

**BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO  
TRƯỜNG ĐẠI HỌC BÁCH KHOA HÀ NỘI**

---

**CHƯƠNG TRÌNH ĐÀO TẠO  
TIẾN SĨ**

**CHUYÊN NGÀNH  
HÓA LÝ THUYẾT VÀ HÓA LÝ  
MÃ SỐ: 62440119**

**Đã được Hội đồng Xây dựng Chương trình đào tạo bậc Tiến sĩ thông qua  
ngày 15 tháng 12 năm 2014**

HÀ NỘI - 2014

# MỤC LỤC

Trang

## **PHẦN I TỔNG QUAN VỀ CHƯƠNG TRÌNH ĐÀO TẠO**

- 1 Mục tiêu đào tạo
- 1.1 Mục tiêu chung
- 1.2 Mục tiêu cụ thể
- 2 Thời gian đào tạo
- 3 Khối lượng kiến thức
- 4 Đối tượng tuyển sinh
  - 4.1 Định nghĩa
  - 4.2 Phân loại đối tượng
- 5 Quy trình đào tạo, điều kiện công nhận đạt
- 6 Thang điểm
- 7 Nội dung chương trình
  - 7.1 Cấu trúc
  - 7.2 Học phần bổ sung
  - 7.3 Học phần Tiến sĩ
    - 7.3.1 Danh mục học phần Tiến sĩ
    - 7.3.2 Mô tả tóm tắt học phần Tiến sĩ
    - 7.3.3 Kế hoạch học tập các học phần Tiến sĩ
  - 7.4 Chuyên đề Tiến sĩ
- 8 Danh sách Tạp chí / Hội nghị Khoa học

## **PHẦN II ĐỀ CƯƠNG CHI TIẾT CÁC HỌC PHẦN**

- 9 Danh mục học phần chi tiết của chương trình đào tạo
- 9.1 Danh mục học phần bổ sung
- 9.2 Danh mục học phần Tiến sĩ
- 10 Đề cương chi tiết các học phần Tiến sĩ

**PHẦN I**  
**TỔNG QUAN VỀ CHƯƠNG TRÌNH ĐÀO TẠO**

CHƯƠNG TRÌNH ĐÀO TẠO TIẾN SĨ  
CHUYÊN NGÀNH „HÓA LÝ THUYẾT VÀ HÓA LÝ“

**Tên chương trình:** Chương trình đào tạo Tiến sĩ chuyên ngành „Hóa lý thuyết và Hóa lý“  
**Trình độ đào tạo:** Tiến sĩ  
**Chuyên ngành đào tạo:** Hóa lý thuyết và Hóa lý– Theoretical and Physical Chemistry  
**Mã chuyên ngành:** 62440119

(Ban hành theo Quyết định số 3446/QĐ-ĐHBK-SDH ngày 4 tháng 9 năm 2014 của Hiệu trưởng trường ĐH Bách Khoa Hà Nội)

## 1 Mục tiêu đào tạo

### 1.1 Mục tiêu chung

Đào tạo Tiến sĩ chuyên ngành *Hóa lý thuyết và Hóa lý* có trình độ chuyên môn sâu cao, có khả năng nghiên cứu độc lập và lãnh đạo nhóm nghiên cứu các lĩnh vực của chuyên ngành, có tư duy khoa học, có khả năng tiếp cận và giải quyết các vấn đề khoa học chuyên ngành, có khả năng trình bày - giới thiệu các nội dung khoa học, đồng thời có khả năng đào tạo các bậc Đại học và Cao học.

### 1.2 Mục tiêu cụ thể

Sau khi đã kết thúc thành công chương trình đào tạo, Tiến sĩ chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý

Có khả năng tiếp cận và trực tiếp giải quyết các vấn đề chuyên môn thuộc lĩnh vực Hóa lý thuyết và Hóa lý.

Có khả năng dẫn dắt, lãnh đạo nhóm nghiên cứu thuộc lĩnh vực Hóa lý thuyết và Hóa lý.

Có khả năng nghiên cứu, đề xuất và áp dụng các giải pháp công nghệ thuộc lĩnh vực Hóa lý thuyết và Hóa lý trong thực tiễn.

Có khả năng cao để trình bày, giới thiệu (bằng các hình thức bài viết, báo cáo hội nghị, giảng dạy đại học và sau đại học) các vấn đề khoa học thuộc lĩnh vực Hóa lý thuyết và Hóa lý.

## 2 Thời gian đào tạo

- *Hệ tập trung liên tục:* 3 năm liên tục đối với NCS có bằng ThS, 4 năm đối với NCS có bằng ĐH.
- *Hệ không tập trung liên tục:* NCS có văn bằng ThS đăng ký thực hiện trong vòng 4 năm đảm bảo tổng thời gian học tập, nghiên cứu tại Trường là 3 năm và 12 tháng đầu tiên tập trung liên tục tại Trường.

## 3 Khối lượng kiến thức

Khối lượng kiến thức bao gồm khối lượng của các học phần Tiến sĩ và khối lượng của các học phần bổ sung được xác định cụ thể cho từng loại đối tượng tại mục 4.

NCS đã có bằng ThS: tối thiểu 8 tín chỉ + khối lượng bổ sung (nếu có).

NCS mới có bằng ĐH: tối thiểu 8 tín chỉ + 28 tín chỉ (không kể luận văn) của Chương trình Thạc sĩ Khoa học chuyên ngành *Hóa lý thuyết và Hóa lý*. Đối với NCS có bằng ĐH của các hệ 4 hoặc 4,5 năm (theo quy định) sẽ phải thêm các học phần bổ sung của Chương trình Thạc sĩ Khoa học chuyên ngành *Hóa lý thuyết và Hóa lý*.

#### **4 Đối tượng tuyển sinh**

Đối tượng tuyển sinh là các thí sinh đã có bằng Thạc sĩ với chuyên ngành tốt nghiệp phù hợp (đúng ngành) hoặc gần phù hợp với chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý. Chỉ tuyển sinh mới có bằng ĐH với chuyên ngành tốt nghiệp phù hợp. Mức độ “*phù hợp hoặc gần phù hợp*” với chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý, được định nghĩa cụ thể ở mục 4.1 sau đây.

##### **4.1 Định nghĩa**

- Ngành phù hợp: Là những hướng đào tạo chuyên sâu thuộc ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý.
- Ngành gần phù hợp: Là những hướng đào tạo chuyên sâu thuộc các ngành sau Môi trường, Sinh học – Thực phẩm, Hữu cơ – Hóa dầu, Hóa Hữu cơ, Hóa Phân tích và ngành Hóa của các trường Đại học Kỹ thuật khác.

##### **4.2 Phân loại đối tượng**

- Có bằng ThS Khoa học của ĐH Bách Khoa Hà Nội với ngành tốt nghiệp cao học đúng với chuyên ngành Tiến sĩ. *Đây là đối tượng không phải tham gia học bổ sung*, gọi tắt là đối tượng **A1**.
- Có bằng tốt nghiệp Đại học loại xuất sắc với ngành tốt nghiệp đúng với chuyên ngành Tiến sĩ. *Đây là đối tượng phải tham gia học bổ sung*, gọi tắt là đối tượng **A2**.
- Có bằng ThS đúng ngành, nhưng không phải là ThS Khoa học của ĐH Bách Khoa Hà Nội hoặc có bằng ThS tốt nghiệp ngành gần phù hợp. *Đây là đối tượng phải tham gia học bổ sung*, gọi tắt là đối tượng **A3**.

#### **5 Quy trình đào tạo, điều kiện công nhận đạt**

Quy trình đào tạo được thực hiện theo học chế tín chỉ, tuân thủ Quy định 1035/2011 về tổ chức và quản lý đào tạo sau đại học của ĐH Bách Khoa Hà Nội.

Các học phần bổ sung phải đạt mức điểm C trở lên (xem mục 6).

Các học phần Tiến sĩ phải đạt mức điểm B trở lên (xem mục 6).

#### **6 Thang điểm**

*Khoản 6a Điều 62 của Quy định 1035/2011 quy định:*

Việc chấm điểm kiểm tra - đánh giá học phần (bao gồm các điểm kiểm tra và điểm thi kết thúc học phần) được thực hiện theo thang điểm từ 0 đến 10, làm tròn đến một chữ số thập phân sau dấu phẩy. Điểm học phần là điểm trung bình có trọng số của các điểm kiểm tra và điểm thi kết thúc (tổng của tất cả các điểm kiểm tra, điểm thi kết thúc đã nhân với trọng số tương ứng của từng điểm được quy định trong đề cương chi tiết học phần).

Điểm học phần được làm tròn đến một chữ số thập phân sau dấu phẩy, sau đó được chuyển thành điểm chữ với mức như sau:

Điểm số từ	8,5 – 10	chuyển thành	điểm A (Giỏi)
Điểm số từ	7,0 – 8,4	chuyển thành	điểm B (Khá)
Điểm số từ	5,5 – 6,9	chuyển thành	điểm C (Trung bình)
Điểm số từ	4,0 – 5,4	chuyển thành	điểm D (Trung bình yếu)

Điểm số dưới 4,0 chuyển thành điểm F (Kém)

## 7 Nội dung chương trình

### 7.1 Cấu trúc

Cấu trúc chương trình đào tạo trình độ Tiến sĩ gồm có 3 phần như bảng sau đây.

Phần	Nội dung đào tạo	A1	A2	A3
1	HP bổ sung	0	CT ThS KH (28TC)	≥ 4TC
	HP TS	8TC		
2	TLTQ	Thực hiện và báo cáo trong năm học đầu tiên		
	CĐTS	Tổng cộng 3 CĐTS, mỗi CĐTS 2TC		
3	NC khoa học			
	Luận án TS			

Lưu ý:

- Số TC qui định cho các đối tượng trong là số TC tối thiểu NCS phải hoàn thành.
- Đối tượng A2 phải thực hiện toàn bộ các học phần qui định trong chương trình ThS Khoa học của ngành tương ứng, không cần thực hiện luận văn ThS.
- Các HP bổ sung được lựa chọn từ chương trình đào tạo Thạc sĩ của ngành đúng chuyên ngành Tiến sĩ.
- Việc qui định số TC của HP bổ sung cho đối tượng A3 do người hướng dẫn (NHD) quyết định dựa trên cơ sở đối chiếu các học phần trong bảng kết quả học tập ThS của thí sinh với chương trình ThS hiện tại của ngành đúng chuyên ngành Tiến sĩ nhưng phải đảm bảo số TC tối thiểu trong bảng.
- Các HP TS được NHD đề xuất từ chương trình đào tạo Thạc sĩ và Tiến sĩ của trường nhằm trang bị kiến cần thiết phục vụ cho đề tài nghiên cứu cụ thể của LATS.

### 7.2 Học phần bổ sung

Các học phần bổ sung được mô tả trong quyển „Chương trình đào tạo Thạc sĩ“ chuyên ngành „Kỹ thuật hóa học“ hiện hành của trường ĐH Bách Khoa Hà Nội.

NCS phải hoàn thành các học phần bổ sung trong thời hạn 2 năm kể từ ngày có quyết định công nhận là NCS.

### 7.3 Học phần Tiến sĩ

#### 7.3.1 Danh mục học phần Tiến sĩ

TT	MÃ SỐ	TÊN HỌC PHẦN	GIẢNG VIÊN	TÍN CHỈ	KHỐI LƯỢNG
1	CH7100	Động học và cơ chế các phản ứng xúc tác phức	GS. TSKH Nguyễn Văn Xuyên	3	3(3-0-0-6)
2	CH7101	Cấu trúc liên kết hóa học và những đặc trưng hóa lý của các chất xúc tác phức	GS. TSKH Nguyễn Văn Xuyên	2	2(2-0-0-4)
3	CH7102	Một số ứng dụng thực tiễn của xúc tác phức	GS. TSKH Nguyễn Văn Xuyên	2	2(2-0-0-4)
4	CH7103	Quang hóa học	TS Trần Văn Anh	2	2(2-0-0-4)
5	CH7104	Các phương pháp cộng hưởng từ	TS Trần Văn Anh	2	2(2-0-0-4)

#### 7.3.2 Mô tả tóm tắt học phần Tiến sĩ

### **CH7100 Động học và cơ chế các phản ứng xúc tác phức**

Cung cấp cho NCS chuyên ngành hóa lý thuyết và hóa lý và các lĩnh vực có liên quan những kiến thức về: Quy luật động học, cơ chế và các điều kiện tối ưu của phản ứng xúc tác phức phụ thuộc rất nhạy cảm, đa chiều, nhiều biến vào các yếu tố ảnh hưởng khác nhau: Cấu trúc phân tử, các đặc trưng vật lý và hóa lý, tương quan nồng độ của chất xúc tác, các chất phản ứng, pH môi trường. Các đặc trưng động học: tốc độ và hằng số tốc độ phản ứng, các hằng số tốc độ phản ứng giai đoạn, năng lượng hoạt hóa, bậc chung, bậc riêng của phản ứng, phương trình động học tổng quát. Các đặc trưng cơ chế: Sự tạo thành và phân hủy phức trung gian hoạt động được tạo thành giữa xúc tác phức và các chất phản ứng, chu trình oxi hóa khử thuận nghịch, sự phát sinh và hủy diệt gốc tự do, các trạng thái hóa trị của kim loại, các loại cơ chế mạch gốc, phân tử, hỗn hợp, nội cầu, ngoại cầu, sơ đồ cơ chế, mối quan hệ giữa nhiệt động học, động học và cơ chế của phản ứng xúc tác phức...

### **CH7100 Kinetics and mechanism of catalytic reactions by complexes**

PhD students of theoretical chemistry and physical chemistry and related fields will be provided with fundamental knowledge about thermodynamics, kinetics, mechanism, their relations and optimal conditions of the complex catalyst reactions depending upon different influential factors such as molecular structure, physical and physicochemical properties, concentration correlation of catalyst, reactants and pH of medium.

To study problems mentioned above, it is necessary to use physical and physicochemical methods of thermodynamics, kinetics, electrochemistry, inhibitors and concurrents, electron absorption spectroscopy of molecules (UV-VIS), atomic absorption spectroscopy (AAS), infrared spectroscopy (IRS), Raman spectroscopy (RS), Gas chromatography (GC), Mass-spectroscopy (MS), Electron paramagnetic resonance (EPR), Nuclear magnetic resonance (NMR), Magnetic chemistry, etc.

### **CH7101 Cấu trúc liên kết hóa học và những đặc trưng hóa lý của các chất xúc tác phức**

Trên cơ sở lý thuyết hiện đại của hóa học lượng tử, hóa lý, hóa học phối trí,... cung cấp cho nghiên cứu sinh chuyên ngành hóa lý thuyết và hóa lý và các lĩnh vực có liên quan những kiến thức cơ bản về: Cấu trúc electron, cấu trúc hình học, các tính chất nhiệt động học, động học, điện hóa, quang học, từ học, cơ chế hoạt động, hoạt tính, độ chọn lọc xúc tác... đặc trưng cho mỗi dạng phức chất của kim loại chuyển tiếp với ligand có bản chất khác nhau đóng vai trò xúc tác (xúc tác phức): phức đơn nhân, đa nhân, phức hỗn hợp kim loại, phức hỗn hợp ligand. Các chất xúc tác phức này được xem là mô hình hóa của các chất xúc tác sinh học, do đó, có tính ưu việt hoạt tính và độ chọn lọc rất cao ở nhiệt độ và áp suất thường và sử dụng làm xúc tác hữu hiệu cho nhiều phản ứng hóa học khác nhau: oxy hóa, hydro hóa, hydroxyl hóa, carbonyl hóa, carboxyl hóa, polime hóa, oligome hóa...

### **CH7101 Structure, chemical bond and characteristics of complex catalysts**

On the basis of modern theories of quantum chemistry, physical chemistry, coordinate chemistry, etc, PhD students of theoretical chemistry and physical chemistry and related fields will be provided with fundamental knowledge on electron structure, geometrical structure and properties of thermodynamics, kinetics, electrochemistry, optics, magnetism, acting mechanism, activity and selectivity typical for every type of mono-, polynuclear-, mixed metal-, mixed ligand complex catalysts formed by transition metal ions and various ligands. Considered as models of biocatalysts, the complex catalysts have superiorities such as very high activity and selectivity at normal temperature and pressure for many different chemical reactions including oxidation, reduction, hydrogenation, carbonization, carboxylation, polymerization, oligomerization, etc.

### **CH7102 Một số ứng dụng thực tiễn của xúc tác phức**

Cung cấp cho sinh viên chuyên ngành Hóa lý thuyết và hóa lý và các lĩnh vực có liên quan những kiến thức về: Cơ sở khoa học, kỹ thuật thực nghiệm, hiệu lực của mỗi phương pháp: phổ hấp

thu electron phân tử (UV – vis) phổ hồng ngoại (IRS), phổ Raman, phổ huỳnh quang, phổ hấp thụ nguyên tử (AAS), cực phổ, phổ khối lượng (MS), sắc ký, cộng hưởng từ electron (EPR), cộng hưởng từ hạt nhân (NMR), động học, các chất ức chế, các chất cạnh tranh... được ứng dụng để nghiên cứu xác định cấu trúc phân tử, thành phần, độ bền nhiệt động, hoạt tính, độ chọn lọc, cơ chế hoạt động, các tính chất vật lý và hóa lý đặc trưng khác cũng như điều kiện tạo thành tối ưu của mỗi dạng phức chất đóng vai trò xúc tác. Trên cơ sở đó tổng hợp ra chất xúc tác phức hữu hiệu, thích hợp cho mỗi loại phản ứng hóa học.

#### **CH7102 Some practical applications of complex catalysis**

The research outcomes on synthesizing complex catalysts, thermodynamics, kinetics, mechanism of catalysis, their relations and optimal conditions of catalytic reactions are applied to solve various actual practical problems such as:

- Establishing scientific and experimental bases for improving and innovating technological processes.
- Applying in industrial processes: isomerization, hydroxylation, hydroformylation, oxidation, hydrogenation, polymerization, oligomerization, synthesis of organic compounds.
- Using in waste water treatment and environment protection.
- Microanalysis of super-clean materials by means of catalytic kinetic method.
- Color bleaching in paper and textile industries.
- Keeping and preserving the quality of industrial products, food, pharmaceutical and agricultural products.
- Producing multi-, medium- and micro fertilizers for higher productivity of plants.

#### **CH7103 Quang hóa học**

Học phần cung cấp cho sinh viên kiến thức cơ bản về phản ứng quang hóa, các giai đoạn của phản ứng quang hóa như kết quả một quá trình kích thích phân tử. Ngoài ra, học phần bổ sung các kiến thức về những chất mang đặc tính quang hóa trên ví dụ ôzôn, ứng dụng của quang hóa trong các phương pháp phân tích Hóa lý hiện đại trên ví dụ Laser, Phổ quang electron, Phổ Raman, ...

#### **CH7103 Photochemistry**

The subject provides PhD students with basic knowledge on photochemical processes as a result of molecular excitation. Moreover, knowledge on photochemical sensitive substances (sensitive to ozone, for example) and application of photochemistry in modern physico-analytical methods, such as Laser, Photoelectron spectroscopy, Photoemission spectroscopy, Photolysis are also provided.

#### **CH7104 Các phương pháp cộng hưởng từ**

Học phần cung cấp cho sinh viên kiến thức lý thuyết cơ bản về hiện tượng cộng hưởng từ, nguyên lý các phương pháp cộng hưởng từ cũng như ứng dụng của chúng trong nghiên cứu hiện đại.

#### **CH7104 Magnetic resonance spectroscopy**

The subject provides PhD students with the basic theoretical background on the magnetic resonance phenomena, basic principles of the magnetic resonance spectroscopy as well as their applications in modern research.

#### *7.3.3 Kế hoạch học tập các học phần Tiến sĩ*

Các học phần Tiến sĩ được thực hiện linh hoạt, tùy theo các điều kiện thời gian cụ thể của giảng viên. Tuy nhiên, nghiên cứu sinh phải hoàn thành các học phần Tiến sĩ trong vòng 24 tháng kể từ ngày chính thức nhập trường.

### **7.4 Chuyên đề Tiến sĩ**



Mỗi nghiên cứu sinh phải hoàn thành 3 chuyên đề Tiến sĩ, có thể tùy chọn từ danh sách hướng chuyên sâu. Mỗi hướng chuyên sâu đều có người hướng dẫn do Hội đồng Xây dựng chương trình đào tạo chuyên ngành của Viện Kỹ thuật hóa học quyết định.

Người hướng dẫn khoa học luận án của nghiên cứu sinh sẽ đề xuất đề tài cụ thể. Ưu tiên đề xuất đề tài gắn liền, thiết thực với đề tài của luận án Tiến sĩ.

Sau khi đã có đề tài cụ thể, NCS thực hiện đề tài đó dưới sự hướng dẫn khoa học của người hướng dẫn chuyên đề.

*Danh mục hướng chuyên sâu cho Chuyên đề Tiến sĩ*

TT	MÃ SỐ	HƯỚNG CHUYÊN SÂU	NGƯỜI HƯỚNG DẪN	TÍNH CHỈ
1	CH7150	Xúc tác phức	GS. TSKH Nguyễn Văn Xuyến	2
2	CH7151	Xúc tác phức trong bảo vệ môi trường	GS. TSKH Nguyễn Văn Xuyến	2
3	CH7152	Phương pháp động học xúc tác trong phân tích vi lượng	GS. TSKH Nguyễn Văn Xuyến	2
4	CH7153	Cộng hưởng từ electron	TS Trần Văn Anh	2
5	CH7154	Ăn mòn và bảo vệ kim loại	TS Trần Văn Anh	2
6	CH7155	Một số phương pháp xử lý nước thải	TS Trần Thị Thanh Thủy	2

**8 Danh sách Tạp chí / Hội nghị khoa học**

Các diễn đàn khoa học trong nước trong bảng dưới đây là nơi NCS có thể chọn công bố các kết quả nghiên cứu khoa học phục vụ hoàn thành luận án Tiến sĩ.

Số TT	Tên diễn đàn	Địa chỉ liên hệ	Định kỳ xuất bản / hạp
1	Tạp chí Hóa học	70 Trần Hưng Đạo	6 số/1 năm
2	Tạp chí Khoa học công nghệ	Số 1 Đại cổ việt, Hà Nội	6 số /1 năm
3	Hóa học ứng dụng	139 Lò Đúc	4 số /1 năm
4	Các tạp chí, hội nghị khoa học quốc tế chuyên ngành		

PHẦN II

**ĐỀ CƯƠNG CHI TIẾT CÁC HỌC PHẦN**

## 9 Danh mục học phần chi tiết của chương trình đào tạo

### 9.1 Danh mục học phần bổ sung

Danh mục học phần bổ sung có thể xem chi tiết trong quyển „Chương trình đào tạo Thạc sĩ Kỹ thuật hóa học“.

### 9.2 Danh mục học phần Tiến sĩ

Số TT	MÃ SỐ	TÊN HỌC PHẦN	TÊN TIẾNG ANH	KHỐI LƯỢNG	Khoa/Viện Bộ môn	Đánh giá
1	CH 7100	Động học và cơ chế các phản ứng xúc tác phức	Kinetics and mechanism of catalytic reactions by complexes	3(3-0-0-6)	CNHH	
2	CH 7101	Cấu trúc liên kết hóa học và những đặc trưng hóa lý của các chất xúc tác phức	Structure, chemical bond and physico-chemical characteristics of complex catalysts	2(2-0-0-4)	CNHH	
3	CH 7102	Một số ứng dụng thực tiễn của xúc tác phức	Some practical applications of complex catalysis	2(2-0-0-4)	CNHH	
4	CH 7103	Quang hóa học	Photochemistry	2(2-0-0-4)	CNHH	
5	CH 7104	Các phương pháp cộng hưởng từ	Magnetic resonance	2(2-0-0-4)	CNHH	

## 10 Đề cương chi tiết các học phần Tiến sĩ

### CH7100 Động học và cơ chế các phản ứng xúc tác phức

Kinetics and mechanism of catalytic reactions by complexes

**1. Tên học phần:** Động học và cơ chế các phản ứng xúc tác phức

**2. Mã học phần:** CH7100

**3. Tên tiếng Anh:** Kinetics and mechanism of catalytic reactions by complexes

**4. Khối lượng:** 3(3-0-0-6)

- Lý thuyết: 45 tiết

- Bài tập:

- Thí nghiệm:

**5. Đối tượng tham dự:** Tất cả NCS thuộc chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý

**6. Mục tiêu của học phần:** Học phần này nhằm mang lại cho NCS:

- Các kiến thức nâng cao, hiện đại của chuyên ngành Hóa lý thuyết và hóa lý về phản ứng các xúc tác phức

- Rèn luyện khả năng tư duy khoa học.

- Rèn luyện kỹ năng thực nghiệm cho việc nghiên cứu các phản ứng xúc tác phức, tạo cơ sở khoa học và thực nghiệm cho việc giải quyết nhiều vấn đề thực tiễn khác nhau có liên quan

**7. Nội dung tóm tắt:**

- Phản ứng xúc tác phức là mô hình của các phản ứng sinh học

- Các phương pháp vật lý và hóa lý nghiên cứu phản ứng xúc tác phức

- Nhiệt động học, động học và cơ chế của các phản ứng xúc tác

**8. Nhiệm vụ của NCS:**

- Dự lớp:

- Bài tập:

**9. Đánh giá kết quả:**

- Mức độ dự giờ giảng:

- Kiểm tra định kỳ:
- Thi kết thúc học phần:

## **10. Nội dung chi tiết học phần:**

### **PHẦN MỞ ĐẦU**

- Giới thiệu môn học
- Giới thiệu đề cương môn học
- Giới thiệu tài liệu tham khảo

### **CHƯƠNG 1: Ứng dụng các phương pháp vật lý và hóa lý nghiên cứu phản ứng xúc tác phức**

- 1.1 Phương pháp nhiệt động học
- 1.2 Phương pháp động học
- 1.3 Phương pháp các chất ức chế và các chất cạnh tranh
- 1.4 Phương pháp điện hóa học
- 1.5 Phương pháp phổ dao động (IRS, Raman)
- 1.6 Phương pháp phổ hấp thụ electron phân tử (UV-Vis)
- 1.7 Phương pháp phổ phát quang phân tử
- 1.8 Phương pháp phổ hấp thụ nguyên tử (AAS)
- 1.9 Phương pháp sắc ký và phổ khối lượng (GC/MS)
- 1.10 Phương pháp cộng hưởng từ electron (EPR) và cộng hưởng từ hạt nhân (NMR)
- 1.11 Phương pháp hóa tử
- 1.12 Ứng dụng tin học

### **CHƯƠNG 2: Động học các phản ứng xúc tác phức**

- 2.1 Phức chất đóng vai trò xúc tác cho phản ứng
  - 2.1.1 Cấu trúc thành phần hằng số bền và các đặc trưng của các chất xúc tác phức
  - 2.1.2 Hoạt tính và độ chọn lọc của chất xúc tác phức
  - 2.1.3 Độ bù trừ trong phản ứng xúc tác phức
- 2.2 Phức trung gian hoạt động
  - 2.2.1 Sự tạo thành từ chất xúc tác phức và các chất phản ứng
  - 2.2.2 Cấu trúc, thành phần, hằng số bền và các đặc trưng hóa lý
- 2.3 Phản ứng tạo thành phức trung gian hoạt động
  - 2.3.1 Sự phụ thuộc tốc độ phản ứng và các yếu tố ảnh hưởng khác nhau
  - 2.3.2 Bậc riêng của phản ứng
  - 2.3.3 Phương trình động học của phản ứng
- 2.4 Phản ứng xúc tác phức
  - 2.4.1 Sự phụ thuộc tốc độ phản ứng và các yếu tố ảnh hưởng khác nhau
  - 2.4.2 Bậc riêng, hằng số tốc độ và năng lượng hoạt hóa của phản ứng
  - 2.4.3 Phương trình động học và các điều kiện tối ưu của phản ứng
  - 2.4.4 Mối quan hệ giữa các thông số nhiệt động học và động học của phản ứng
  - 2.4.5 Mối quan hệ giữa thông số cấu trúc và thông số năng lượng của phản ứng

### **CHƯƠNG 3: Cơ chế của phản ứng xúc tác phức**

- 3.1 Cơ chế vận chuyển electron giữa các cấu tử hợp thành phức trung gian hoạt động
  - 3.1.1 Cơ chế vận chuyển electron nội cầu
  - 3.1.2 Cơ chế vận chuyển electron ngoại cầu
- 3.2 Sự phân hủy phức trung gian hoạt động
  - 3.2.1 Sự phát sinh và hủy diệt các gốc tự do
  - 3.2.2 Sự thay đổi các trạng thái hóa trị của ion kim loại
  - 3.2.3 Chu trình oxy hóa khử thuận nghịch- nguồn phát sinh gốc tự do và hoàn nguyên chất xúc tác phức
- 3.3 Cơ chế các phản ứng xúc tác phức

3.3.1 Ảnh hưởng của các chất ức chế tương tác đặc thù với các gốc tự do và của các chất cạnh tranh đến tốc độ phản ứng xúc tác phức

3.3.2 Tốc độ phản ứng sinh mạch và các yếu tố ảnh hưởng

3.3.3 Phương trình động học phản ứng sinh mạch

3.3.4 Cơ chế của phản ứng xúc tác phức

- Cơ chế mạch gốc
- Cơ chế phân tử- ion
- Cơ chế hỗn hợp

#### **11. Tài liệu học tập:**

Nguyễn Văn Xuyên (2007), *Cấu tạo phân tử và liên kết hóa học*, Nhà xuất bản Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội.

#### **12. Tài liệu tham khảo:**

- [1] Đào Đình Thúc (2007), *Một số phương pháp phổ ứng dụng trong hóa học*, Nhà xuất bản Đại học Quốc Gia Hà Nội.
- [2] Từ Văn Mặc (2003), *Phân tích hóa lý: Phương pháp phổ nghiệm nghiên cứu cấu trúc phân tử*, Nhà xuất bản Khoa học và kỹ thuật, Hà Nội
- [3] Nguyễn Văn Xuyên (1994), *Xúc tác đồng thể oxy hóa khử bằng phức chất một nhân và hai nhân một số ion kim loại chuyển tiếp*, Luận án tiến sĩ khoa học Hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [3] Trần Thị Minh Nguyệt (2002), *Nghiên cứu tính chất catalaza và peroxidaza của phức chất một số kim loại chuyển tiếp với etylendiamin*, Luận án tiến sĩ hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [4] Vũ Thị Kim Loan (2008), *Xúc tác đồng thể oxy hóa- khử bằng phức chất của ion kim loại chuyển tiếp*, Luận án Tiến sĩ hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [5] Nguyễn Văn Dường (2010), *Nghiên cứu tính chất catalaza và peroxidaza của phức Co(II)-Axit citric*, Luận án Tiến sĩ hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [6] Nguyễn Văn Xuyên, Trần Thị Minh Nguyệt (2001), *Xúc tác phức*, Các báo cáo khoa học Hội nghị xúc tác hấp phụ Toàn quốc lần thứ 2, Hà Nội, tr 127-160.
- [7] G. Henrici-Olive', S. Olive' (1997), *Coordination and Catalysis*, Verlagchimie-Weinheim-New- York.
- [8] Cristopher Masters (1981), *Homogeneous Transition- Metal Catalysis*, London New York Chapman and Hall.
- [9] Piet W.N.M. VanleenWen, Keij Morokuma and Jooph. Van Lenthe (1995), *Theoretical Aspects of Homogeneous Catalysis*, Kluwer Academic Publishers.
- [10] Surit Bhaduri, Doble Mukesh (2000), *Homogenous Catalysis Mechanisms and Industrial Application*, A.John Wiley and Sons Publication, New York- Chichester-Weiheim- Brisbane-Singapore-Toronto
- [11] W. P. Kwar, B.M.Voeler (2003), *Rates of hydroxyl radical generation and organic compound oxidation in mineral-catalyzed Fenton-like system*, Environ.Sci.Tech, 37,pp 1150-1158
- [12] Maria Papadaki, Jun Gao (2005), *Kinetic models of complex reaction systems*, Computers and Chemical Engineering, 29 (11-12), pp 2449-2460
- [13] Syuhei Yamaguchi, Hideki Masuda (2004), *Basic approach to development of enviroment-friendly oxidation catalyst materials, Mononuclear hydroperoxo copper(II) complexes*, Sc. And Tech of Advanced materials, 20. pp 1-14.
- [14] Udai P Singh, Vaibhave Aggarwal and Asish K. Sharma (2007), *Mononuclear cobalt (II) carboxylate complexes: Synthesis, molecular structure and selective oxygenation study*, Inorganica Chimica Acta, 360 (10), pp 3226-3332
- [15] Anirban J.S, Jubaraj B.B (2007), *Synthesis and Characterisation of dinuclear and mononuclear cobalt (II) benzoate complexes*, Polyhedron, 26(6), pp 1347-1355

- [16] Kassinos D, Varnava N, Micheal C, Piera P (2009), Homogenous oxidation of aqueous solution of atrazine and fenitrothion through dark and photo-Fenton reactions, *Chemosphere*, 74(6), pp 866-872.

**CH7101**      **Cấu trúc, liên kết hóa học và những đặc trưng hóa lý của các chất xúc tác phức đồng thể**  
Structure, chemical bond and physico-chemical characteristics of complex catalysts

**1. Tên học phần:** Cấu trúc, liên kết hóa học và những đặc trưng hóa lý của các chất xúc tác phức đồng thể

2. Mã học phần: CH7101

**3. Tên tiếng Anh:** Structure, chemical bond and physico-chemical characteristic of complex catalysts

**4. Khối lượng:** 2(2-0-0-4)

- Lý thuyết:

- Bài tập:

- Thí nghiệm:

**5. Đối tượng tham dự:** Tất cả NCS thuộc chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý

**6. Mục tiêu của học phần:** Học phần này nhằm mang lại cho NCS:

- Các kiến thức nâng cao, hiện đại của chuyên ngành Hóa lý thuyết và hóa lý về các chất xúc tác phức.

- Rèn luyện khả năng tư duy khoa học.

- Rèn luyện kỹ năng vận dụng những kiến thức đó vào nghiên cứu khoa học và giải quyết những vấn đề thực tiễn về xúc tác phức và các lĩnh vực có liên quan.

**7. Nội dung tóm tắt:**

- Xúc tác phức là mô hình hóa tâm hoạt động của xúc tác sinh học (enzym)

- Các lý thuyết hiện đại về sự tạo phức giữa ion kim loại chuyển tiếp với ligand có bản chất khác nhau

- Cấu trúc, liên kết hóa học, thành phần và các đặc trưng hóa lý của các chất xúc tác phức.

**8. Nhiệm vụ của NCS:**

- Dự lớp:

- Bài tập:

**9. Đánh giá kết quả:**

- Mức độ dự giờ giảng:

- Kiểm tra định kỳ:

- Thi kết thúc học phần:

**10. Nội dung chi tiết học phần:**

## **PHẦN MỞ ĐẦU**

Giới thiệu môn học

Giới thiệu đề cương môn học

Giới thiệu tài liệu tham khảo

## **CHƯƠNG 1: Môi quan hệ tương hỗ giữa xúc tác sinh học và xúc tác phức**

1.1 Xúc tác sinh học là mô hình xúc tác phức hoàn hảo

1.1.1 Đặc điểm cấu trúc tâm hoạt động của các chất xúc tác sinh học

1.1.2 Cơ chế vận chuyển electron của tâm hoạt động của xúc tác sinh học

1.1.3 Các tính chất ưu việt và hạn chế của các chất xúc tác sinh học

1.2 Xúc tác phức là mô hình hóa tâm hoạt động của xúc tác sinh học

1.2.1 Chế tạo (tổng hợp) các chất xúc tác phức trên cơ sở mô phỏng theo cấu trúc, thành phần, cơ chế vận chuyển electron của tâm hoạt động xúc tác sinh học.

1.2.2 Ưu nhược điểm của các chất xúc tác phức

1.2.3 Vấn đề dị thể hóa các chất xúc tác phức đồng thể

## **CHƯƠNG 2: Sự tạo phức giữa ion kim loại chuyển tiếp ( $M^{Z+}$ ) và ligand (L) trong dung dịch**

- 2.1 Đặc điểm cấu trúc electron và các đặc trưng hóa lý của  $M^{z+}$
- 2.2 Bản chất hóa học và sự phân loại ligand
- 2.3 Các lý thuyết hiện đại về sự tạo phức giữa  $M^{z+}$  và (L)
  - 2.3.1 Lý thuyết liên kết hóa trị (VB)
  - 2.3.2 Lý thuyết tổ hợp tuyến tính các orbital nguyên tử thành các orbital phân tử (MOLCAO)
  - 2.3.3 Lý thuyết trường ligand
- 2.4 Nhiệt động học sự tạo phức trong dung dịch
  - 2.4.1 Cấu trúc, thành phần, độ bền nhiệt động của các dạng phức được tạo thành
  - 2.4.2 Hàm tạo thành và tỉ phần nồng độ của mỗi dạng phức
- 2.5 Xác định dạng phức đóng vai trò xúc tác
  - 2.5.1 Hoạt tính, độ chọn lọc xúc tác
  - 2.5.2 Các tiêu chuẩn để một dạng phức trở thành chất xúc tác
  - 2.5.3 Mối quan hệ biến đổi tương đồng giữa tốc độ phản ứng xúc tác và tỉ phần nồng độ của dạng phức tương ứng.

### CHƯƠNG 3: Tác dụng của sự tạo phức xúc tác

- 3.1 Tăng độ bền thủy phân của  $M^{z+}$
- 3.2 Tăng hoạt tính và độ chọn lọc xúc tác
- 3.3 Thay đổi thế oxy hóa- khử của  $M^{z+}$
- 3.4 Thay đổi cơ chế của phản ứng
- 3.5 Xúc tác cho các phản ứng bị ngăn cản bởi quy tắc bảo toàn tính đối xứng orbital phân tử
- 3.6 Hoạt hóa các chất phản ứng

**11. Tài liệu học tập:** Nguyễn Văn Xuyên (2007), *Cấu tạo phân tử và liên kết hóa học*, Nhà xuất bản Khoa học và Kỹ thuật, Hà Nội.

### 12. Tài liệu tham khảo:

- [1] Nguyễn Văn Xuyên (1994), *Xúc tác đồng thể oxy hóa khử bằng phức chất một nhân và hai nhân một số ion kim loại chuyển tiếp*, Luận án tiến sĩ khoa học Hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [2] Trần Thị Minh Nguyệt (2002), *Nghiên cứu tính chất catalaza và peroxidaza của phức chất một số kim loại chuyển tiếp với etylendiamin*, Luận án tiến sĩ hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [3] Vũ Thị Kim Loan (2008), *Xúc tác đồng thể oxy hóa- khử bằng phức chất của ion kim loại chuyển tiếp*, Luận án Tiến sĩ hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [4] Nguyễn Văn Dũng (2010), *Nghiên cứu tính chất catalaza và peroxidaza của phức Co(II)-Axit citric*, Luận án Tiến sĩ hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [5] Nguyễn Văn Xuyên, Trần Thị Minh Nguyệt (2001), *Xúc tác phức*, Các báo cáo khoa học Hội nghị xúc tác hấp phụ Toàn quốc lần thứ 2, Hà Nội, tr 127-160.
- [6] G. Henrici-Olive', S. Olive' (1997), *Coordination and Catalysis*, Verlagchimie-Weinheim-New- York.
- [7] Cristopher Masters (1981), *Homogeneous Transition- Metal Catalysis*, London New York Chapman and Hall.
- [8] Piet W.N.M. VanleenWen, Keij Morokuma and Jooph. Van Lenthe (1995), *Theoretical Aspects of Homogeneous Catalysis*, Kluwer Academic Publishers.
- [9] Surit Bhaduri, Doble Mukesh (2000), *Homogenous Catalysis Mechanisms and Industrial Application*, A.John Wiley and Sons Publication, New York- Chichester-Weiheim- Brisbane-Singapore-Toronto
- [10] W. P. Kwar, B.M.Voeler (2003), Rates of hydroxyl radical generation and organic compound oxidation in mineral-catalyzed Fenton-like system, *Environ.Sci.Tech*, 37,pp 1150-1158
- [11] Maria Papadaki, Jun Gao (2005), *Kinetic models of complex reaction systems*, *Computers and Chemical Engineering*, 29 (11-12), pp 2449-2460



- [12] Syuhei Yamaguchi, Hideki Masuda (2004), Basic approach to development of environment-friendly oxidation catalyst materials, Mononuclear hydroperoxo copper(II) complexes, Sc. And Tech of Advanced materials, 20. pp 1-14.
- [13] Udai P Singh, Vaibhave Aggarwal and Asish K. Sharma (2007), *Mononuclear cobalt (II) carboxylate complexes: Synthesis, molecular structure and selective oxygenation study*, Inorganica Chimica Acta, 360 (10), pp 3226-3332
- [14] Anirban J.S, Jubaraj B.B (2007), Synthesis and Characterisation of dinuclear and mononuclear cobalt (II) benzoate complexes, Polyhedron, 26(6), pp 1347-1355
- [15] Kassinos D, Varnava N, Micheal C, Piera P (2009), Homogenous oxidation of aqueous solution of atrazine and fenitrothion through dark and photo-Fenton reactions, Chemosphere, 74(6), pp 866-872.

**CH7102**                    **Một số ứng dụng thực tiễn của xúc tác phức**  
Some practical applications of complex catalysis

**1. Tên học phần:** Một số ứng dụng thực tiễn của xúc tác phức

**2. Mã học phần:** CH7102

**3. Tên tiếng Anh:** Some practical applications of complex catalysis

**4. Khối lượng:** 2(2-0-0-4)

- Lý thuyết:

- Bài tập:

- Thí nghiệm:

**5. Đối tượng tham dự:** Tất cả NCS thuộc chuyên ngành Hóa lý thuyết và Hóa lý

**6. Mục tiêu của học phần:** Cung cấp cho NCS:

- Những kiến thức cơ bản, hiện đại về xúc tác phức

- Rèn luyện khả năng tư duy khoa học.

- Ứng dụng các kiến thức đó vào giải quyết những vấn đề thực tiễn cấp thiết có liên quan.

**7. Nội dung tóm tắt:**

- Loại phản ứng xúc tác phức cần chọn đáp ứng được yêu cầu của vấn đề thực tiễn cần được giải quyết

- Dạng phức đóng vai trò chất xúc tác tương ứng với các đặc trưng về cấu trúc, thành phần, độ bền nhiệt động, hoạt tính và độ chọn lọc.

- Các kiến thức về quy luật động học, cơ chế và điều kiện tối ưu của phản ứng.

**8. Nhiệm vụ của NCS:**

- Dự lớp:

- Bài tập:

**9. Đánh giá kết quả:**

- Mức độ dự giờ giảng:

- Kiểm tra định kỳ:

- Thi kết thúc học phần:

**10. Nội dung chi tiết học phần:**

#### **PHẦN MỞ ĐẦU**

Giới thiệu môn học

Giới thiệu đề cương môn học

Giới thiệu tài liệu tham khảo

#### **CHƯƠNG 1: Các phản ứng xúc tác phức trong xử lý các chất độc hại bảo vệ môi trường**

1.1 Tính ưu việt của phản ứng xúc tác phức

1.1.1 Tốc độ nhanh, độ chọn lọc cao ở nhiệt độ và áp suất bình thường

1.1.2 Năng suất cao, chất lượng sản phẩm tốt

1.1.3 Tiết kiệm nguyên vật liệu, năng lượng, không có chất thải

1.1.4 Dưới tác dụng của xúc tác phức,  $O_2(kk)$  và  $H_2O_2$  trở thành các tác nhân oxy hóa rất

mạnh tương ứng là  $O_2^{\cdot Ag}$  và gốc tự do  $\cdot OH$  thay thế cho các chất oxy hóa  $KMnO_4$ ,  $K_2Cr_2O_7$ ,  $NaClO$ ,  $Cl_2$ ... đắt tiền và độc hại.

1.2 Ứng dụng các phản ứng oxy hóa các chất độc bằng  $H_2O_2(O_2)$  dưới tác dụng của các xúc tác phức trong xử lý các loại nước thải (sản phẩm là các chất không độc hoặc  $CO_2$  và  $H_2O$ )

1.2.1 Xử lý nước thải công nghiệp dệt nhuộm, xúc tác là  $[CoL]^{2-}$  hoặc  $[Mn(En)_2]^{2+}$

1.2.2 Xử lý nước thải công nghiệp giấy, xúc tác là  $[FeHLHCO_3]$

1.2.3 Xử lý nước thải công nghiệp chế biến thủy sản, xúc tác là  $[MnDETA]^{2+}$

1.2.4 Xử lý chuyển hóa phenol, xúc tác là  $[CoL]^{2-}$

1.2.5 Xử lý rỉ rác thải qua hồ sinh học, xúc tác là  $[MnHLHCO_3]$

1.2.6 Xử lý chuyển hóa thuốc trừ sâu 4,4'-DDT, xúc tác là  $[FeDETA]^{2+}$

#### **CHƯƠNG 2: Các phản ứng xúc tác phức trong đổi mới các quá trình công nghệ.**

2.1 Quá trình oxy hóa hơi etanol thành axetandehit ở 370-500°C đã được thay bằng sự tổng hợp axetandehit từ etylen và O<sub>2</sub> trong dung dịch nước được xúc tác bằng phức paladi-đồng ở 20-60°C và 1 atm (quá trình Waker)

2.2 Trên cơ sở cơ chế mạch gốc và các thông số động học cơ bản ảnh hưởng đến sự phân bố trọng lượng phân tử các polime mà người ta đã thiết lập được một sơ đồ cơ chế mới cho quá trình tổng hợp polistirôn với năng suất và chất lượng cao

2.3 Cacbonyl hóa metanol được xúc tác bằng phức chất Rôđi, dime hóa, oligome hóa, polime hóa anken với sự tham gia của phức chất xúc tác đồng thể Zeigler.

2.4 Đã thay thế chất oxy hóa NaClO bằng H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> để oxy hóa sorboza dưới tác dụng của xúc tác phức kim loại. Kết quả đã bỏ qua được giai đoạn axeton hóa sorboza. Quá trình công nghệ được tiến hành trong điều kiện thuần khiết, không có cặn bã và khí thải gây ô nhiễm môi trường, đạt hiệu quả kinh tế cao.

2.5 Tẩy màu trong công nghiệp dệt, giấy và một số ngành công nghiệp khác bằng cách nghiên cứu tạo ra các hệ xúc tác phức- nguồn phát sinh ra các tác nhân oxy hóa rất mạnh  $\cdot\text{OH}$ , O<sub>2</sub><sup>1Ag</sup> dùng để tẩy màu, tẩy trắng tơ, lụa, bông, vải sợi, giấy... với tốc độ nhanh ở nhiệt độ thường, tiết kiệm năng lượng, hóa chất.

2.6 Chuyển hóa parafin của dầu mỏ, khí CO và than đá thay thế cho các quá trình hiện hành có độ chọn lọc thấp.

2.7 Khử CO<sub>2</sub> tự do và ràng buộc (ở dạng CaCO<sub>3</sub>) chiếm 99,9% cacbon tự nhiên ở nhiệt độ thấp có ý nghĩa tiềm năng lớn- nguồn nguyên liệu mới cho các hợp chất hữu cơ, khí mà dầu mỏ, than đá và khí tự nhiên đang dần cạn kiệt.

2.8 Chuyển hóa năng lượng mặt trời thành năng lượng dùng trong công nghiệp được dự trữ dưới dạng hóa năng của các sản phẩm phản ứng quang hợp nhân tạo (H<sub>2</sub> và O<sub>2</sub> hoặc các hợp chất hữu cơ và O<sub>2</sub>), được xúc tác bằng phức đa nhân, tương tự như tâm hoạt động của các chất xúc tác sinh học trong quá trình quang hợp thực vật tự nhiên.

### **CHƯƠNG 3: Các phản ứng xúc tác phức trong phân tích siêu vi lượng và một số ứng dụng khác**

#### 3.1 Phân tích siêu vi lượng bằng phương pháp động học – xúc tác phức

3.1.1 Cơ sở khoa học của phương pháp: Dựa trên mối quan hệ phụ thuộc tuyến tính tốc độ phản ứng oxy hóa cơ chất hữu cơ có màu S – chất chỉ thị bằng H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> vào nồng độ ion kim loại chuyển tiếp M<sup>Z+</sup> cần được phân tích ở dạng phức đóng vai trò chất xúc tác có hoạt tính và độ chọn lọc rất cao ở nhiệt độ và áp suất thường. Độ nhạy của phương pháp ~ppb.

3.1.2 Các đối tượng cần phân tích – các chất liệu siêu sạch cần được sử dụng trong các lĩnh vực công nghệ và kỹ thuật cao: Các loại thuốc thử, các chất bán dẫn, vật liệu từ, vật liệu phát quang, phân tích các mẫu thực vật, xác định độ ô nhiễm môi trường, ... mà không bị ảnh hưởng bởi các yếu tố khác

3.1.3 Xác định vi lượng Co<sup>2+</sup> trong đất và trong thực vật, xúc tác là [CoL]<sup>2-</sup>

3.1.4 Xác định hàm lượng vết Mn<sup>2+</sup> trong bùn đất, xúc tác là [MnDETA]<sup>2+</sup>

3.1.5 Phân tích vết và siêu vết Mn<sup>2+</sup> trong nước ngầm và bột ngọc trai, xúc tác là [MnEn<sub>2</sub>]<sup>2+</sup>

3.1.6 Xác định hàm lượng vết Cu<sup>2+</sup> trong nước sông, hồ, nước ngầm, xúc tác là [CuGlu]

3.1.7 Dự báo về khả năng tự làm sạch nước tự nhiên và ô nhiễm môi trường

3.2 Ứng dụng các hệ xúc tác phức trong nông nghiệp và công nghiệp thực phẩm

3.2.1 Chế tạo các loại phân vi lượng bón lá và bón gốc có hoạt tính xúc tác cao làm tăng trưởng và tăng năng suất các loại cây trồng: lúa, ngô, chè, các loại cây ăn quả, ...

3.2.2 Sử dụng hệ xúc tác phức Cu[Glu] với H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> để cắt mạch Alginate (một loại polysaccharide trong rong mơ) thành các oligoalginate có tác dụng kích thích sự nảy mầm hạt thóc và tăng trưởng cây lúa.

3.2.3 Ngược lại đối với những phản ứng oxy hóa xúc tác có hại luôn tồn tại và diễn ra trong các loại nông sản, thực phẩm, các loại quả tươi, các loại rượu vang, chè thành phẩm, ... gây biến chất, ôi thiu, độc hại, cần phải nghiên cứu tạo ra các chất chống oxy hóa xúc tác với lượng rất

nhỏ, không độc hại, quy trình xử lý đơn giản, đạt hiệu quả kinh tế cao trong việc bảo quản chất lượng các loại sản phẩm khó bảo quản nói trên.

#### **11. Tài liệu học tập:**

#### **12. Tài liệu tham khảo:**

- [1] Nguyễn Văn Xuyên (1994), *Xúc tác đồng thể oxy hóa khử bằng phức chất một nhân và hai nhân một số ion kim loại chuyển tiếp*, Luận án tiến sĩ khoa học Hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [2] Trần Thị Minh Nguyệt (2002), *Nghiên cứu tính chất catalaza và peroxidaza của phức chất một số kim loại chuyển tiếp với etylendiamin*, Luận án tiến sĩ hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [3] Vũ Thị Kim Loan (2008), *Xúc tác đồng thể oxy hóa- khử bằng phức chất của ion kim loại chuyển tiếp*, Luận án Tiến sĩ hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [4] Nguyễn Văn Dưỡng (2010), *Nghiên cứu tính chất catalaza và peroxidaza của phức Co(II)-Axit citric*, Luận án Tiến sĩ hóa học, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội, Hà Nội.
- [5] Nguyễn Văn Xuyên, Trần Thị Minh Nguyệt (2001), *Xúc tác phức*, Các báo cáo khoa học Hội nghị xúc tác hấp phụ Toàn quốc lần thứ 2, Hà Nội, tr 127-160.
- [6] G. Henrici-Olive', S. Olive' (1997), *Coordination and Catalysis*, Verlagchimie-Weinheim-New- York.
- [7] Cristopher Masters (1981), *Homogeneous Transition- Metal Catalysis*, London New York Chapman and Hall.
- [8] Piet W.N.M. VanleenWen, Keij Morokuma and Jooph. Van Lenthe (1995), *Theoretical Aspects of Homogeneous Catalysis*, Kluwer Academic Publishers.
- [9] Surit Bhaduri, Doble Mukesh (2000), *Homogenous Catalysis Mechanisms and Industrial Application*, A.John Wiley and Sons Publication, New York- Chichester-Weiheim- Brisbane-Singapore-Toronto
- [10] W. P. Kwar, B.M.Voeler (2003), Rates of hydroxyl radical generation and organic compound oxidation in mineral-catalyzed Fenton-like system, *Environ.Sci.Tech*, 37,pp 1150-1158
- [11] Maria Papadaki, Jun Gao (2005), *Kinetic models of complex reaction systems*, *Computers and Chemical Engineering*, 29 (11-12), pp 2449-2460
- [12] Syuhei Yamaguchi, Hideki Masuda (2004), Basic approach to development of enviroment-friendly oxidation catalyst materials, Mononuclear hydroperoxo copper(II) complexes, *Sc. And Tech of Advanced materials*, 20. pp 1-14.
- [13] Udai P Singh, Vaibhave Aggarwal and Asish K. Sharma (2007), *Mononuclear cobalt (II) carboxyllate complexes: Synthesis, molecular structure and selective oxygenation study*, *Inorganica Chimica Acta*, 360 (10), pp 3226-3332
- [14] Anirban J.S, Jubaraj B.B (2007), Synthesis and Characterisation of dinuclear and mononuclear cobalt (II) benzoate complexes, *Polyhedron*, 26(6), pp 1347-1355
- [15] Kassinos D, Varnava N, Micheal C, Piera P (2009), Homogenous oxidation of aqueous solution of atrazine and fenitrothion through dark and photo-Fenton reactions, *Chemosphere*, 74(6), pp 866-872.
- [16] Xuchyov A.Ya, Travin C.O, Duka G.G, Xkurlatov Yu.L (1983), *Katalitichexkie reaktzii okhrana okrujausei xređiv. " Stiintxa"*, Kisinev.
- [17] Chen Weng Xing (2007), *Photocatalytic oxidation of phenol in aqueous solution*, *J.Science in China Series B, Chemistry*, 50(3), June.

**CH7103**                      **Quang hóa học**  
Photochemistry

- 1. Tên học phần:** Quang hóa học  
**2. Mã học phần:** CH7103  
**3. Tên tiếng Anh:** Photochemistry  
**4. Khối lượng:** 2(2-0-0-4)

- Lý thuyết:
- Bài tập:
- Thí nghiệm:

**5. Đối tượng tham dự:** Tất cả NCS thuộc chuyên ngành Hóa lý thuyết – Hóa lý

**6. Mục tiêu của học phần:** Học phần này nhằm mang lại cho NCS:

- Các kiến thức nâng cao kiến thức về Quang hóa học
- Rèn luyện khả năng tư duy độc lập của NCS chuyên ngành Hóa lý thuyết – Hóa lý, chuyên sâu Quang hóa

Quang hóa

- Cung cấp cho sinh viên những thông tin khoa học mới nhất trong lĩnh vực Quang hóa.

**7. Nội dung tóm tắt:** Học phần cung cấp cho sinh viên kiến thức cơ bản về phản ứng quang hóa, các giai đoạn của phản ứng quang hóa như kết quả một quá trình kích thích phân tử. Ngoài ra, học phần bổ sung các kiến thức về những chất mang đặc tính quang hóa trên ví dụ ôzôn, ứng dụng của quang hóa trong các phương pháp phân tích Hóa lý hiện đại trên ví dụ Laser, Phổ quang electron, Phổ Raman,

**8. Nhiệm vụ của NCS:**

- Dự lớp:

**9. Đánh giá kết quả:** (cách cho điểm giống như quy định đối với Cao học)

- Mức độ dự giờ giảng:
- Kiểm tra định kỳ:
- Thi kết thúc học phần:

**10. Nội dung chi tiết học phần:**

## **PHẦN MỞ ĐẦU**

Giới thiệu môn học

Giới thiệu đề cương môn học

Giới thiệu tài liệu tham khảo

## **CHƯƠNG 1: Giới thiệu chung**

- 1.1 Mở đầu: Các khái niệm cơ bản
- 1.2 Các giai đoạn của phản ứng hóa quang
- 1.3 Động học các phản ứng hóa quang

## **CHƯƠNG 2: Kích thích phân tử và biến đổi của phân tử sau khi bị kích thích**

- 2.1 Hấp thụ và phát xạ năng lượng điện từ
- 2.2 Hệ số Einstein và khả năng hấp thụ
- 2.3 Nguyên lý Frank-Condon
- 2.3 Huỳnh quang và Lân quang
- 2.4 Dịch chuyển electron giữa các mức năng lượng cùng trạng thái, dịch chuyển cấm (singlet-triplet)
- 2.5 Sơ đồ Jablonski
- 2.6 Phân ly và tiền phân ly

## **CHƯƠNG 3: Laser**

- 3.1 Phương trình Laser cơ bản
- 3.2 Mô tả thiết bị laser
- 3.4 Đặc điểm của ánh sáng laser
- 3.5 Phân loại laser

- 3.6 Ứng dụng của laser
  - 3.6.1 Phổ laser (laser Spectroscopy)
  - 3.6.2 Laser tạo Huỳnh quang (LIF)
  - 3.6.3 Laser định vị, đo và điều chỉnh (LIDAR)

**CHƯƠNG 4: Phổ quang electron (PES)**

- 4.1 Nguyên lý phương pháp
- 4.2 Phổ quang electron trong vùng cực tím
- 4.3 Phổ quang electron vùng tia X

**CHƯƠNG 5: Phổ Raman**

- 5.1 Nguyên lý phương pháp
- 5.2 Quy tắc chọn lựa Raman
- 5.3 Quang phân và tiền quang phân
- 5.4 Ví dụ phổ Raman

**CHƯƠNG 6: Hóa quang học Ôzôn**

- 6.1 Sơ đồ phản ứng hóa quang Ôzôn
- 6.2 Đặc điểm phản ứng hóa quang Ôzôn
- 6.3 Vấn đề thiếu hụt ôzôn và bầu khí quyển

**11. Tài liệu học tập:**

**12. Tài liệu tham khảo:**

- [1 ] Atkins, P.W. and de Paula, J. (2006) *Physical Chemistry. 7th. Edn.* Oxford Press
- [2 ] Pilling, M.J. and Seakins, P.W. (1994) *Ozone deficit.* V 265, pp.1831-8
- [3 ] Andrews, D.L. (2004) *Lasers in Chemistry.* Oxford Press

**CH7104**      **Các phương pháp cộng hưởng từ**  
Magnetic resonance

1. **Tên học phần:** Các phương pháp cộng hưởng từ
2. Mã học phần: CH7104
3. **Tên tiếng Anh:** Magnetic resonance
4. **Khối lượng:** 2(2-0-0-4)
  - Lý thuyết:
  - Bài tập:
  - Thí nghiệm:
5. **Đối tượng tham dự:** Tất cả NCS thuộc chuyên ngành Hóa lý thuyết – Hóa lý
6. **Mục tiêu của học phần:** Học phần này nhằm mang lại cho NCS:
  - Các kiến thức về cộng hưởng từ, một mảng lý thuyết hiện được sử dụng rộng rãi trong nghiên cứu cấu tạo chất
  - Rèn luyện khả năng tư duy độc lập của NCS chuyên ngành Hóa lý thuyết – Hóa lý, chuyên sâu về nghiên cứu cấu tạo chất và động học các quá trình hóa
  - Hướng dẫn sinh viên phương pháp nghiên cứu và thực nghiệm bằng các phương pháp cộng hưởng từ (nếu có thiết bị)
7. **Nội dung tóm tắt:** Học phần cung cấp cho sinh viên kiến thức lý thuyết cơ bản về hiện tượng cộng hưởng từ, nguyên lý các phương pháp cộng hưởng từ cũng như ứng dụng của chúng trong nghiên cứu hiện đại.
8. **Nhiệm vụ của NCS:**
  - Dự lớp:
9. **Đánh giá kết quả:** (cách cho điểm giống như quy định đối với Cao học)
  - Mức độ dự giờ giảng:
  - Kiểm tra định kỳ:
  - Thi kết thúc học phần:
10. **Nội dung chi tiết học phần:**

**PHẦN MỞ ĐẦU**

- Gới thiệu môn học
- Gới thiệu đề cương môn học
- Gới thiệu tài liệu tham khảo

**CHƯƠNG 1: Tính chất từ và spin**

- 1.1 Mômen từ và số lượng tử từ.
- 1.2 Tương tác với từ trường ngoài, khái niệm tỷ số hồi chuyển, hệ số Bohn magneton
- 1.3 Thí nghiệm Stern-Gelash và khái niệm spin electron.
- 1.4 Mômen spin và số lượng tử spin
- 1.5 Sự lượng tử hóa không gian

**CHƯƠNG 2: Cộng hưởng từ hạt nhân**

- 2.1 Mômen từ hạt nhân
- 2.2 Năng lượng hạt nhân trong từ trường
- 2.3 Dịch chuyển hóa học
- 2.3 Cấu trúc tinh
- 2.4 Véc tơ từ hóa
- 2.5 Chiều rộng của pick phổ và tốc độ phản ứng
- 2.6 Hiệu ứng hạt nhân Overhauser
- 2.7 Cộng hưởng từ hạt nhân hai chiều.
- 2.8 Cộng hưởng từ hạt nhân dạng rắn

**CHƯƠNG 3: Cộng hưởng từ electron**

- 3.1 Giá trị g

### 3.2 Cấu trúc Hyperfine

#### **11. Tài liệu học tập:**

#### **12. Tài liệu tham khảo:**

- [1] Atkins, P.W. and de Paula, J. (2006) *Physical Chemistry. 7th. Edn.* Oxford Press
- [2] Atkins (2004) *Physical Chemistry. 6th. Edn.* Oxford Press
- [3] Joseph P. Hornak (2007) *The basics of NMR.*
- [4] Web <http://www.cis.rit.edu/htbooks/nmr/>