

LRGP (UPR CNRS 3349)
ENSIC, 1, rue Grandville - BP 20451
54001 Nancy Cedex

Tel. +33 (0)3 83 17 51 90

Fax +33 (0)3 83 32 29 75

<http://lrgp.ensic.inpl-nancy.fr/>

Pierre-Alexandre Glaude
Directeur de Recherche CNRS
Groupe Cinétique de Combustion



Lettre de recommandation

Après la préparation de son doctorat sur un sujet théorique de dynamique moléculaire à l'Université Henry Poincaré suivi de deux années en tant qu'ATER à la faculté de Pharmacie de Nancy, M. Adil Khalfa a travaillé au LRGP en tant que chercheur postdoctoral du 15 octobre 2011 au 31 décembre 2012. Ce travail était financé grâce à un contrat avec la Délégation Générale pour l'Armement (DGA). Le projet consistait dans le développement de modèles cinétiques détaillés de combustion de différents agents toxiques, dont des molécules organophosphorées, chlorées ou soufrées. Les données physico-chimiques comme les mécanismes de dégradation des agents chimiques et des toxiques industriels restent mal connus. Ces grandeurs sont pourtant indispensables pour évaluer l'impact d'une émission atmosphérique de ces produits en cas de diffusion ou leur évolution en cas d'incendie ou d'explosion.

Le travail de M. Adil Khalfa s'articulait autour de l'étude des voies réactionnelles, des constantes de vitesses et des données thermodynamiques des espèces chimiques. L'absence de données dans la littérature et les difficultés expérimentales liées à la nature des molécules nécessitent l'utilisation de calculs quantiques. Les résultats obtenus sur des molécules modèles et des réactions élémentaires ont permis de développer les mécanismes complexes représentant la réactivité des structures étudiées. Ces modèles ont ensuite été utilisés pour simuler le comportement des produits toxiques dans des conditions variées de températures et de pression.

Malgré la complexité de ce domaine nouveau pour lui, M. Adil Khalfa a bien su appréhender l'approche de modélisation à l'aide de mécanismes cinétiques détaillés. Il a très rapidement acquis les compétences et su utiliser les outils nécessaires pour évaluer théoriquement les propriétés thermodynamiques d'une molécule et la vitesse d'une réaction. Il a étudié la réactivité des systèmes grâce à la théorie de l'état de transition qui s'appuie sur le calcul théorique de l'état de transition, notamment avec le logiciel Gaussian. Les résultats obtenus durant ce travail sont importants et de très bonne qualité. Deux articles sont en cours de rédaction sur les aspects thermodynamiques et cinétiques et seront soumis sous peu pour publication. En outre, M. Adil Khalfa a su parfaitement s'intégrer humainement au sein de notre équipe, dont il a été un membre apprécié.

Les qualités scientifiques et humaines de M. Adil Khalfa me conduisent à avoir toute confiance dans sa capacité à mener une carrière en tant que Maître de Conférence dans une équipe de recherche, en particulier dans le domaine théorique de la modélisation moléculaire et de la chimie quantique.

A Nancy, le 2 mars 2015

P.A. Glaude

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Glaude', written over a horizontal line.



Nancy, le 23 mars 2013

Dr Virginie PICHON
Maître de conférences

Biophysique, Faculté de pharmacie.
Laboratoire de Cristallographie, Résonance Magnétique et
Modélisation
CRM2 (UMR 7036), Faculté des Sciences et
Technologies

Objet : Lettre de recommandation

Monsieur Adil Khalfa a exercé les fonctions d'A.T.E.R. pendant 2 années universitaires de 2009 à 2011 à la Faculté de Pharmacie de l'Université de Lorraine. Il a assuré les enseignements suivants :

- Travaux pratiques en mesure physique et en Chimie Analytique aux étudiants de 2^{ème} année des études conduisant au diplôme de Docteur en Pharmacie.

L'objectif de ces travaux pratiques était de sensibiliser les étudiants aux instruments de mesure à travers différentes manipulations en radioactivité, optique, polarimétrie, etc...

- Travaux dirigés en physique-chimie aux étudiants de la Première Année Commune Aux Etudes de Santé (PACES).

Ces travaux dirigés ont porté sur les différents chapitres du programme de physique et chimie dans le but de préparer au concours PACES pour une admission en 2^{ème} année des études de médecine, pharmacie, odontologie, sage-femme, kinésithérapie ou ergothérapie.

En septembre 2009, il a intégré le laboratoire de recherche CRM2 (cristallographie, résonance magnétique et modélisation) à la faculté des Sciences et Technologies de l'Université de Lorraine. Il a participé au développement d'un logiciel de cristallographie MoPro permettant la détermination et la visualisation de la densité électronique sur des molécules biologiques. Il a aussi étudié l'interaction de fullerènes C₆₀ avec les membranes lipidiques par simulations de dynamique moléculaire, utilisant l'approche de gros grains.

Monsieur Khalfa a enseigné avec sérieux et compétence. Par sa grande disponibilité, il a été apprécié des étudiants. Durant ces deux années, j'ai pu constater ses réelles motivations et ses aptitudes tant dans l'enseignement que dans la recherche.

V. Pichon





4/30/2009

Cher Monsieur, Madame.

Monsieur Adil Khalfa est un jeune chercheur qui vient de finir sa thèse dans notre groupe sur la thématique "Etude des cycles peptidiques en interaction avec les membranes lipidiques par simulation de dynamique moléculaire utilisant l'approche gros grain". Il a rejoint notre équipe après un DEA en « modélisation et simulation des matériaux de la molécule à la structure » de l'Université de Marne la Vallée. Les recherches de M. Khalfa se sont organisées autour de deux axes, un axe méthodologique avec la paramétrisation d'un champ de force gros grains et un axe applicatif visant à comprendre les mécanismes d'action de différents peptides sur les membranes. Il s'est attaqué avec beaucoup de courage et de ténacité à un problème extrêmement difficile, utilisant des méthodes de modélisation état de l'art. M. Khalfa s'est efforcé pour chacun des systèmes étudiés à conclure sur les points marquants de l'étude réalisée. Il a effectué une paramétrisation pertinente du champs de forces qui l'a conduit à réaliser des études originales de tout premier plan. Il a mené des simulations extrêmement longues qui lui ont permis de mettre en lumière pour la première fois les différents modes d'interaction de peptides avec la membrane, en fonction de la séquence des peptides et de la composition membranaire. Ces résultats nous permettent aujourd'hui de comprendre le mode d'interaction de différents peptides cycliques avec des membranes de composition différente. Mr Khalfa a su montré pendant la défense de sa thèse, une grande maîtrise des systèmes et des méthodes qu'il a utilisées. Ces travaux ont donné lieu à un papier déjà accepté pour publication est un autre qui est en soumission.

Pendant son séjour dans notre équipe, Monsieur Khalfa a montré une très grande capacité de travail et une volonté de s'attaquer à des problèmes difficiles. Il n'a pas hésité à acquérir les compétences nécessaires pour mener à bien son travail. Son Manuscrit de thèse, comme en témoigne ses rapporteurs montre son aptitude à présenter clairement les problématiques auxquelles il s'est attaqué et les résultats de ses travaux. Je finirai par souligner que Monsieur Khalfa est naturellement curieux et possède un sens critique, critères fondamentaux pour poursuivre une carrière de recherches.

Mounir Tarek; Chercheur CNRS



**Structure et Réactivité des
Systèmes Moléculaires Complexes**
Unité Mixte n° 7565
Chimie et Biochimie Théoriques



CENTRE NATIONAL
DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

Xavier ASSFELD
Professeur

Nancy, le 18 December 2009

To whom it may concern

I met Adil Khalfa when he started his Ph.D. some years ago in a neighbor theoretical group. During his Ph.D. time I saw him regularly in several seminars and as a nearby worker. I had also the opportunity to know him during the scientific meetings organized by the Ph.D. school where I was deputy director at that time. Finally, I was the president of the jury of his Ph.D. defense last year.

From all these circumstances, it appears to me that Mr Khalfa is a good scientist, doing his job carefully; trying to understand what he was doing and not simply executing his Ph.D. director advises. I am sure that he learns a lot during his Ph.D. and that his knowledge will help him to find a position. The way his advisor taught him to work will certainly be a great asset for a job in University.

Sincerely.

Xavier ASSFELD



Prof. Dr. Gerald Kneller
Centre de Biophysique Moléculaire, CNRS
Rue Charles Sadron
45071 Orléans Cédex 2
France

Tél: +33-2-38 25 78 42
E-Mail: kneller@cnrs-orleans.fr

Synchrotron Soleil -Division Expériences
Saint Aubin - BP 48
91192 Gif sur Yvette Cedex
France

Tél. +33-1 69 35 97 14

Attestation de Stage

Madame, Monsieur,

Je soussigné, Gerald Kneller, Professeur à l'Université d'Orléans et responsable de l'équipe *Biophysique théorique, simulation moléculaire et calcul intensif* au Centre de Biophysique Moléculaire, atteste que Monsieur Adil Khalfa a effectué un stage de DEA, intitulé *La simulation et l'analyse de la dynamique du peptide Avian Pancreatic Peptide sous l'effet de la pression* entre le 1/04/2004 et le 31/07/2004 au sein de mon équipe. Le stage faisait partie du programme du *D.E.A de modélisation et simulation des matériaux, de la molécule à la structure*, de l'Université Paris-Est de Marne-la-Vallée.

Je vous prie d'agréer, Madame, Monsieur, l'expression de ma considération distinguée.