

CHƯƠNG TRÌNH ĐÀO TẠO TIẾN SĨ  
NGÀNH „HÓA HỌC“

**Tên chương trình:** Chương trình đào tạo „Hóa lý thuyết và Hóa lý“  
**Trình độ đào tạo:** Tiến sĩ  
**Ngành đào tạo:** Hóa học - CHEMISTRY  
**Mã chuyên ngành:** 9440112

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

## 1 Mục tiêu đào tạo

### 1.1 Mục tiêu chung

Đào tạo Tiến sĩ *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 tạp 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, polyme 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 thụ 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

hường 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	TÍN CHỈ
1	CH7150	Xúc tác phức	GS. TSKH Nguyễn Văn Xuyên	2
2	CH7151	Xúc tác phức trong bảo vệ môi trường	GS. TSKH Nguyễn Văn Xuyên	2
3	CH7152	Phương pháp động học xúc tác trong phân tích vi lượng	GS. TSKH Nguyễn Văn Xuyên	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 / hợp
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		