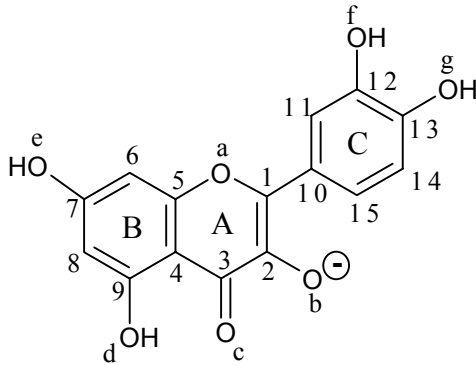


*La quercétine fait partie de la famille des flavonoïdes, composés naturels présents dans de nombreux aliments consommés quotidiennement par l'homme. Parmi ses nombreuses actions bénéfiques, elle est notamment impliquée dans des mécanismes protecteurs antiradicalaires et antioxydants.*



*quercétine déprotonée*

*Dans le corps humain, la quercétine se trouve sous une forme déprotonée et interagit avec des protéines dont le site actif possède un atome métallique. Il peut s'agir de Fer, de Zinc ou de Cuivre. Nous retiendrons ici le cas du zinc ( $Z = 30$ ).*

***En tenant compte de la délocalisation maximale de cet ion-molécule.***

**A - Structure et propriétés de la quercétine**

- 1 - Compléter la formule semi-développée de cette molécule afin d'obtenir sa formule de Lewis.
- 2 - Déterminer l'hybridation de chacun des quinze atomes de carbone (de  $C_1$  à  $C_{15}$ ). Justifier.
- 3 - La rotation autour de la liaison  $C_1-C_{10}$  est-elle libre ou empêchée? Justifier.
- 4 - Recenser les différentes formes VSEPR des atomes d'oxygène  $O_a$ ,  $O_b$ ,  $O_c$ ,  $O_d$ ,  $O_e$ ,  $O_f$  et  $O_g$  et déterminer leur état d'hybridation. Justifier.
- 5 - Cette molécule peut former des liaisons intermoléculaires et/ou intramoléculaires de faible énergie. Définir ces liaisons et les faire apparaître sur un schéma.
- 6 - Dans les produits naturels, un hydrogène est lié à l'atome  $O_b$ . Lors de l'ingestion dans le corps humain, ce proton est arraché. On parle de processus de déprotonation. Le nombre d'électrons  $\pi$  a-t-il été modifié lors de la déprotonation? Justifier.
- 7 - Deux grandes familles de formes mésomères de la quercétine déprotonée sont possibles, en écrire au moins une. Que pouvez-vous conclure sur la réactivité de cette molécule?

**B - Interactions avec l'atome métallique**

- 8 - Quelle est la constitution de l'atome de zinc  ${}_{30}^{65}\text{Zn}$  ? Ecrire la configuration électronique de cet atome. Quelle est sa structure de cœur et quelle est sa structure de valence ?
- 9 - Au sein de l'enzyme, le zinc se trouve sous forme cationique. En utilisant le formalisme des cases quantiques, donner la structure électronique des cations  $\text{Zn}^+$  et  $\text{Zn}^{2+}$ . Si des électrons sont célibataires, donner la valeur de leurs quatre nombres quantiques.
- 10 - Selon-vous, avec quel(s) atome(s) de la quercétine déprotonée le cation  $\text{Zn}^{2+}$  est-il susceptible d'interagir? Comment s'appelle ce type d'interaction ? A quel endroit l'interaction sera la meilleure ?

### **C - Modifications artificielles de la structure et des propriétés de la quercétine.**

*Afin d'obtenir des molécules plus actives que le produit naturel non-encore déprotoné, la fonction hydroxyle  $-OH$  a été remplacée synthétiquement par une fonction amine  $-NH_2$  et par une fonction thiol  $-SH$ .*

11 – Dans ces nouvelles molécules, quelles sont les hybridations des atomes d'azote et de soufre? Le nombre d'électrons  $\pi$  a-t-il été modifié? Justifier.

12 – Des tests biologiques effectués après ingestion ont montré que les activités de ces deux nouvelles molécules étaient très faibles, c'est à dire qu'elles interagissent peu avec  $Zn^{2+}$ . Pouvez-vous apporter une explication à ce phénomène?