

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

BÁO CÁO TỔNG KẾT CÔNG TÁC NĂM 2015

Trung tâm Vật lý tính toán

Hà Nội, 11/2015

1. Giới thiệu

- Địa điểm: 10 Đào Tấn, Ba Đình, Hà Nội
- Điện thoại, Fax: +84 4 37662107 (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. 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).

- Chức năng, nhiệm vụ:

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:

- Vật lý nano: các tính chất điện tử và truyền dẫn của graphene và các vật liệu nano, thiết kế linh kiện điện tử nano
- Vật lý sinh học: vật lý các hệ sinh học phân tử (protein, ADN, màng sinh học, virus...), cảm biến sinh học, các hệ lai hóa nano-sinh học
- Vật lý liên ngành: mô hình hóa và tính toán trong vật lý y sinh, vật lý kinh tế
- Phát triển các phương pháp tính toán, mô phỏng trong vật lý.

- 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.

2. Tổ chức

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

3. Nhân sự

a) Cán bộ biên chế:

- | | |
|--------------------------|---------|
| 1. Trịnh Xuân Hoàng | PGS TS |
| 2. Nguyễn Việt Hưng | TS |
| 3. Lê Duy Mạnh | 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 hiện công tác tại Trung tâm:

- | | |
|-----------------|----|
| 1. Tô Duy Quang | CN |
|-----------------|----|

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

- | | |
|--------------------|--|
| 1. Phạm Tuấn Anh | Postdoc tại Lawrence Livermore National Lab, USA |
| 2. Phan Đức Anh | NCS tại ĐH Illinois, Urbana Champaign, USA |
| 3. Vũ Thúy Hương | NCS tại ĐH Maryland, College Park, USA |
| 4. Nguyễn Thị Thảo | NCS tại ĐH Quốc gia Pusan, Hàn quốc |
| 5. Trần Thanh Thúy | NCS tại ĐH Cachan, Paris, Pháp |

6. Vũ Thị Hải Yến NCS tại ĐH Polytechnique, Paris, Pháp

d) Cộng tác viên:

1. Nguyễn Như Đạt	PGS TS
2. Nguyễn Văn Liên	GS TSKH
3. Nguyễn Thế Toàn	TS, ĐH KHTN Hà Nội
4. Nguyễn Mạnh Thường	TS

e) Nghiên cứu sinh:

	<i>Khóa</i>	<i>Người hướng dẫn</i>
1. Nguyễn Bá Hưng	2010	Trịnh Xuân Hoàng
2. Bùi Phương Thúy	2010	Trịnh Xuân Hoàng
3. Chu Thùy Anh	2011	Nguyễn Ái Việt
4. Bùi Thị Lê Quyên	2012	Nguyễn Ái Việt
5. Nguyễn Thị Thùy Nhung	2014	Nguyễn Văn Liên
6. Nguyễn Minh Vương	2014	Nguyễn Huy Việt, Nguyễn Việt Hưng

Biên động nhân sự trong năm 2014:

- TS. Lê Duy Mạnh vào biên chế từ 6/2015
- ThS. Trịnh Thị Lan Hoa chấm dứt hợp đồng từ 1/9/2015, hiện là sinh viên diploma tại ICTP
- ThS. Dương Ngọc Mai chấm dứt hợp đồng từ 1/9/2015, hiện là nghiên cứu sinh tại Đại học Paris-Sud.

Công tác nước ngoài:

- Nguyễn Việt Hưng: Đại học Paris-Sud
- Trịnh Xuân Hoàng: Viện Vật lý, Viện Hàn lâm Khoa học Ba Lan, 13-22/5/2015.

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

- GS. Antonio Trovato (Đại học Padova), 8/2015
- GS. Rudolf Podgornik (Đại học Ljubljana), 8/2015

4. Các đề tài nghiên cứu

Các đề tài do cán bộ Trung tâm chủ nhiệm:

- 04 đề tài NCCB thuộc Quỹ Nafosted:

- “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.
- “Nghiên cứu lý thuyết truyền dẫn điện ở các cấu trúc nano dựa trên graphene và các vật liệu tựa graphene”, Chủ nhiệm: Nguyễn Văn Liên, Thời gian thực hiện: 3/2014 – 3/2016.
- “Nghiên cứu mô hình hóa và tính toán về cuộn protein, thuộc tính pha của các polymer sinh học, và tương tác phân tử trong các hệ nano-bio”, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 4/2014 – 4/2016.
- “Nghiên cứu tính chất truyền dẫn trong các linh kiện nano dựa trên dị cấu trúc của một số vật liệu tiên tiến”, Chủ nhiệm: Nguyễn Việt Hưng, Thời gian thực hiện: 3/2015 – 3/2017.

- 01 đề tài Hợp tác quốc tế với VHL Belarus:

- “Graphene, ống nano cacbon với tạp và các chuẩn hạt. Ứng dụng trong thiết kế các biosensor và các thiết bị nano”, Chủ nhiệm: Nguyễn Ái Việt, Thời gian thực hiện: 1/2013 – 12/2015.

- 02 đề tài cơ sở cho cán bộ trẻ:

- “Hình thức luận plasmons trong một số cấu trúc”, Chủ nhiệm: Đỗ Thị Nga, Thời gian thực hiện: 2015
- “Ứng dụng phương pháp hàm Green truy hồi: Tính mật độ trạng thái và hệ số khuếch tán của mạng graphene pha tạp”, Chủ nhiệm: Nguyễn Thị Thùy Nhung, Thời gian thực hiện: 2015.

- 02 đề tài cơ sở chọn lọc:

- “Nghiên cứu tính truyền dẫn ballistic qua lưỡng chuyển tiếp n-p-n trên graphene nanoribbon”, Chủ nhiệm: Tô Duy Quang, Thời gian thực hiện: 2015
- “Mối liên hệ giữa tín hiệu tâm thất trái và tâm nhĩ phải trong hiện tượng tim đập nhanh đo được từ tim chuột cô lập”, Chủ nhiệm: Lê Duy Mạnh, Thời gian thực hiện: 2015

- 01 đề tài cấp cơ sở:

- “Nghiên cứu tính chất pha của các polymer sinh học và hấp thụ plasmon trong các hệ nano-sinh học”, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 2015.

- 01 đề tài hỗ trợ nghiên cứu cơ bản:

- “Nghiên cứu thiết kế linh kiện điện tử nano từ vật liệu grapheme”, Chủ nhiệm: Nguyễn Huy Việt, Thời gian thực hiện: 2015.

5. Công bố khoa học

Trong thời gian 11/2014 - 11/2015, tổng số bài báo khoa học của Trung tâm là 17 bài (chỉ tính các bài báo có ghi địa chỉ Viện Vật lý), bao gồm:

- Trên tạp chí SCI: 4 bài (gồm 3 bài năm 2015 và 1 bài năm 2014)
- Trên tạp chí SCIE: 1 bài
- Trên tạp chí/tuyển tập quốc tế không thuộc SCI, có mã ISSN/ISBN: 11 bài
- Trên tạp chí/tuyển tập hội nghị trong nước: 1 bài.

Số bài báo trên tổng số biên chế và hợp đồng: $17/15 = 1.13$

Số bài báo SCI/SCIE trên tổng số biên chế và hợp đồng: $5/15 = 0.33$

Số bài báo SCI/SCIE trên số biên chế: $5/8 = 0,625$ bài/người (chỉ tính bài của các cán bộ biên chế).

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

Năm	2015	2014	2013	2012	2011	2010
Tạp chí SCI + SCIE	5	12	14	15	12	3
Tạp chí/tuyển tập quốc tế không thuộc SCI, có mã số ISSN/ISBN	11	7	8	1	0	1
Tạp chí/tuyển tập trong nước	1	2	4	2	1	0
Tổng số:	17	21	26	18	13	4

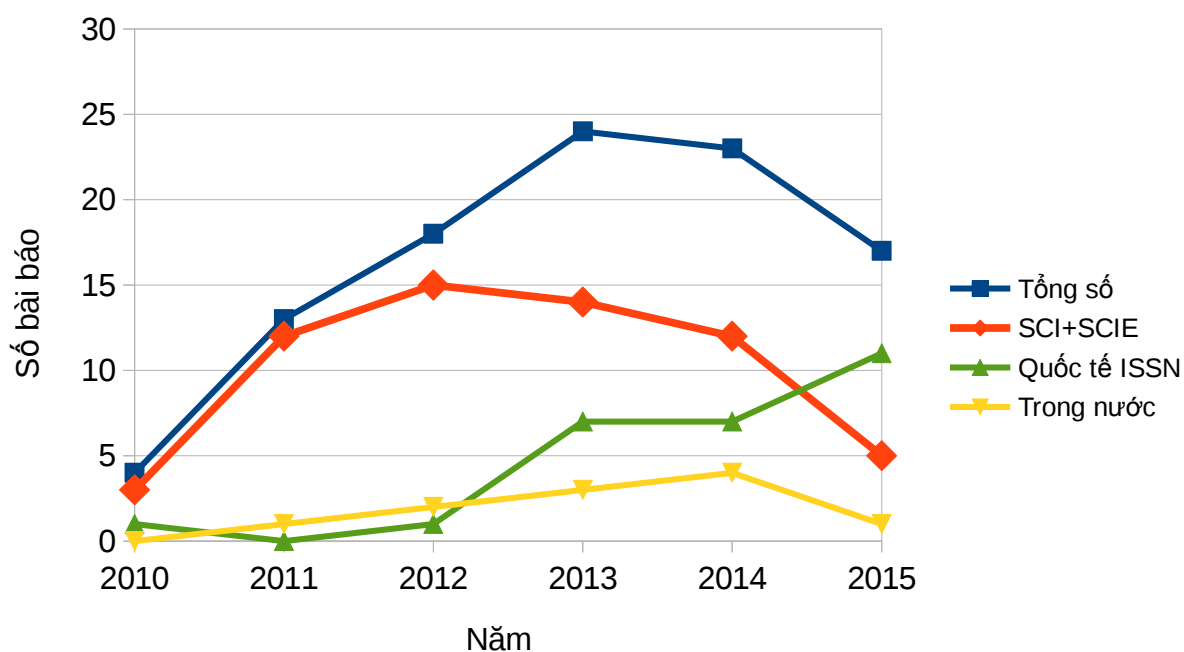
Danh sách các bài báo: xem Phụ lục 1.

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

TT	Họ và tên	Tạp chí SCI và SCIE	Tạp chí/ tuyển tập quốc tế không thuộc SCI	Tạp chí/ tuyển tập trong nước	Tổng số
1	Phan Đức Anh	1			1
2	Trịnh Xuân Hoàng		2		2
3	Nguyễn Việt Hưng	3			3
4	Đỗ Thị Nga	2			2
5	Tô Thị Thảo		1		1
6	Nguyễn Ái Việt	2	9	1	12
7	Nguyễn Huy Việt	2			2

Các bài báo của cán bộ Trung tâm không ghi địa chỉ Viện Vật lý (không được thông kê ở trên, xem danh sách ở Phụ lục 2):

- Trần Thanh Thúy: 1 bài SCI.
- Nguyễn Việt Hưng: 2 bài SCI.



6. Tham gia các hội nghị khoa học trong nước và quốc tế:

- Hội nghị Vật lý lý thuyết lần thứ 40 (NCTP-40), Đà Lạt, 27-30/7/2015: Trịnh Xuân Hoàng, Nguyễn Việt Hưng (báo cáo mời), Lê Duy Mạnh, Tô Duy Quang, Nguyễn Ái Việt, Nguyễn Huy Việt
- Hội thảo quốc tế về Vật lý các hệ phức hợp và Vật lý liên ngành (IWTCP-3), Đà Lạt, 27 – 30/7/2015: Trịnh Xuân Hoàng, Nguyễn Việt Hưng (báo cáo mời), Nguyễn Ái Việt

- Hội nghị quốc tế “Biomolecules and Nanostructures 5”, Jarosowice (Poland), 13-17/5/2015: Trịnh Xuân Hoàng (báo cáo mời).
- Hội nghị ACCMS-8, Taipei (Taiwan), 16-18/6/2015: Nguyễn Huy Việt (báo cáo mời).

7. Đào tạo:

a. Giảng dạy cho cao học Viện Vật lý:

- Trịnh Xuân Hoàng: Vật lý thống kê, Mô phỏng và mô hình hóa
- Nguyễn Huy Việt: Điện động lực học

b. Giảng dạy bên ngoài Viện Vật lý:

- Nguyễn Huy Việt: Numerical Methods, Electronic Structures, Materials Modelling (Trường USTH)

c. Hướng dẫn tốt nghiệp:

- Trịnh Xuân Hoàng: 01 học viên cao học VVL (đã bảo vệ 11/2015)
- Nguyễn Huy Việt: 01 học viên cao học VVL (đã bảo vệ), 01 khóa luận đại học (đã bảo vệ)
- Nguyễn Ái Việt: 02 NCS, 03 học viên cao học.

8. Các hoạt động khác:

- Tổ chức 4 buổi seminar về vật lý lý thuyết và vật lý tính toán tại Viện Vật lý.
- Tham gia ngày Vật lý lý thuyết: Thung Nham, Ninh Bình (04/4/2015)
- Tham gia Hội nghị Toán - Lý kỷ niệm 40 năm thành lập Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

9. Thi đua khen thưởng:

Đề nghị Viện Vật lý xét các danh hiệu:

- Tập thể lao động tiên tiến của Viện Vật lý: Trung tâm Vật lý tính toán
- Chiến sỹ thi đua của Viện Vật lý: Đỗ Thị Nga
- Bằng khen của Viện Vật lý: Nguyễn Huy Việt
- Lao động tiên tiến:
 - Trịnh Xuân Hoàng
 - Nguyễn Việt Hưng
 - Lê Duy Mạnh
 - Đỗ Thị Nga
 - Nguyễn Thị Thùy Nhung
 - Tô Thị Thảo
 - Nguyễn Ái Việt
 - Nguyễn Huy Việt
 - Tô Duy Quang

Phụ lục 1
Công bố khoa học của Trung tâm Vật lý tính toán
trong thời gian 11/2014 – 11/2015

Trên tạp chí SCI

1. Anh D. Phan, Do T. Nga, The-Long Phan, Le T. M. Thanh, Chu T. Anh, Sophie Bernad, and N. A. Viet, Theoretical model for optical properties of porphyrin, *PHYSICAL REVIEW E* **90**, 062707 (2014); DOI: [10.1103/PhysRevE.90.062707](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.90.062707)
2. M. Chung Nguyen, V. Hung Nguyen, Huy-Viet Nguyen, J. Saint-Martin, and P. Dollfus, Enhanced Seebeck effect in graphene devices by strain and doping engineering, *Physica E* **73**, 207 (2015); DOI: [10.1016/j.physe.2015.05.020](https://doi.org/10.1016/j.physe.2015.05.020)
3. Chu Viet Ha, Do Thi Nga, Nguyen Ai Viet, Tran Hong Nhung, The local field dependent effect of the critical distance of energy transfer between nanoparticles, *Optics Communications* **353**, 49-55 (2015); DOI: [10.1016/j.optcom.2015.05.015](https://doi.org/10.1016/j.optcom.2015.05.015)
4. V. Hung Nguyen, Huy-Viet Nguyen, J. Saint-Martin, and P. Dollfus, Strain-induced conduction gap in vertical devices made of misoriented graphene layers, *Nanotechnology* **26**, 115201 (2015); DOI: [10.1088/0957-4484/26/11/115201](https://doi.org/10.1088/0957-4484/26/11/115201)

Trên tạp chí SCIE

1. V Hung Nguyen and P Dollfus, Strain-induced modulation of Dirac cones and van Hove singularities in a twisted graphene bilayer, *2D Materials* **2**, 035005 (2015); DOI: [doi:10.1088/2053-1583/2/3/035005](https://doi.org/10.1088/2053-1583/2/3/035005)

Trên tạp chí, tuyển tập hội nghị quốc tế không thuộc SCI

1. Bui Phuong Thuy, Hoang Thi Thu Huong and Trinh X Hoang, Effects of macromolecular crowding on protein folding, *Journal of Physics: Conference Series* **627**, 012027 (2015); DOI: [10.1088/1742-6596/627/1/012027](https://doi.org/10.1088/1742-6596/627/1/012027)
2. Nguyen Ba Hung and Trinh Xuan Hoang, Aggregation of peptides in the tube model with correlated sidechain orientations, *Journal of Physics: Conference Series* **627**, 012028 (2015); DOI: [10.1088/1742-6596/627/1/012028](https://doi.org/10.1088/1742-6596/627/1/012028)
3. Bui Thi Le Quyen, D Ngoc Mai, N Tri Lan, and N A Viet, Effective mass of photon in liquid water environment of life and soft matters, *Journal of Physics: Conference Series* **627**, 012015 (2015); DOI: [10.1088/1742-6596/627/1/012015](https://doi.org/10.1088/1742-6596/627/1/012015)
4. Nguyen Thi Phuong Lan, Dao Thi Thuy Nga and Nguyen Ai Viet, Trapping Cold Atoms Using Surface Plasmons with Phase Singularities Generated by Evanescent Bessel Beams, *Journal of Physics: Conference Series* **627**, 012017 (2015); DOI: [10.1088/1742-6596/627/1/012017](https://doi.org/10.1088/1742-6596/627/1/012017)
5. Dao Thi Thuy Nga, Nguyen Thi Phuong Lan and Nguyen Ai Viet, Second Quantization Model of Surface Plasmon Polariton at Metal Planar Surface, *Journal of Physics: Conference Series* **627**, 012018 (2015); DOI: [10.1088/1742-6596/627/1/012018](https://doi.org/10.1088/1742-6596/627/1/012018)
6. Man Van Ngu, Ngo Gia Vinh, Nguyen Tri Lan, Luu Thi Kim Thanh and Nguyen Ai Viet, First, Second Quantization and Q-Deformed Harmonic Oscillator, *Journal of Physics: Conference Series* **627**, 012021 (2015); DOI: [10.1088/1742-6596/627/1/012021](https://doi.org/10.1088/1742-6596/627/1/012021)
7. Ngo Gia Vinh, Man Van Ngu, Nguyen Tri Lan, Luu Thi Kim Thanh and Nguyen Ai Viet, Q-Deformed Harmonic Oscillator and Morse-like Anharmonic Potential, *Journal of Physics: Conference Series* **627**, 012022 (2015); DOI: [10.1088/1742-6596/627/1/012022](https://doi.org/10.1088/1742-6596/627/1/012022)
8. Chu Thuy Anh, Nguyen Tri Lan and Nguyen Ai Viet, General autocatalytic theory and simple model of financial markets; *Journal of Physics: Conference Series* **627**, 012024 (2015); DOI: [10.1088/1742-6596/627/1/012024](https://doi.org/10.1088/1742-6596/627/1/012024)

9. Chu Thuy Anh, Nguyen Tri Lan and Nguyen Ai Viet, Simple grading model for financial markets, *Journal of Physics: Conference Series* **627**, 012025 (2015); DOI: [10.1088/1742-6596/627/1/012025](https://doi.org/10.1088/1742-6596/627/1/012025)
10. T T Thao, C T Anh, N T Lan and N A Viet, Analysis the UV-visible Spectra of Neuroglobin Based on Two-Level Model, *Journal of Physics: Conference Series* , 012026 (2015); DOI: [10.1088/1742-6596/627/1/012026](https://doi.org/10.1088/1742-6596/627/1/012026)
11. N. A. Poklonski, , S. V. Ratkevich, S.A. Vyrko, E. F. Kislyakov, Anh D. Phan, Nguyen Ai Viet, Density functional calculation of charge and magnetic states of carbododecahedron, *The International Conference on Physics, Chemistry and Application of Nanostructures "Nanomeeting 2015"*, Minsk, Belarus, May 2015.

Trên tạp chí, tuyển tập hội nghị quốc gia

1. Nguyễn Thị Phương Lan, Đỗ chí Nghĩa, Nguyễn Ái Việt, Bẫy quang học nguyên tử lạnh trung hòa dựa trên các mode plasmon bề mặt, *Tạp chí Khoa học (ĐH SPHN2)* **33**, 1859-2325 (2014);

Phụ lục 2

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

1. Y. M. Niquet, I. Duchemin, V.-H. Nguyen, F. Triozon, and D. Rideau, Remote surface roughness scattering in fully depleted silicon-on-insulator devices with high-j/SiO₂ gate stacks, *APPLIED PHYSICS LETTERS* **106**, 023508 (2015); URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4906199>
2. Philippe Dollfus, Viet Hung Nguyen and Jérôme Saint-Martin, Thermoelectric effects in graphene nanostructures, *Journal of Physics: Condensed Matter* **27**, 133204 (2015); DOI: [10.1088/0953-8984/27/13/133204](https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/13/133204)
3. Bogdan Tarus, Thanh T. Tran, Jessica Nasica-Labouze, Fabio Sterpone, Phuong H. Nguyen, and Philippe Derreumaux, Structures of the Alzheimer's Wild-Type A β 1-40 Dimer from Atomistic Simulations, *The Journal of Physical Chemistry B* **119**, 10478 – 10487 (2015); DOI: [10.1021/acs.jpcc.5b05593](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b05593)