

Sujets de stage:

Sujet 1 – Developing QSAR model for mPPase inhibitor

Membrane-bound pyrophosphatase (mPPase) are large enzymes (~1600aa, 16 transmembrane helix) with no human homologue, suspected to be a target for antiparasitic compounds (Shah et al., AIMS Biophysics 2016, 3: 171-194). We have tested about 200 compounds from a med chem program (still ongoing), the best with low micromolar affinity. Recently, we solved in-house crystal structures highlighting three interaction sites (two allosteric, one orthosteric). The goal of the internship is to devise QSAR models (including CoMFA/CoMSIA models) that will guide the synthesis and lead to the discovery of nanomolar inhibitors

Sujet 2 – Identification and Analyze of small protein fragments using a graph approach

Small protein fragments, and not just residues, can play a major biological role in the protein. Indeed, they can stabilize protein folding and protein-ligand complex (eg aromatic rings: stacking; catalytic triad) and they must be considering during the drug design process. The aim of this training period is to continue developing the code generated by the previous Nantes-Ecole Centrale internship to identify and analyze the interaction of protein fragments using the tool under development based on the previous work in the laboratory (Borrel, Camproux, and Xhaard 2017; Zhang et al. 2017). The long-term perspective of this work is to propose a new computational tool able to score a protein-structure based on atomic environments.

Infos pratiques :

Voir

<https://www.helsinki.fi/en/admissions/how-to-apply/exchange-studies>

Date début (ISDD). L'université d'Helsinki organise un système de tuteurs et 2 jours d'information pour les nouveaux étudiants la 1ere/2eme semaine de Janvier.

<https://www.helsinki.fi/en/admissions/how-to-apply/exchange-studies>

L'indemnité Erasmus est versée aux milieux du stage.

Une indemnité labo complémentaire d'environ 650EUR/mois sera versée pour les mois de Janvier à Mai (présence en Juin sur le site non requise, i.e. rédaction du rapport).

Note: l'indemnité complémentaire sera payée à la fin de chaque mois mais sera probablement ventilée sur 4 mois pour raison administratives. Le premier mois (Janvier) le paiement de l'indemnité labo n'a généralement pas pu être mise en place.

Appartements étudiant compter 450-600EUR/mois (généralement a 5-10 min a pied du labo).

Fournis par l'université.

Possible de trouver moins cher (eg en coloc) mais en cherchant seul.

Caution de l'appart étudiant ~500EUR (rendue à la fin du stage).

Autres frais :

Compter 50-100EUR pour inscriptions diverses (à payer en arrivant).

Billet avions pris en avance compter 200-350EUR A/R.

Vie ~10% plus chère qu'en France

Carte bus ~20e/mois

Dates limites

*** Etudiant Europeens:**

Stages sous accords Erasmus. Date limite d'inscription internet Erasmus *le 15 Octobre* (nécessite plusieurs documents ; necessite de s'y prendre plusieurs jours en avance).

Attention: Il faut faire DEUX inscriptions, une a P7 et une autre dans l'universite d'Helsinki.

*** Etudiants hors EU:**

il y a une date limite differente *le 30 Septembre* pour les etudiants non-Europeens.

Pour examen des candidatures, me contacter *le plus rapidement possible* par email:

henri.xhaard@helsinki.fi

Envoyer SVP:

- un CV (anglais ou francais)

- une (meme courte) lettre de motivation (parcours; qu'est ce qui est attendu du stage; en anglais ou francais). Classer les sujets 1-3 ci dessous par ordre de preference.

- relevé de notes de l'année précédente (anglais ou francais).

Demander SVP l'accord d'un de vos responsables