

L'une des missions du Département des Explosifs du CEA Le Ripault est la conception de nouvelles compositions explosives aux propriétés optimisées. Pour répondre aux besoins futurs, les critères de performances et de sûreté sont cruciaux.

L'idée est d'exploiter les molécules en cours d'étude, ou étudiées par le passé, afin de profiter du niveau de maturité acquis et de leur disponibilité en quantité suffisante pour alimenter des recherches sur de nouveaux concepts. En sélectionnant ces briques de base de manière judicieuse, en fonction de leurs performances et sensibilités, il est possible d'imaginer des architectures moléculaires performantes d'un point de vue énergétique, tout en maintenant un bon niveau de sûreté.

Les architectures visées peuvent être définies comme des « composites organiques moléculaires » présentant des structures cristallines et/ou morphologiques particulières. Différents concepts voisins sont englobés sous ce vocable : co-cristaux, structures cœur-coquille, « metastable intermixed composites ».

La proximité des constituants chimiques est ainsi optimisée par rapport à une composition classique basée sur des mélanges de poudres. Notamment, les co-cristaux énergétiques sont actuellement en plein essor dans la communauté scientifique, et pourraient présenter un intérêt en termes de sûreté : en co-cristallisant un explosif performant avec un explosif particulièrement sûr, il est envisageable de garder une performance acceptable tout en améliorant le niveau de sûreté.

Il faut noter que de premiers résultats de modélisation d'un co-cristal d'intérêt (obtenus dans le cadre d'un contrat industriel) seront disponibles en S1/2022, ce qui fournira des bases utiles pour ce concept. Plus globalement, le post-doctorant sera amené à intégrer une équipe pluridisciplinaire comprenant des spécialistes de synthèse et de caractérisation physico-chimique.

L'objectif du post-doctorat sera d'élaborer, à l'échelle du laboratoire, des matériaux constitués de mélanges de composés énergétiques à l'échelle moléculaire, selon la démarche suivante :

- Réaliser un recensement bibliographique des types de matériaux moléculaires envisageables et de leurs méthodes d'obtention.
- Evaluer leur potentiel pour les applications visées et sélectionner les plus pertinents.
- Réaliser à l'échelle laboratoire la synthèse de matériaux énergétiques permettant d'établir la preuve de concept.
- Caractériser les matériaux réalisés par des techniques appropriées, par exemple : diffraction des rayons X, microscopie électronique à balayage, spectrométrie Raman.
- Proposer des améliorations pour optimiser les propriétés finales.
- Participer au rayonnement scientifique : communications en congrès, publications...