



## Proposition de Stage de M2

**Titre du stage :**

*Caractérisation théorique des propriétés physico-chimiques  
et anti-oxydantes de dérivés de flavonoïdes.*

**Structure d'accueil :**

Intitulé : **CEISAM**

Nom du responsable : Jean-Michel Bouler

Stage destiné aux étudiants de :

Master 1

Master 2

Master 1 et 2

**Responsables du stage :**

Nom : Jean-Yves Le Questel

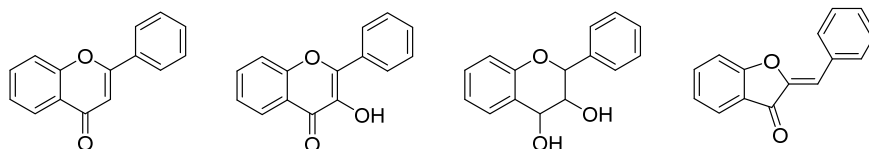
Tél. : 02 51 12 55 63

E-mail : [Jean-Yves.Le-Questel@univ-nantes.fr](mailto:Jean-Yves.Le-Questel@univ-nantes.fr)

**Description du stage proposé :**

Ce stage s'inscrit dans le cadre d'une collaboration établie entre l'équipe **ModES** (Modélisation Et Spectroscopie) du laboratoire **CEISAM** (UMR CNRS 6230) et l'Unité Fonctionnalité et Ingénierie des Protéines (**UFIP**, UMR CNRS 6286) dans le contexte d'un financement régional (Pari Scientifique **FunRégiOx** (Procédé rationnel pour la fonctionnalisation régiosélective d'agents antioxydants)) obtenu en 2018.

Au cours du stage, les propriétés électroniques de dérivés de flavonoïdes (Figure 1) se comportant comme antioxydants seront étudiées de façon approfondie par des méthodes de modélisation moléculaire. En effet, **FunRégiOx** a pour principal objectif le développement d'un procédé rationnel novateur, applicable en industries agroalimentaire et biotechnologique, pour la fonctionnalisation "à façon" de flavonoïdes par des approches de chimie enzymatique. Ces composés font partie de la famille des polyphénols et sont naturellement présents en abondance dans les végétaux. Les flavonoïdes d'origine naturelle présentent un intérêt industriel majeur car ils sont de puissants agents antioxydants avec des applications potentielles dans les domaines de l'agroalimentaire et de la nutraceutique, mais également en cosmétique et pharmaceutique. Un grand nombre de leurs effets biologiques semble être lié à leur capacité à moduler certaines cascades de signalisation cellulaire. Les flavonoïdes ont ainsi démontré des propriétés anti-inflammatoires, anti-thrombogènes, antidiabétiques, anti-cancéreuses et neuroprotectrices.



**Figure 1.** Structure chimique de flavonoïdes

**L'objectif de ce stage est donc d'évaluer le caractère antioxydant d'une série de flavonoïdes naturels et originaux, fonctionnalisés régiosélectivement.** La caractérisation de la réactivité intrinsèque des groupements hydroxyles des flavonoïdes sera réalisée à l'aide d'une méthodologie mise au point précédemment, plus précisément à travers le calcul d'enthalpies de mécanismes réactionnels impliqués dans l'activité antioxydante de ces composés

Au cours de ce stage, l'étudiant réalisera donc de façon exclusive des études de Modélisation Moléculaire, plus précisément de Chimie Quantique, en utilisant des ressources (machines de calculs et programmes) disponibles au sein de l'équipe ModES du CEISAM. L'étudiant doit donc être particulièrement motivé par ces aspects.