exhibitions, che sono stati preziosi momenti di incontro tra il mondo accademico e quello aziendale per un utile confronto sullo sviluppo della tecnologia cristallografica in Italia.