

# ĐIỀU CHẾ GỐC TỰ DO

## I. MỞ ĐẦU

Gốc tự do là những tiểu phân (nguyên tử, phân tử hoặc ion) mang electron độc thân ở lớp vỏ điện tích. Do sự có mặt của điện tử này mà các gốc tự do có khả năng phản ứng rất cao. Gốc tự do có vai trò quan trọng trong các quá trình cháy, hóa học trong khí quyển, polime hóa, hóa sinh, và nhiều quá trình hóa học khác, gồm cả các quá trình sinh lý trong cơ thể con người.<sup>[1]</sup>

Gốc tự do luôn luôn được sinh ra trong cơ thể con người và có vai trò tích cực đối với cơ thể. Hiện tượng thực bào là hiện tượng vi khuẩn, virus bị tế bào bạch cầu tiêu diệt trong cơ thể, hoặc hiện tượng hô hấp trong tế bào, cơ chế giải độc gan đều là các hoạt động làm sinh ra gốc tự do. Chỉ khi nào gốc tự do sinh ra quá nhiều và hệ thống chất oxy hóa (gốc tự do) nội sinh không đủ sức cân bằng thì sẽ gây ra các rối loạn bệnh lý. Người ta đã chứng minh, khi có sự tăng quá nhiều gốc tự do sẽ gây ra tình trạng viêm nhiễm ở các cơ quan, các bệnh lý như tim mạch, ung thư và nhất là sớm bị lão hóa.<sup>[5]</sup>



[Moses Gomberg](#) (1866-1947), người tìm ra gốc tự do

Trên đây là một số lý do để chúng tôi chọn đề tài tiểu luận “Điều chế gốc tự do” để tóm tắt quá trình hình thành gốc tự do. Từ đó giúp chúng ta biết được những điều kiện hình thành để sử dụng hoặc hạn chế gốc tự do một cách hiệu quả nhất.

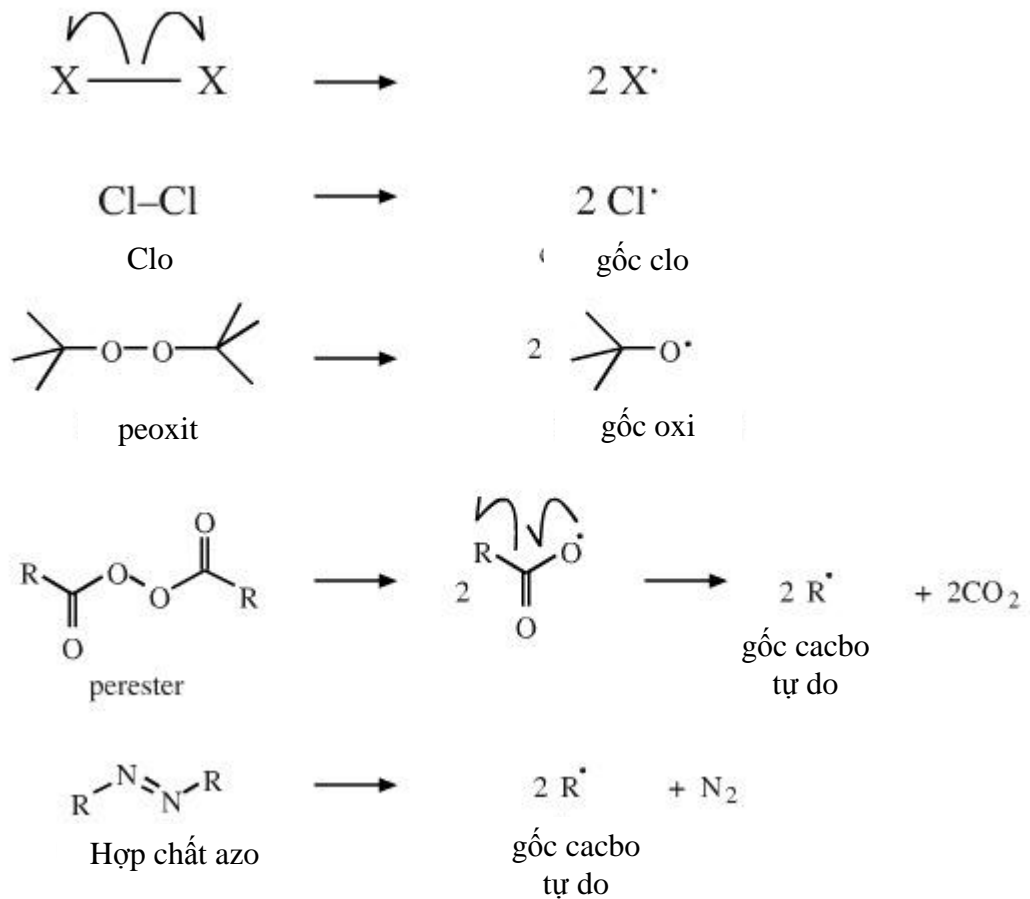
## II. NỘI DUNG

### 1. Quá trình hình thành gốc tự do<sup>[3]</sup>

Theo thuyết obitan phân tử (MO), đây là trạng thái đơn chiếm obitan phân tử (single occupied molecular orbital) hay SOMO.

Trong quá trình phân cắt đồng li, đôi electron dùng chung được chia đều cho hai nguyên tử liên kết tạo ra các gốc tự do. Quá trình này xảy ra nhờ nhiệt hoặc ánh sáng trong dung môi hoặc môi trường phân cực. Tại nhiệt độ cao, tất cả các mảnh của phân tử sẽ được phân chia thành các gốc tự do.

Sự phân chia hay bẻ gãy liên kết xảy ra khi – theo thuyết Lewis – một đôi electron liên kết sẽ bị phân chia và mỗi electron sẽ đi về một tiểu phân:



Như vậy, Cl<sub>2</sub> hình thành các gốc tự do Cl<sup>•</sup>. Peoxit hình thành các gốc tự do oxi. Perester chuyển thành gốc axyl, sau đó tách carbon đioxit và tạo thành gốc cacbo tự do. Hợp chất azo cũng giải phóng nitơ và tạo thành cặp gốc cacbo tự do.

Mặc dù bản chất các gốc tự do của phản ứng thường ít được đề cập, nhưng quá trình liên kết và phân cắt liên kết đã được nghiên cứu về nhiệt động học và lí thuyết cân bằng. Đó là phản ứng cân bằng của đinitơ tetraoxit với nitơ đioxit:



$$K_C = 0,040 \text{ ở } 25^0\text{C}$$



$$K_C = 25 \text{ ở } 25^0\text{C}$$

Dữ kiện trên cho thấy, sự hình thành N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> là quá trình tỏa nhiệt ( $\Delta H^0 = -54,4$  kJ/mol < 0) và sự phân cắt N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> thành NO<sub>2</sub> quá trình thu nhiệt.

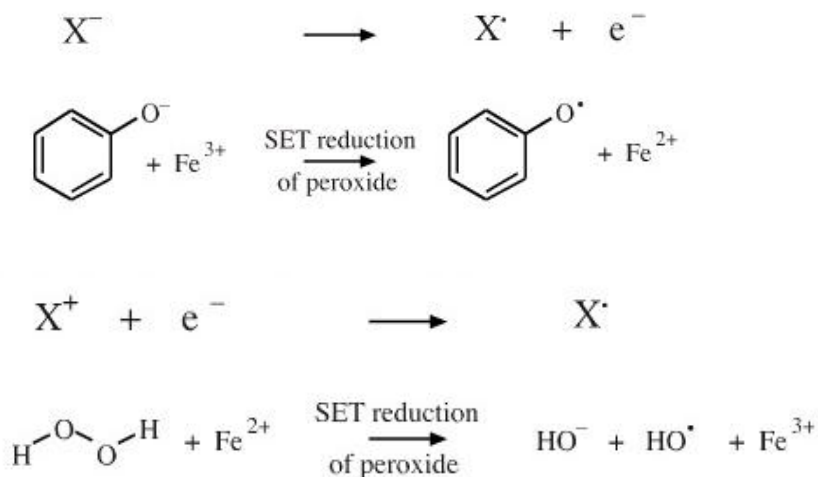
Áp dụng nguyên lý chuyển dịch cân bằng Le Chatelie cho quá trình này ta biết ở nhiệt độ thấp ưu tiên phản ứng ghép NO<sub>2</sub> thành N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> và ở nhiệt độ cao thì ưu tiên phản ứng tách N<sub>2</sub>O<sub>4</sub> thành NO<sub>2</sub>.

Quan hệ nhiệt độ này đúng cho tất cả các quá trình liên kết và phân chia liên kết.

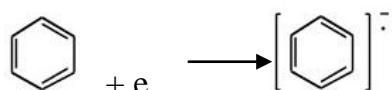
Quá trình hình thành gốc tự do cũng có thể xảy ra trong môi trường phân cực.

Trong một quá trình oxi hóa, một electron có thể tách ra từ một anion. Ví dụ, ion phenoxit oxi hóa  $\text{Fe}^{3+}$  thành gốc tự do phenyl oxi và  $\text{Fe}^{3+}$  đồng thời chuyển thành  $\text{Fe}^{2+}$ .

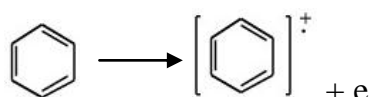
Ion sắt (II),  $\text{Fe}^{2+}$ , có thể phản ứng với hidro peoxit thành gốc tự do hidroxyyl và ion hidroxit:



Gốc tự do cũng có thể được hình thành khi một phân tử được gộp với một tiểu phân có khả năng thu electron và trở thành cả một gốc và anion hay gọi là gốc anion. Tương tự như vậy, khi một phân tử bị mất một electron thì trở thành gốc cation. Các gốc anion và gốc cation được phân loại như tất cả các gốc tự do và cặp axit/bazơ Lewis. Phản ứng có thể được thúc đẩy hoặc kìm chế bởi quá trình solvat hóa.



Gốc anion benzen



Gốc cation benzen

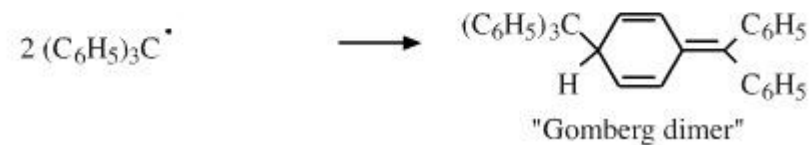
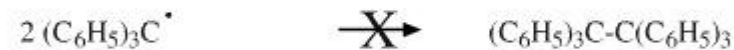
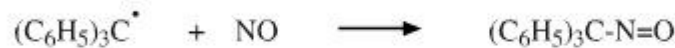
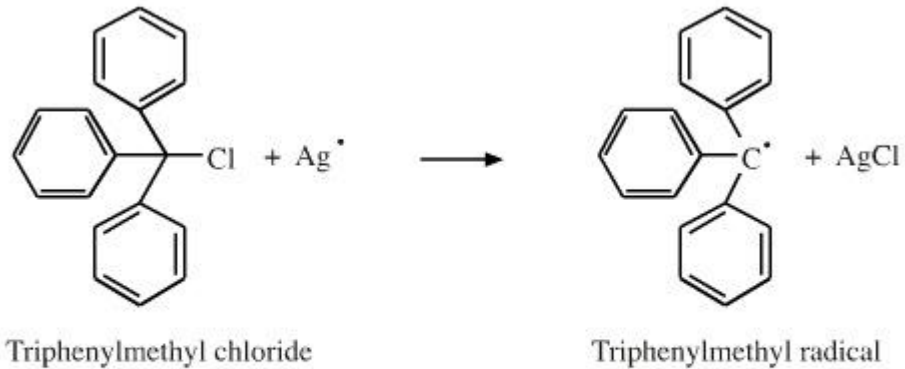
Gốc cation và gốc anion được tìm thấy trong trạng thái khí. Chúng thường được tạo ra và được nghiên cứu bằng phương pháp kết hợp phổ khối lượng và khối phổ ion âm.

## 2. Gốc tự do triphenylmetyl, $\text{Ph}_3\text{C}^\cdot$ <sup>[3]</sup>

Gốc tự do được nhà bác học Nga gốc Do Thái Mose Gomberg phát hiện đầu tiên vào năm 1900. Trong một lần thực hiện thí nghiệm cho triphenylmetyl clorua tác dụng với bột bạc trong dung dịch benzen, ông thu được một hợp chất không màu. Từ các nghiên cứu tiếp theo ông đã chứng minh được hợp chất đó là gốc tự do tripehylmetyl  $\text{Ph}_3\text{C}^\cdot$ , mặc dù sự tồn tại của nó hoàn toàn trái với các lý thuyết đương thời.

Gốc triphenylmetyl giống như hình cánh quạt, không phẳng do trở ngại bố trí các nguyên tử trong không gian bởi gốc phenyl chồng kên.

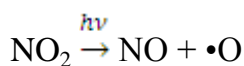
Gốc triphenylmetyl phản ứng với một số chất như: phản ứng với oxy tạo thành peoxit, với iot tạo iotua, với nitơ oxit tạo thành hợp chất nitroso:



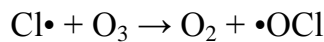
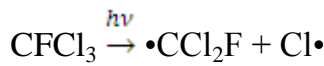
Hai gốc tự do triphenylmetyl dễ kết hợp với nhau thành Gomberg đime hơn thành hexaphenyl etan. Nguyên nhân của hiện tượng này là do năng lượng để tạo thành Gomberg đime thấp hơn.

### 3. Sự hình thành gốc tự do trong khí quyển<sup>[1]</sup>

Nguồn hình thành gốc tự do phổ biến nhất trong tầng thấp khí quyển là phân tử oxi. Nhiều gốc tự do được hình thành do quá trình quang hóa. Ở tầng khí quyển thấp có quá trình quang hóa nitơ đioxit tạo nguyên tử oxi và nitơ oxit, một trong những nguyên nhân gây khói mù quang hóa và quá trình quang hóa ozon cũng tạo ra nguyên tử oxi.



Ở tầng khí quyển cao hơn, phần quan trọng hình thành gốc tự do là quá trình quang hóa cloflocacbon bởi tia cực tím và các gốc tự do hình thành đã phá hủy tầng ozon:

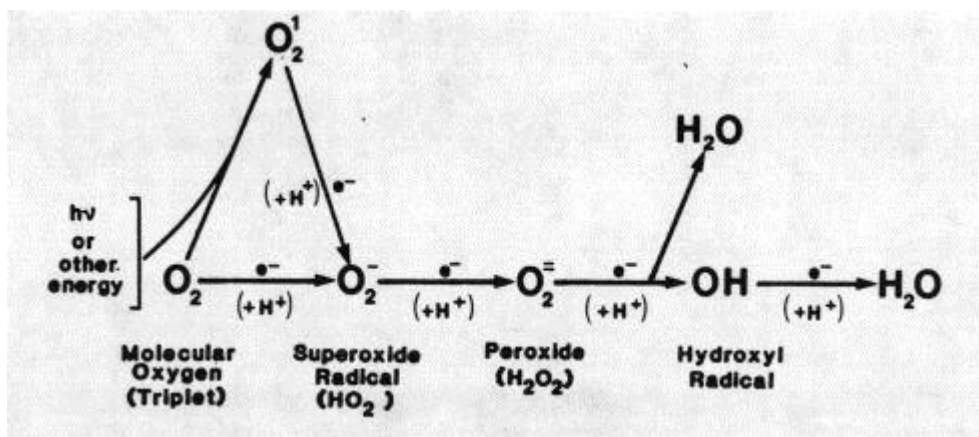


Đây là lý do Công ước quốc tế kêu gọi đến năm 1996 cấm hoàn toàn việc sử dụng CFC đã được thông qua.

#### 4. Sự hình thành gốc tự do trong cơ thể sinh vật<sup>[1],[2],[4],[5]</sup>

Gốc tự do có vai trò quan trọng trong các quá trình sinh hóa, một số quá trình trong số đó cần thiết cho sự sống, như: quá trình tiêu diệt vi khuẩn nội bào bởi các tế bào bạch cầu. Gốc tự do cũng bị lôi kéo vào một số quá trình nổi bật trong tế bào. Đây là quá trình oxi hóa khử trong tế bào.

Hai gốc tự do quan trọng chứa oxi là peoxit và hidroxy. Chúng được tạo từ phân tử oxi dưới trình oxi hóa:



Do khả năng phản ứng rất cao, những gốc tự do này gây ra những phản ứng không mong muốn làm tổn hại tế bào. Nhiều quá trình ung thư là kết quả phản ứng giữa gốc tự do và các chuỗi AND. Những triệu chứng của quá trình lão hóa như xơ vữa động mạch cũng là sự phản ứng giữa gốc tự do và các quá trình hóa học xảy ra trong cơ thể. Nhiều nghiên cứu chỉ ra rằng, môi trường ô nhiễm, tình trạng stress, sai lầm trong dinh dưỡng, thói quen lạm dụng các độc chất (như hút thuốc, uống rượu, kể cả dược phẩm) làm tăng gốc tự do gây lão hóa.

Để chống lại sự gia tăng của gốc tự do gây hại, các nhà khoa học đã đặt vấn đề dùng các “chất chống oxi hóa ngoại sinh” (từ bên ngoài đưa vào cơ thể) với mục đích phòng bệnh nâng cao sức khỏe, chống lão hóa là beta-caroten, khoáng chất selen, các hợp chất flavonoid, Co-enzym Q10, khoáng kẽm, poliphenol... có nguồn gốc thiên nhiên là thực phẩm như rau cải, trái cây tươi và một số loại thảo dược.

### III. KẾT LUẬN

Gốc tự do có vai trò quan trọng trong nhiều quá trình hóa học. Gốc tự do thường được hình thành nhờ nhiệt độ hoặc ánh sáng. Như vậy, nếu muốn điều chế và hình thành nhiều gốc tự do thì tác động vào yếu tố nhiệt độ hoặc ánh sáng phù hợp.

Gốc tự do cũng là nguyên nhân dẫn đến tình trạng suy giảm tầng ozon. Việc hạn chế sử dụng các chất có khả năng sản sinh ra nhiều gốc tự do trong tầng khí quyển như CFC là cực kì cần thiết.

Bên cạnh gốc tự do có lợi cho cơ thể (hiện tượng thực bào, cơ chế giải độc gan,...), những thói quen không tốt và môi trường ô nhiễm đã thúc đẩy việc hình thành quá nhiều gốc tự do dẫn đến cơ thể không tự cân bằng được và sinh ra các rối loạn bệnh lý. Để hạn chế quá trình này, chúng ta cần có chế độ sinh hoạt khoa học và sử dụng các loại thực phẩm chứa nhiều chất chống oxi hóa để phòng bệnh và nâng cao sức khỏe.

### **TÀI LIỆU THAM KHẢO**

- [1] [http://en.wikipedia.org/wiki/Radical\\_\(chemistry\)](http://en.wikipedia.org/wiki/Radical_(chemistry))
- [2] <http://www.drproctor.com/crcpap2.htm>
- [3] [http://www.meta-synthesis.com/webbook/14\\_radical/radical.html](http://www.meta-synthesis.com/webbook/14_radical/radical.html)
- [4] <http://chemvn.net/chemvn/archive/index.php?t-9637.html>
- [5] <http://suckhoedoisong.vn/20100118102358838p0c63/goc-tu-do-la-gi.htm>