

**Institut de Chimie de Clermont-Ferrand**

**½ Journée Scientifique ICCF**



**Jeudi 13 juillet 2023**

**9h00 – 12h15**

**Amphi Blaise Pascal**

**Sigma Clermont**

**Programme scientifique :**

	<b>Intervenants</b>	<b>Titre de l'intervention</b>	<b>Equipe</b>
9h00	Claude FORANO	<i>Présentation de la Plateforme « Analyses Multi-élémentaires »</i>	MI
9h20	Cassandra GUERINOT	<i>Conception bio-inspirée d'architectures moléculaires amphiphiles pour lutter contre les infections bactériennes</i>	COM
9h40	Aurore LECHEVALIER	<i>Synthèse et caractérisation de phases AFM contenant du fer et de l'aluminium</i>	MI
10h00	Yaël HERSANT	<i>Le festival des Nuées ardentes et ses alchimistes, 5 éditions de 2018 à 2023 !</i>	ICCF
10h20	<b><i>Pause-Café : salle TCM 003</i></b>		
10h40	Tara BUDZON	<i>Le nitrure de carbone graphitique hautement fluoré obtenu par fluoration gaz-solide et ses applications en photodégradation</i>	MI
11h00	Xavier DAVOY	<i>Structure-properties relationship of poly(glycerol sebacate)</i>	TIM
11h20	Florian BIOTTEAU	<i>3D printing of copper-doped calcium deficient hydroxyapatite for synthetic bone graft</i>	MPS
11h40	Barbara ERVENS	<i>The true costs of open access publishing</i>	BIOMETA
<b>12h15</b>	Fabrice LEROUX	<b><i>Fin de la demi-journée</i></b>	



## Présentation de la Plateforme « Analyses Multi-élémentaires » UCA Partner de Chimie

C. Forano, responsable ([claude.forano@uca.fr](mailto:claude.forano@uca.fr))

La détermination de la composition chimique des liquides ou solides, purs ou en mélanges, naturels ou de synthèses est le préalable à la validation d'une synthèse, à l'étude d'un système complexe ou d'un processus réactionnel. Elle intègre la démarche qualité en recherche.

La Plateforme Analyses Multi-élémentaires UCA Partner de Chimie regroupe un ensemble complet d'équipements pour le dosage de la majorité des éléments chimiques en solution ou à l'état solide :

- Un analyseur de spectroscopie optique d'émission à plasma à couplage inductif permettant l'analyse de plus de 70 éléments chimiques, en solution, séparément ou en mélange,
- Un analyseur CHNS/O dédié à l'analyse élémentaire du carbone, de l'hydrogène, de l'azote, du soufre et de l'oxygène de solides, gels, liquides.

ICP-OES										CHNS/O								
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
H													B	C	N	O	He	
Li	Be											Al	Si	P	S	Cl	Ne	
Na	Mg																Ar	
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt										
					Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
					Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Non analysé
<0.005 ppm
0.005-0.05 ppm
> 0.05 ppm

Le service met à disposition son savoir-faire dans le développement et la validation de méthodes analytiques adaptés à vos projets de recherche et d'innovation pour l'analyse d'une grande variété de produits chimiques (molécules organiques de synthèse, macromolécules, polymères,...), de biomolécules (protéines et metalloprotéines, lipides, polysaccharides,...), de métaux et matériaux inorganiques (métaux, alliages, oxydes, hydroxydes, sulfures, silicates de métaux,...), de matériaux naturels et industriels (bois, sols, déchets,...).

Les études et analyses réalisées à ce jour couvrent les domaines de l'Environnement (décontamination de l'arsenic des eaux potables, lixiviation de métaux lourds par des déchets polymères, suivi du phosphore dans des eaux naturelles et dans des carapaces de vertébrés, variabilité de la composition de fibres végétales, suivi de la biodégradation de polymères, analyse de cellules, relargage contrôlé de phosphate pour la fertilisation), de la santé (compositions de matériaux osseux dopés, quantification de médicaments confinés dans des vecteurs) et des matériaux (HDL, complexes de coordination, composés hybrides de type MOFs). Certaines de ces études seront présentées.



**UCA PARTNER**

Plateformes d'Assistance à la Recherche,  
aux Technologies et aux Entreprises



## Conception bio-inspirée d'architectures moléculaires amphiphiles pour lutter contre les infections bactériennes

Cassandra Guerinot<sup>1</sup>, Mélodie Malige<sup>2</sup>, Nicolas Charbonnel<sup>2</sup>, Olivier Roy<sup>1</sup>, Claude Taillefumier<sup>1</sup>,  
Christiane Forestier<sup>2</sup>, Sophie Faure<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 Clermont-Fd, France

<sup>2</sup> Université Clermont Auvergne, CNRS, LMGE, F-63000 Clermont-Fd, France

Les peptides antimicrobiens (PAM) sont considérés comme l'un des composants clés du système immunitaire inné. Leur intérêt repose sur leur large spectre d'activité et leur faible émergence de résistance, faisant d'eux une bonne alternative aux antibiotiques actuels. Malheureusement, leur utilisation thérapeutique est souvent entravée par une mauvaise pharmacocinétique et un coût élevé. Ces peptides naturels sont devenus une grande source d'inspiration pour le développement de nouveaux agents antimicrobiens. Divers peptidomimétiques ont été conçus pour reproduire le mécanisme d'action des PAM tout en améliorant la stabilité protéolytique. Parmi eux, les peptoïdes (oligomères de glycine N-substitués) représentent une classe unique de peptidomimétiques avec un grand potentiel antimicrobien.<sup>1</sup> Leur squelette composé d'une répétition d'amides *N,N*-disubstitués leur confère une bonne résistance à la dégradation enzymatique. Ils possèdent également une meilleure flexibilité grâce à l'absence de liaison hydrogène intramoléculaire et à l'isomérisation *cis/trans* des amides. En contrôlant cette isomérisation, les peptoïdes peuvent adopter des structures secondaires hélicoïdales stables.<sup>2</sup> Ce travail consiste à synthétiser des oligomères linéaires et cycliques avec des chaînes latérales hydrophobes et cationiques afin d'imiter la structure amphiphile cationique des PAM. Les peptoïdes conçus sont polycationiques grâce à l'ajout de chaînes latérales de type triazolium, imposant des contraintes de conformation et ainsi induisant une structure secondaire stable.<sup>3,4</sup> Nous présenterons ici la synthèse en phase solide d'oligomères linéaires et cycliques, nous donnerons un aperçu de leurs préférences conformationnelles et enfin nous présenterons leur évaluation biologique. Ces macrocycles ainsi que leurs équivalents linéaires ont été testés pour leur potentiel antibactérien sur un panel de souches bactériennes à Gram négatif et à Gram positif.

### REFERENCES :

- [1] N.P. Chongsirawatana, J.A. Patch, A. M. Czyzewski, M.T. Dohm, A. Ivankin, D. Gidalevitz, R. N. Zuckermann, A.E. Barron, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2008**, *105*, 2794.
- [2] O. Roy, G. Dumonteil, S. Faure, L. Jouffret, A. Kriznik, C. Taillefumier, *J. Am. Chem. Soc.* **2017**, *139*, 13533.
- [3] R. Shyam, N. Charbonnel, A. Job, C. Blavignac, C. Forestier, C. Taillefumier, S. Faure *ChemMedChem* **2018**, *15*, 1513.
- [4] R. Shyam, C. Forestier, N. Charbonnel, O. Roy, C. Taillefumier, S. Faure *EurJOC* **2021**, *42*, 5813.



## Synthèse et caractérisation de phases AFM contenant du fer et de l'aluminium

Aurore LECHEVALLIER<sup>1,2,3</sup>, Mohend CHAOUCHE<sup>2</sup>, Jérôme SOUDIER<sup>3</sup>, Guillaume RENAUDIN<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

<sup>2</sup> Université Paris-Saclay, CNRS, LMPS, GIF-SUR-YVETTE

<sup>3</sup> ParexGroup/Sika, SAINT-QUENTIN-FALLAVIER

L'augmentation des émissions anthropiques de CO<sub>2</sub> et leur impact sur l'effet de serre entraînent une prise de conscience sociale ainsi qu'un changement des paradigmes économiques et commerciaux. L'empreinte CO<sub>2</sub> devient alors un choix de sélection de produit. Cela concerne en particulier le Ciment Portland Ordinaire (OPC), car l'industrie du ciment représente environ 8 % des émissions mondiales de CO<sub>2</sub> [1].

Dans ce contexte, plusieurs nouveaux types de liants hydrauliques plus respectueux de l'environnement ont été étudiés et proposés comme substituts potentiels de l'OPC. Nombre d'entre eux comprennent des oxydes de fer et d'aluminium, qui peuvent être présents sous la forme d'une phase de type Ca<sub>4</sub>Al<sub>2-x</sub>Fe<sub>2+x</sub>O<sub>10</sub> (communément appelée C<sub>4</sub>AF dans la notation cimentière). Lors de l'hydratation, cette phase conduit notamment à la précipitation d'hydroxydes doubles lamellaires de Ca (Ca-LDH ou AFm en notation cimentière, correspondant à une structure de type hydrocalumite). Le nitrate de calcium étant un additif commun dans l'activation des liants hydrauliques, cette étude se concentre sur les phases AFm-NO<sub>3</sub>. Les phases AFm-NO<sub>3</sub> à base de CaAl ont été largement étudiées dans la littérature. En revanche, seules quelques études ont été rapportées sur les phases AFm-NO<sub>3</sub> à base de CaFe, et aucune sur l'existence possible de solutions solides Ca(Fe/Al) AFm-NO<sub>3</sub> [2,3]. L'étude de ces systèmes modèles est considérée comme une condition préalable pour caractériser correctement les produits d'hydratation des nouveaux liants à faible teneur en CO<sub>2</sub> mentionnés ci-dessus.

La phase Ca<sub>4</sub>Al<sub>2-x</sub>Fe<sub>x</sub>(OH)<sub>12</sub>·(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·nH<sub>2</sub>O a été synthétisée par la méthode de co-précipitation avec différents rapports molaires Fe/Al. Les conditions expérimentales ont été optimisées pour permettre la formation des deux membres finaux des phases AFm-NO<sub>3</sub> (Al-AFm et Fe-AFm) [4]. Les phases AFm synthétisées ont ensuite été caractérisées à l'aide de plusieurs méthodes. Des affinements Rietveld de diffractogrammes X ont été effectués pour démontrer l'existence d'une solution solide complète entre les deux membres finaux et des techniques spectroscopiques, notamment FTIR et Raman, ont été utilisées pour confirmer l'intercalation de l'anion ciblé. Enfin, la stabilité de ces phases AFm a été étudiée au cours du temps afin d'évaluer leur durabilité dans un liant hydraulique réel.

### REFERENCES :

1. L. Proaño, A.T. Sarmiento, M. Figueredo, M. Cobo, *J. Clean. Prod.*, 263 (2020) 121457.
2. M. Al-Jaberi, S. Naille, M. Dossot, C. Ruby, *J. Mol. Struct.*, 1102 (2015) 253–260.
3. G. Renaudin, M. François, *Acta Crystallogr. Sect. C*, 55 (1999) 835–838.
4. I. Rousselot, C. Taviot-Guého, F. Leroux, P. Léone, P. Palvadeau, J.-P. Besse, *J. Solid State Chem.*, 167 (2002) 137–144.



## **Le festival des Nuées ardentes et ses alchimistes, 5 éditions de 2018 à 2023 !**

Yaël HERSANT

*Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND*

La cinquième édition du festival « Les Nuées ardentes » vient d'avoir lieu du 16 au 18 Juin 2023. Depuis sa création cette manifestation a attiré plus de 25.000 visiteurs au pied du puy de dôme.

Porté depuis 2018 par l'Université Clermont Auvergne UCA, le programme « Les Nuées Ardentes » s'inscrit au cœur des actions du label I-Site – Initiatives Science, Innovation, Territoires, Economie – du CAP 20-25, un programme gouvernemental des Investissements d'Avenir (PIA) qui finance, depuis 2017, des projets structurants qui répondent à l'ambition scientifique et pédagogique.

L'ICCF a participé dès le départ à la mise en place de ce festival en créant le groupe des « Alchimistes ». La réussite de cette cinquième édition est l'occasion de revenir sur l'implication des membres de l'institut au cours des dernières années et de présenter les différentes activités réalisées ainsi que leurs acteurs.



REFERENCE : <https://lesnuéesardentes.uca.fr/>



## Le nitrure de carbone graphitique hautement fluoré obtenu par fluoration gaz-solide et ses applications en photodégradation

Tara BUZDON,<sup>1</sup> Aissam AIT LHOUCIANE<sup>1</sup>, Maryline NASR<sup>1</sup>, Mohamed SARAHA<sup>1</sup>, Guillaume MONIER<sup>2</sup>, Arianit GASHI<sup>3</sup>, Julien PARMENTIER<sup>3</sup>, Nicolas BATISSE<sup>1</sup>, Pierre BONNET<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND

<sup>2</sup>Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, Institut Pascal (IP), F-63000 Clermont-Ferrand, France

<sup>3</sup>Institut de Science des Matériaux de Mulhouse (IS2M), Université de Strasbourg, Université de Haute-Alsace, 15 rue Jean Starcky, BP 2488, 68057 Mulhouse Cedex, France

Tara.buzdon@uca.fr, <https://iccf.uca.fr>

**Résumé :** Le nitrure de carbone graphitique ( $g\text{-C}_3\text{N}_4$ ) est un semi-conducteur très étudié possédant un gap d'énergie modifiable qui le rend versatile et utile dans plusieurs domaines. Il peut être utilisé comme matériau photodégradant en photocatalyse grâce à ses bonnes propriétés optoélectroniques. <sup>[1]</sup> Les liaisons faibles de Van der Waals entre les plans (de la structure lamellaire) le rendent facile à exfolier, il fonctionne donc comme un bon lubrifiant solide. <sup>[2]</sup> C'est aussi un matériau qui peut promouvoir la production de  $\text{H}_2$  par craquage de l'eau, qui est une autre propriété du matériau sur laquelle nous allons travailler. Afin d'améliorer l'activité catalytique, et plus particulièrement la conduction électronique et la sensibilité à la lumière dans le visible, le  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  a déjà été dopé par plusieurs éléments différents comme avec le Br <sup>[3]</sup>, B <sup>[4]</sup> ou même codopé par B/F <sup>[5]</sup>. Le  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  a aussi été fluoré par HF <sup>[6]</sup> et principalement par  $\text{NH}_4\text{F}$  <sup>[7,8]</sup> par synthèse hydrothermale. Cependant, toutes ces méthodes ne permettent que d'induire un faible taux de fluoration (un faible taux d'atomes de fluor dans le matériau, moins de 1% at. et un maximum obtenu récemment à 7% at.) <sup>[9]</sup> sans savoir exactement comment et où les atomes de fluor sont liés à la structure.

Ici, nous présentons pour la première fois la fluoration du  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  par du  $\text{F}_2$  pur suivi par des fluorations dites diluées (avec du  $\text{N}_2$ ). Pour comprendre les processus de fluoration et les ajuster, deux paramètres, le temps et la dilution, ont été modifiés et des paramètres optimaux de fluoration obtenus. Les matériaux obtenus sont par la suite caractérisés par DRX, TEM, IR-ATR, RMN, XPS, DRS, et UV-vis pour qualifier et quantifier la fluoration mais aussi pour voir comment la morphologie du matériau a été changée. La microscopie de transmission électronique (MET) révèle une nanostructure exfoliée du matériau après fluoration. Les spectres XPS mettent en avant les hauts taux de fluoration obtenus, jusqu'à 24%, sans dilution. Un autre effet de la fluoration est visible en DRS, puisqu'il y a des changements de gap qui sont induits par fluoration. Ensuite, des mesures de photodégradation ont été effectuées sur le méthyl orange (MO, un indicateur coloré) et les mécanismes de réactions sont étudiés et en particulier le rôle des ions  $\text{F}^-$ . Notre étude montre que la photodégradation de MO a été améliorée en présence du matériau fluoré en solution. Enfin, la réversibilité de la fluoration de  $g\text{-C}_3\text{N}_4$  a bien été démontrée avec l'utilisation d'hydrazine.

### REFERENCES :

(1) Wen, J.; Xie, J.; Chen, X.; Li, X. A Review on G-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>-Based Photocatalysts. *Applied Surface Science* 2017, 391, 72–123. (2) Krishnan, U.; Kaur, M.; Singh, K.; Kumar, M.; Kumar, A. A Synoptic Review of MoS<sub>2</sub>: Synthesis to Applications. *Superlattices and Microstructures* 2019, 128, 274–297. (3) Lan, Z.-A.; Zhang, G.; Wang, X. A Facile Synthesis of Br-Modified g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Semiconductors for Photoredox Water Splitting. *Applied Catalysis B: Environmental* 2016, 192, 116–125. (4) Gao, D.; Liu, Y.; Liu, P.; Si, M.; Xue, D. Atomically Thin B Doped G-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Nanosheets: High-Temperature Ferromagnetism and Calculated Half-Metallicity. *Sci Rep* 2016, 6 (1), 35768. (5) Wang, H.; Yang, C.; Li, M.; Chen, F.; Cui, Y. Enhanced Photocatalytic Hydrogen Production of Restructured B/F Codoped g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> via Post-Thermal Treatment. *Materials Letters* 2018, 212, 319–322. (6) Lin, W.; Lu, K.; Zhou, S.; Wang, J.; Mu, F.; Wang, Y.; Wu, Y.; Kong, Y. Defects Remodeling of G-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Nanosheets by Fluorine-Containing Solvothermal Treatment to Enhance Their Photocatalytic Activities. *Applied Surface Science* 2019, 474, 194–202. (7) Wang, Y.; Di, Y.; Antonietti, M.; Li, H.; Chen, X.; Wang, X. Excellent Visible-Light Photocatalysis of Fluorinated Polymeric Carbon Nitride Solids. *Chem. Mater.* 2010, 22 (18), 5119–5121. (8) Xu, M.; Chai, B.; Yan, J.; Wang, H.; Ren, Z.; Paik, K.-W. Facile Synthesis of Fluorine Doped Graphitic Carbon Nitride with Enhanced Visible Light Photocatalytic Activity. *NANO* 2016, 11 (12), 1650137. (9) Sun, L.; Li, Y.; Feng, W. Gas-Phase Fluorination of g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> for Enhanced Photocatalytic Hydrogen Evolution. *Nanomaterials (Basel)* 2021, 12 (1), 37.



# STRUCTURE-PROPERTIES RELATIONSHIP OF POLY(GLYCEROL SEBACATE).

Xavier DAVOY,<sup>1,2</sup> Sébastien GARRUCHET,<sup>1</sup> Alain DEQUIDT,<sup>2</sup> Patrice MALFREYT<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Manufacture Française des Pneumatiques Michelin, Clermont-Ferrand, France

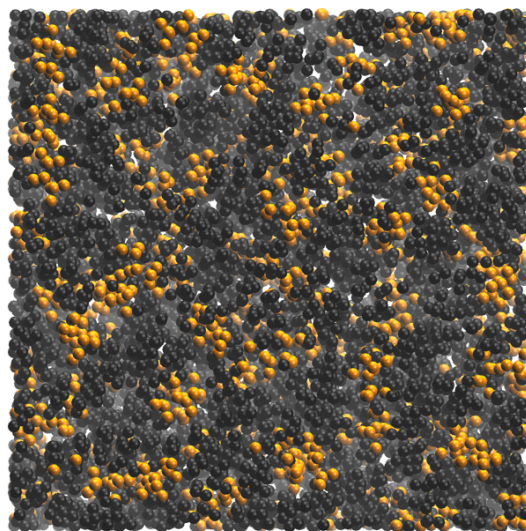
<sup>2</sup>Institut de Chimie de Clermont-Ferrand, CNRS, Université Clermont-Auvergne INP, Clermont-Ferrand, France

xavier.davoy@doctorant.uca.fr, iccf.uca.fr

**Keywords:** Drug delivery; Molecular Dynamics; Crosslinked Network; Thermodynamic properties

**Summary:** As the pharmaceutical industry develops new drugs, their delivery remains a challenge. Controlled Release Systems (CRS) are more than ever of great interest: they allow localized delivery, they use less drugs and they last longer than many alternatives. One of the currently studied vehicle is the Poly (Glycerol Sebacate) (PGS). PGS is a polyester synthesized by polycondensation of glycerol and sebacic acid. Its growing application in biotechnology is mainly due to its biocompatibility, which make it inert for the host organism. Nowadays, due to the flexible and elastomeric nature of PGS, it is mainly used for soft tissue engineering [1], but applications begin to include the controlled release of active ingredients[2]. For the thermoset PGS, the properties such as elasticity, water contact angle and degradation behavior[3] is directly linked to the esterification degree. A better understanding of the influence of the topology of the network on its properties is critical to match synthesis protocol to expected properties.

Molecular dynamics (MD) is a known method to link the network thermodynamic properties to its microscopic structure (crosslinking rate, monomer ratio, free volume). After modelling PGS network with MD methods[4], we propose to compute thermodynamic properties such as Young's modulus, glass transition temperature, solid-liquid work of adhesion with water and contact angle.



**Fig. 1** Representation of a Poly (Glycerol Sebacate) network with glycerol molecules in orange and sebacic acid molecules in black

## References:

1. Yousefi Talouki, P.; Tamimi, R.; Zamanlui Benisi, S.; Goodarzi, V.; Shojaei, S.; Hesami tackalou, S.; Samadikhah, H. R., *International Journal of Polymeric Materials and Polymeric Biomaterials* **2022**, 1–15.
2. Sun, Z.-J.; Chen, C.; Sun, M.-Z.; Ai, C.-H.; Lu, X.-L.; Zheng, Y.-F.; Yang, B.-F.; Dong, D.-L., *Biomaterials* **2009**, 30 (28), 5209–5214.
3. Conejero-García, Á.; Gimeno, H. R.; Sáez, Y. M.; Vilariño-Feltre, G.; Ortuño-Lizarán, I.; Vallés-Lluch, A., *European Polymer Journal* **2017**, 87, 406–419.
4. Orselly, M.; Devemy, J.; Bouvet-Marchand, A.; Dequidt, A.; Loubat, C.; Malfreyt, P., *ACS Omega* **2022**, 7 (34), 30040–30050.





## 3D printing of copper-doped calcium deficient hydroxyapatite for synthetic bone graft

Florian BIOTTEAU<sup>1</sup>, Charlotte VICHÉRY<sup>1</sup>, Stéphane DESCAMPS<sup>1</sup>, David MARCHAT<sup>2</sup>, Jean-Marie NEDELEC<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université Clermont Auvergne, Clermont Auvergne INP, CNRS, CHU Clermont-ferrand, ICCF, F-63000 Clermont-Ferrand, France

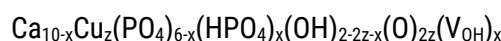
<sup>2</sup> Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, Univ Jean Monnet, INSERM, U 1059 Sainbiose, Centre CIS, Saint-Etienne, France

Health is a leading area of innovation despite the need for a thorough understanding of the new materials and processes before their widespread use. 3D Printing is one of such innovation which is now available for some surgeons across the world, to be assisted by personalized guides and models.

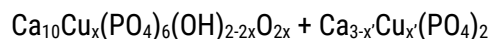
The first steps of 3D printing in the operating room took place a few decades ago as biomodels [1] and after for bone tissue engineering through plastic, metal or ceramic implant. This way of shaping is increasingly considered thanks to its gain in aesthetic [2], customization and costs [3].

Bioceramic implants have been studied for a long time for bone repair, the first option is to find a material which is biologically and physically close. However, these two properties are difficult to achieve with synthetic materials, even though some bioceramics such as hydroxyapatite exhibit properties similar to human bones. In this aspect, 3D printing is a huge step forward. For instance, the fragility of synthetic bioceramics can be partially compensated by the 3D shaping using computerized results to achieve optimal properties through simulations.

Here, we used a powder of Calcium Deficient HydroxyApatite (CDHA), either doped with copper ( $z=0.1$ ) or not, for bone implants printing. They were synthesized respectively by brushite hydrolysis or precipitation. Cu-doping has shown promising results in antibacterial [4], angiogenic and osteogenic activities :



This powder of CDHA is known to thermally decompose into a mixture of Hydroxyapatite and Tricalcium Phosphate (HAP/TCP) according to the treatment temperature and the ratio Ca/P [5] :



To obtain a paste printable by Digital Light Processing (DLP) on Admaflex 130, the CDHA powders were grinded previously to be mixed into a photosensitive resin to obtain the best compromise between printability and mass loading. Various designs have been created, and adapted for the 3D printing, by Computed Assisted Design on Rhino 7, from simple structures like parallelepiped to Triply-Periodic Minimal Surfaces (TPMS) lattices, which appear to be promising geometries [6].

Afterwards, these designs have been printed with different parameters to evaluate their influence on the rheological behaviour and printing parameters. After the printing, heat treatments (debinding and sintering) are required to eliminate all organic components and ensure the parts mechanical resistance. As expected, the CDHA was decomposed, at this stage, into a mixture of HAP/TCP. The phase proportions and the mechanical properties were studied and were correlated with the initial particles size. The influence of copper was evaluated and its release monitored.

**References:**

- [1] : P. S. D'Urso et al. *British Journal of Plastic Surgery* (2000), 53, 200-204
- [2] : J. Brie et al. *Journal of Cranio-Maxillofacial Surgery*. Volume 41, Issue 5 (2013) : 403-407.
- [3] : H. Ballard et al. *Academic radiology* 27.8 (2020): 1103.
- [4] : A. Jacobs et al. *Materials* 2021, 14, 2393.
- [5] : Thoraval L et al, 2023 (submitted)
- [6] : L. Bai et al. *Metals* 2019, 9, 1004.



## **The true costs of open access publishing**

Barbara ERVENS

*Université Clermont Auvergne, CNRS, Clermont Auvergne INP, ICCF, F-63000 CLERMONT-FERRAND*

*Chair of the Publications Committee Chair, European Geosciences Union (EGU)*

*Chief Executive Editor, EGU journal 'Atmospheric Chemistry and Physics'*

Have you ever wondered about the meaning of 'article processing charges', 'transformative agreement', 'diamond open access', 'paywall' in the context of scientific publishing? What are they? Why should we care?

Scientific publishing is vital for disseminating knowledge, career advancement and professional recognition. It is imperative that scientific publications are openly accessible, fostering inclusivity and collaboration. However, there is a lot of misleading and missing information regarding the costs and forms of open-access publishing.

Leveraging my experience as the coordinator of 19 open-access journals of a large non-profit scientific society and as the chief editor of its largest journal, I will provide insights into various aspects of open-access publishing, including:

- Debunking myths and misconceptions surrounding open access publishing and article processing charges (APCs). Publishing always comes at a cost: Publishers provide essential services for seamless access, searchability, discoverability, efficient production, and long-term digital preservation of articles.
- Illustrating the shortcomings of current global Initiatives aimed at transforming subscription-based journals into open-access content. Several large publishers have fallen short in achieving these objectives thus far, raising doubts about the efficacy of such initiatives.
- Encouraging responsible decisions by researchers regarding the allocation of publication funds and contributions to the scientific community. To make informed choices, criteria for identifying ethical and high-quality journals have to be known.
- Presenting an open-access publishing model pioneered by the European Geosciences Union (EGU) and its publisher Copernicus over two decades ago. This model, applied across all 19 EGU journals, features multi-stage open peer review process accompanied by interactive discussion. It exemplifies a self-regulating, community-based approach that outperforms other publishing models in terms of efficiency, success, transparency, and financial sustainability.

These considerations provide a solid basis for rethinking the scientific publishing landscape, with the goal of creating a fair, affordable, and equitable system for everyone.

### **REFERENCES:**

Ervens, B., U. Pöschl, K. Carslaw, T. Koop, Interactive open access publishing with multi-stage open peer review in the European Geosciences Union (EGU): more than two decades of successful transparent, self-regulating, and community-based scientific exchange and quality assurance, 2023, in preparation.