

**Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam
Viện Vật lý**

BÁO CÁO TỔNG KẾT CÔNG TÁC NĂM 2013

Trung tâm Vật lý tính toán

Hà Nội, 12/2013

1. Giới thiệu

- Địa điểm: 10 Đào Tấn, Ba Đình, Hà Nội
- Điện thoại, Fax: +84 4 37662107 (Thư ký: Dương Thị Mân)
- Trang tin điện tử: <http://www.iop.vast.ac.vn/ccp/>
- Quá trình hình thành và phát triển:

Trung tâm Vật lý tính toán được thành lập vào tháng 10/2009 trên cơ sở Phòng Mô hình hóa và Vật lý tính toán của Viện Vật lý, là một trong những đơn vị trẻ nhất của Viện Vật lý. Khi mới thành lập Trung tâm có 5 cán bộ biên chế (2 GS, 1 PGS, 2 TS). Hiện nay, Trung tâm có 8 biên chế (1 GS, 1 PGS, 5 TS, 1 ThS). Các TS tại Trung tâm đều bảo vệ tiến sỹ ở nước ngoài và một số đã có thời gian nghiên cứu sau tiến sỹ (postdoc) tại các nước Âu – Mỹ. Trong 4 năm kể từ khi thành lập, Trung tâm đã giới thiệu được 14 cán bộ trẻ đi làm nghiên cứu sinh tiến sỹ tại nước ngoài. Về cơ sở vật chất, hiện nay Trung tâm Vật lý tính toán có hệ thống cụm máy tính với 5 nút tính toán (30 cores) với năng lực tính toán 192 GFlops.

- Chức năng, nhiệm vụ:

Nhiệm vụ chính của Trung tâm là tiến hành các nghiên cứu cơ bản, các nghiên cứu cơ bản định hướng ứng dụng, và đào tạo nhân lực khoa học trình độ cao trong lĩnh vực vật lý tính toán. Các hướng nghiên cứu chính của Trung tâm hiện nay bao gồm:

- Nghiên cứu tính chất điện tử của vật liệu, các hệ thấp chiều, thiết kế linh kiện điện tử nano
- Nghiên cứu các hệ sinh học phân tử, cảm biến sinh học và các hệ bio-nano
- Nghiên cứu về vật lý thống kê và vật lý kinh tế
- Phát triển các phương pháp tính toán khoa học và mô phỏng máy tính.

2. Tổ chức

Ban lãnh đạo:

- Giám đốc: Trịnh Xuân Hoàng
- Phó giám đốc: Đỗ Thị Nga

Biến động về tổ chức năm 2013:

- TS. Đỗ Thị Nga được bổ nhiệm Phó giám đốc Trung tâm từ 1/12/2013.

3. Nhân sự

a) Cán bộ biên chế:

- | | |
|--------------------------|---------|
| 1. Nguyễn Như Đạt | PGS TS |
| 2. Trịnh Xuân Hoàng | TS |
| 3. Nguyễn Việt Hưng | TS |
| 4. Đỗ Thị Nga | TS |
| 5. Nguyễn Thị Thùy Nhung | ThS |
| 6. Tô Thị Thảo | TS |
| 7. Nguyễn Ái Việt | GS TSKH |
| 8. Nguyễn Huy Việt | TS |

b) Cán bộ hợp đồng trong nước:

- | | |
|-------------------|-----|
| 1. Bùi Thị Hạnh | ThS |
| 2. Bùi Thanh Liêm | ThS |
| 3. Dương Ngọc Mai | CN |

4. Tô Duy Quang CN

c) Cán bộ hợp đồng công tác tại nước ngoài:

1. Phạm Tuấn Anh NCS tại ĐH California, Davis
2. Phan Đức Anh NCS tại ĐH South Florida, Tampa
3. Vũ Thúy Hương NCS tại ĐH Maryland, College Park
4. Nguyễn Thị Thảo NCS tại ĐH Quốc gia Pusan
5. Trần Thanh Thúy NCS tại ĐH Cachan, Paris
6. Vũ Thị Hải Yến NCS tại ĐH Polytechnique, Paris

d) Cộng tác viên:

1. Nguyễn Văn Liên GS TSKH
2. Nguyễn Thế Toàn TS, ĐH KHTN Hà Nội

e) Nghiên cứu sinh:

1. Chu Thùy Anh Người hướng dẫn: Nguyễn Ái Việt
2. Lê Thanh Hải Người hướng dẫn: Nguyễn Như Đạt
3. Nguyễn Bá Hưng Người hướng dẫn: Trịnh Xuân Hoàng
4. Bùi Thị Lệ Quyên Người hướng dẫn: Nguyễn Ái Việt
5. Bùi Phương Thúy Người hướng dẫn: Trịnh Xuân Hoàng

Biến động nhân sự trong năm 2013:

- Bùi Thanh Liêm ký hợp đồng chính thức từ 1/4/2013
- Dương Ngọc Mai ký hợp đồng chính thức từ 1/9/2013
- Nguyễn Mai Chung chấm dứt hợp đồng từ 1/10/2013, đi làm NCS tại ĐH Paris Sud
- Tô Duy Quang ký hợp đồng thử việc từ 1/10/2013
- Bùi Thị Hạnh bảo vệ luận văn Thạc sỹ 11/2013.

Công tác nước ngoài:

- Nguyễn Việt Hưng: tiếp tục công tác dài hạn (postdoc) tại Institute for Nanoscience and Cryogenics (Grenoble) trong năm 2013
- Trịnh Xuân Hoàng: ĐH Padova (17/3/2013 - 6/4/2013), ĐH Cergy-Pontoise (2/11/2013-31/12/2013)
- Trần Thanh Thúy đi làm NCS tại ĐH Cachan (Pháp) từ 10/2013.

Khách tới thăm và làm việc ngắn hạn tại Trung tâm:

- Nguyễn Thanh Sơn (ĐH Kent State): 1/9/2013 – 30/10/2013
- Guy Trambly de Laissardière (ĐH Cergy-Pontoise): 19-21/11/2013

4. Các đề tài nghiên cứu

Các đề tài do cán bộ Trung tâm chủ nhiệm:

- 3 đề tài NCCB thuộc Quỹ Nafosted:

1. “Mô hình hóa các phân tử sinh học và các hệ sinh học phức hợp”, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 1/2011 – 6/2013
2. “Các mô hình lý thuyết và một số ứng dụng của các hệ nano, lượng tử, vật lý y sinh học và vật lý kinh tế”, Chủ nhiệm: Nguyễn Ái Việt, Thời gian thực hiện: 6/2012 – 6/2014
3. “Nghiên cứu cấu trúc điện tử và các tính chất liên quan của một số vật liệu tiên tiến bằng phương pháp mô phỏng”, Chủ nhiệm: Nguyễn Huy Việt, Thời gian thực hiện: 6/2013 – 6/2015.

- 2 đề tài cơ sở cho cán bộ trẻ:

1. “Bẫy quang học nguyên tử lạnh trung hòa dùng vật liệu nano”, Chủ nhiệm: Đỗ Thị Nga, Thời gian thực hiện: 2013
2. “Nghiên cứu đặc trưng dẫn điện trong cấu trúc graphene nanoribbon”, Chủ nhiệm: Nguyễn Thị Thùy Nhung, Thời gian thực hiện: 2013.

5. Công bố khoa học

Trong năm 2013, tổng số bài báo khoa học của Trung tâm là 27 bài (chỉ tính các bài báo có ghi địa chỉ Viện Vật lý), bao gồm:

- Trên tạp chí SCI: 13 bài (1 bài có chỉ số IF > 5)
- Trên tạp chí SCIE: 1 bài
- Trên tạp chí không thuộc SCI: 3 bài
- Tuyển tập hội nghị: 7 bài.

Số bài báo trên tổng số biên chế và hợp đồng: $24/18 = 1,33$ bài/người.

Số bài báo SCI/SCIE trên tổng số biên chế và hợp đồng: $14/18 = 0,77$ bài/người.

Số bài báo SCI/SCIE trên số biên chế: $12/8 = 1,50$ bài/người (chỉ tính bài của các cán bộ biên chế).

Thống kê số bài báo theo tên tác giả (xếp theo thứ tự abc):

TT	Họ và tên	Tạp chí SCI	Tạp chí SCIE	Tạp chí không thuộc SCI	Tuyển tập hội nghị	Tổng số
1	Phan Đức Anh	5			2	7
2	Nguyễn Mai Chung	1				1
3	Trịnh Xuân Hoàng	2			1	3
4	Nguyễn Việt Hưng	4	1			5
5	Đỗ Thị Nga	1		1	2	4
6	Nguyễn Thị Thùy Nhung	1			1	2
7	Tô Duy Quang	1				1
8	Tô Thị Thảo				1	1
9	Nguyễn Ái Việt	2		3	6	11
10	Nguyễn Huy Việt	3				3

So sánh với các năm trước (theo chu kỳ từ tháng 11 năm trước tới tháng 11 năm sau):

Năm	2013	2012	2011	2010
Tạp chí SCI	13	14	11	3
Tạp chí SCIE	1	1	1	0
Tạp chí không thuộc SCI	3	1	0	1
Tuyển tập hội nghị	7	2	1	0
Tổng số:	24	18	13	4

Các bài báo của cán bộ Trung tâm không ghi địa chỉ Viện Vật lý (không được thống kê ở trên):

- Đỗ Thị Nga: 2 bài

- Nguyễn Việt Hưng: 7 bài
- Phạm Tuấn Anh: 2 bài

Danh sách các bài báo: xem Phụ lục 1 và 2.

6. Đào tạo:

a. Giảng dạy cho cao học Viện Vật lý

- Nguyễn Như Đạt: Cơ học lượng tử
- Trịnh Xuân Hoàng: Vật lý thống kê, Vật lý sinh học phân tử
- Nguyễn Huy Việt: Điện động lực học

b. Hướng dẫn tốt nghiệp:

Không có sinh viên bảo vệ trong năm 2013.

7. Các hoạt động khác:

- Trung tâm Vật lý tính toán cùng với Trung tâm Vật lý lý thuyết tổ chức Hội nghị Vật lý lý lý thuyết lần thứ 38 (NCTP-38), và Hội thảo quốc tế lần thứ nhất về Vật lý lý thuyết và Vật lý tính toán (IWTCP-1), tại Đà Nẵng, 29/7/2013 – 1/8/2013. Các cán bộ của Trung tâm VLTT tham gia và trình bày 12 báo cáo tại Hội nghị và Hội thảo.

- Tổ chức 12 buổi seminar về vật lý lý thuyết và vật lý tính toán tại Viện Vật lý. Phụ trách seminar: Đỗ Thị Nga.

- Tham gia ngày Vật lý lý thuyết (1/4/2013).

Phụ lục 1
Công bố khoa học năm 2013 của Trung tâm Vật lý tính toán

Trên tạp chí SCI

1. Anh D. Phan, Sheng Shen, and Lilia M. Woods, Radiative Exchange between Graphitic Nanostructures: A Microscopic Perspective, *Journal of Physical Chemistry Letters* 4, 4196 (2013); DOI: [10.1021/jz402337f](https://doi.org/10.1021/jz402337f) (IF=6.585)
2. Anh D. Phan, Trinh X. Hoang, The-Long Phan, and Lilia M. Woods, Repulsive interactions of a lipid membrane with graphene in composite materials, *Journal of Chemical Physics* 139, 184703 (2013); DOI: [10.1063/1.4828939](https://doi.org/10.1063/1.4828939)
3. Salim Berrada, Viet Hung Nguyen, Damien Querlioz, Jérôme Saint-Martin, Alfonso Alarcon, Christophe Chassat, Arnaud Bournel, and Philippe Dollfus, Graphene nanomesh transistor with high on/off ratio and good saturation behavior, *Applied Physics Letters* 103, 183509 (2013); DOI: [10.1063/1.4828496](https://doi.org/10.1063/1.4828496)
4. Anh D. Phan, Trinh X. Hoang, Thi H. L. Nghiem, and Lilia M. Woods, Surface plasmon resonances of protein-conjugated gold nanoparticles on graphitic substrates, *Applied Physics Letters* 103, 163702 (2013); DOI: [10.1063/1.4826514](https://doi.org/10.1063/1.4826514)
5. Anh D. Phan, Lilia M. Woods, and The-Long Phan, Van der Waals interactions between graphitic nanowiggles, *Journal of Applied Physics* 114, 044308 (2013); DOI: [10.1063/1.4816446](https://doi.org/10.1063/1.4816446)
6. V. Hung Nguyen, Y. M. Niquet, and P. Dollfus, Aharonov-Bohm effect and giant magnetoresistance in graphene nanoribbon rings, *PHYSICAL REVIEW B* 88, 035408 (2013)
7. T. Anh Pham, Tianshu Li, Huy-Viet Nguyen, Sadasivan Shankar, Francois Gygi, and Giulia Galli, Band offsets and dielectric properties of the amorphous Si₃N₄/Si(100) interface: A first-principles study, *APPLIED PHYSICS LETTERS* 102, 241603 (2013); DOI: [10.1063/1.4811481](https://doi.org/10.1063/1.4811481)
8. T. Anh Pham, Huy-Viet Nguyen, Dario Rocca, and Giulia Galli, GW calculations using the spectral decomposition of the dielectric matrix: Verification, validation, and comparison of methods, *Phys. Rev. B* 87, 155148 (2013); DOI: [10.1103/PhysRevB.87.155148](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.155148)
9. Alfonso Alarcón, Viet-Hung Nguyen, Salim Berrada, Damien Querlioz, Jérôme Saint-Martin, Arnaud Bournel, and Philippe Dollfus, Pseudosaturation and Negative Differential Conductance in Graphene Field-Effect Transistors, *IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES* 60 (3), 985 (2013); DOI: [10.1109/TED.2013.2241766](https://doi.org/10.1109/TED.2013.2241766)
10. K Béroff, M Chabot, G Martinet, T Pino, S Bouneau, A Le Padellec, G Féraud, N Do Thi, F Calvo, C Bordas and F Lépine, Anion production in high-velocity cluster-atom collisions; the electron capture process revisited, *JOURNAL OF PHYSICS B: ATOMIC, MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS* 46 (1), 015201 (2013); DOI: [10.1088/0953-4075/46/1/015201](https://doi.org/10.1088/0953-4075/46/1/015201)
11. V. Hung Nguyen, M. Chung Nguyen, Huy-Viet Nguyen, and P. Dollfus, Disorder effects on electronic bandgap and transport in graphene-nanomesh-based structures, *JOURNAL OF APPLIED PHYSICS* 113, 013702 (2013)
12. Anh D. Phan, Lilia M. Woods, N. A. Viet, Temperature phase transition model for the DNA-CNTs-based nanotweezers, *J Math Chem* 51, 278–288 (2013); DOI: [10.1007/s10910-012-0082-y](https://doi.org/10.1007/s10910-012-0082-y)

13. Nhung T T Nguyen, D Quang To and V Lien Nguyen, A model for ballistic transport across locally gated graphene bipolar junctions, *J. Phys.: Condens. Matter* 26, 015301 (2014); DOI: [10.1088/0953-8984/26/1/015301](https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/1/015301)

Trên tạp chí SCIE

1. Viet Hung Nguyen, Jérôme Saint-Martin, Damien Querlioz, Fulvio Mazzamuto, Arnaud Bournel, Yann-Michel Niquet, and Philippe Dollfus, Bandgap nanoengineering of graphene tunnel diodes and tunnel transistors to control the negative differential resistance, *J Comput Electron* 12, 85 (2013); DOI: [10.1007/s10825-013-0434-2](https://doi.org/10.1007/s10825-013-0434-2)

Trên tạp chí không thuộc SCI

1. Đào T. Thúy Nga, N. T. Phương Lan, Đỗ T. Nga, N. A. Việt, Bẫy quang học nguyên tử lạnh trung hòa dùng dây nano oxit kẽm, *Tạp chí Khoa học, ĐHSP2* 24, 316 (2013), ISSN: 1859-2325
2. Ngo Van Thanh, Nguyen Phuoc The, Lee Sang-Hee and Nguyen Ai Viet, Study on the Phase Transition Behavior of Fishes Schooling System, *Communications in Physics* 23, 121 (2013)
3. Chu Thuy Anh, Do Hong Lien and Nguyen Ai Viet, Simple Model for Market Returns Distribution, *Communications in Physics* 23, 185 (2013)

Trên tuyển tập hội nghị

1. T. X. Hoang, N. T. T. Nhung, J. R. Banavar, and A. Maritan, Symmetry and Folded Structures of Biomolecules, *IFMBE Proceedings of 4th International Conference on Biomedical Engineering in Vietnam (Springer)* 40, 372-375 (2013); DOI: [10.1007/978-3-642-32183-2_90](https://doi.org/10.1007/978-3-642-32183-2_90)
2. Do Thi Nga, Nguyen Thi Phuong Lan, Chu Thuy Anh and Nguyen Ai Viet, Optical trapping of neutral cold atoms using a nanotube, *Advances in Optics, Photonics, Spectroscopy & Applications VII*, 821-825 (2013), ISSN: 1859-4271
3. Nguyen Ai Viet, A. D. Phan, New optical bio-sensor from DNA and nano structures, *IEEE Proceedings of Photonics Global Conference (PGC), 2012*, (2012); DOI: [10.1109/PGC.2012.6457917](https://doi.org/10.1109/PGC.2012.6457917)
4. Hoa, V.T., Thao, T.T., Thanh, N.V., Lan, N.T., Viet, N.A., Exciton type 2 in graphene bilayer, *IEEE Proceedings of Photonics Global Conference (PGC), 2012*, 1-3 (2012); DOI: [10.1109/PGC.2012.6458080](https://doi.org/10.1109/PGC.2012.6458080)
5. Vo Thi Hoa ; Chu Thuy Anh ; Nguyen Tri Lan ; Nguyen Ai Viet, Magnetobiexciton in three layers graphene and its effects on graphene optical properties, *IEEE Proceedings of Photonics Global Conference (PGC), 2012*, 1-3 (2012); DOI: [10.1109/PGC.2012.6458006](https://doi.org/10.1109/PGC.2012.6458006)
6. Anh D. Phan, Dustin A. Tracy, and N. A. Viet, A model of optical biosensor detecting environment changes, *IEEE Proceedings of Photonics Global Conference (PGC), 2012*, 1-3 (2012); DOI: [10.1109/PGC.2012.6457991](https://doi.org/10.1109/PGC.2012.6457991)
7. Do Thi Nga ; Chu Thuy Anh; Nguyen Tri Lan; Nguyen Ai Viet, Optically trapping cold atoms by using a silicon nanopillar, *IEEE conference publications, Photonics Global Conference (PGC), 2012*, (2012); DOI: [10.1109/PGC.2012.6457989](https://doi.org/10.1109/PGC.2012.6457989)

Phụ lục 2

Các bài báo của cán bộ Trung tâm không ghi địa chỉ Viện Vật lý

1. P. Désesquelles, A.J. Boston, H.C. Boston, J.R. Cresswell, M.R. Dimmock, I.H. Lazarus, J. Ljungvall, L. Nelson, D.-T. Nga, P.J. Nolan, S.V. Rigby, J. Simpson, N.-T. Van-Oanh, Direct determination of the hit locations from experimental HPGe pulses, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A729*, 198–206 (2013), ISSN: 0168-9002
2. P. Désesquelles, D.-T. Nga, A. Cholet, Exact solution of Random Graph fragmentation and physical, chemical and biological applications, *Journal of Physics: Conference Series* 410, 012058 (2013); DOI: [10.1088/1742-6596/410/1/012058](https://doi.org/10.1088/1742-6596/410/1/012058)
3. O. Nier, D. Rideau, Y.M. Niquet, F. Monsieur, V.H. Nguyen, F. Triozon, A. Cros, R. Clerc, J.C. Barbé, P. Palestri, D. Esseni, I. Duchemin, L. Smith, L. Silvestri, F. Nallet, C. Tavernier, H. Jaouen, L. Selmi, Multi-scale strategy for high-k/metal-gate UTBB-FDSOI devices modeling with emphasis on back bias impact on mobility, *J Comput Electron*, (2013); DOI: [10.1007/s10825-013-0532-1](https://doi.org/10.1007/s10825-013-0532-1)
4. Viet-Hung Nguyen, François Triozon, Frédéric D. R. Bonnet, and Yann-Michel Niquet, Performances of Strained Nanowire Devices: Ballistic Versus Scattering-Limited Currents, *IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES* 60 (5), 1056 (2013); DOI: [10.1109/TED.2013.2248734](https://doi.org/10.1109/TED.2013.2248734)
5. Amandeep Kaur, Erik R. Ylvisaker, Deyu Lu, Tuan Anh Pham, Giulia Galli and Warren E. Pickett, Spectral representation analysis of dielectric screening in solids and molecules, *Phys. Rev. B* 87, 165203 (2013); DOI: [10.1103/PhysRevB.87.155144](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.87.155144)
6. Cui Zhang, Tuan Anh Pham, Francois Gygi and Giulia Galli, Electronic structure of the solvated chloride anion from first principles molecular dynamics, *J. Chem. Phys- Comm.* 138, 181102 (2013); DOI: [10.1063/1.4804621](https://doi.org/10.1063/1.4804621)
7. Viet-Hung Nguyen, François Triozon, and Yann-Michel Niquet, Strain effects on transport properties of Si nanowire devices, *Proceeding of SISPAD Conference*, pp. 89 – 92 (2013); ISBN: 978-1-4673-5736-4.
8. N. Pons, F. Triozon, M.-A. Jaud, R. Coquand, S. Martinie, O. Rozeau, Y.-M. Niquet, V. Hung Nguyen, A. Idrissi-El Oudrhiri, S. Barraud, Density Gradient calibration for 2D quantum confinement: Tri-Gate SOI transistor application, *Proceeding of SISPAD Conference*, pp. 184 - 187 (2013); ISBN: 978-1-4673-5736-4.
9. S Barraud, R Coquand, V Maffini-Alvaro, M-P Samson, J-M Hartmann, L Tosti, M Casse, V. Hung Nguyen, F Triozon, Y-M Niquet, C Tabone, P Perreau, F Allain, C Vizioz, C Comboroure, F Aussenac, S Monfray, G Ghibaudo, F Boeuf, B De Salvo, O Faynot, Scaling of Ω -gate SOI nanowire N- and P-FET down to 10nm gate length: Size- and orientation-dependent strain effects, *IEEE Proceedings of Symposium on VLSI Technology*, pp. T230 - T231 (2013); ISSN: 0743-1562.
10. D. Rideau, Y. M. Niquet, O. Nier, P. Palestri, D. Esseni, V. H. Nguyen, F. Triozon, I. Duchemin, D. Garetto, L. Smith, L. Silvestri, F. Nallet, C. Tavernier, H. Jaouen, Mobility in FDSOI Devices: Monte Carlo and Kubo Greenwood Approaches Compared to NEGF

Simulations, *Proceedings of 16th International Workshop on Computational Electronics*, pp. 60-61 (2013); ISBN: 978-3-901578-26-7.

11. S. Berrada, V. Hung Nguyen, A. Alarcon, D. Querlioz, J. Saint-Martin, A. Bournel, C. Chassat, P. Dollfus, Graphene Nanomesh Transistors with high on/off ratio and good current saturation, *Proceedings of 16th International Workshop on Computational Electronics*, pp. 34-35 (2013); ISBN: 978-3-901578-26-7.