

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

BÁO CÁO TỔNG KẾT CÔNG TÁC NĂM 2016

Trung tâm Vật lý tính toán

Hà Nội, 11/2016

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 7 biên chế (1 GS, 1 PGS, 4 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:

- 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: các tính chất động lực học và cân bằng của các hệ sinh học phân tử (protein, ADN, màng sinh học, virus...), các tính chất quang học và lượng tử của các hệ sinh học và các hệ lai nano-sinh học
- Vật lý liên ngành: ứng dụng các mô hình vật lý trong y sinh học, kinh tế học
- Vật lý tính toán: phát triển các phương pháp tính toán, mô phỏng trong vật lý.

- Trang thiết bị: 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

3.1. 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. Nguyễn Ái Việt | GS TSKH |
| 7. Nguyễn Huy Việt | TS |

3.2. Cán bộ hợp đồng hiện công tác tại Trung tâm:

- | | |
|-----------------------|----|
| 1. Đinh Thị Diệu Linh | CN |
| 2. Đỗ Ngọc Hà | CN |

3.3. 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. Trần Thanh Thúy | NCS tại ĐH Cachan, Paris, Pháp (đã bảo vệ 9/2016) |
| 5. Vũ Thị Hải Yến | NCS tại ĐH Polytechnique, Paris, Pháp |

3.4. 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 | Pacific Northwest National Lab, WA, USA |
| 5. Tô Thị Thảo | TS | Học viện công nghệ bưu chính viễn thông |

3.5. Nghiên cứu sinh:

<i>Họ và tên</i>	<i>Khóa</i>	<i>Người hướng dẫn</i>
1. Nguyễn Bá Hưng	2010	Trịnh Xuân Hoàng
2. Bùi Phương Thúy	2010	Trịnh Xuân Hoàng (đã bảo vệ cấp cơ sở)
3. Chu Thùy Anh	2011	Nguyễn Ái Việt (đã bảo vệ cấp học viện)
4. Bùi Thị Lệ Quyên	2012	Nguyễn Ái Việt
5. Nguyễn Thị Thùy Nhung	2014	Nguyễn Văn Liễn
6. Nguyễn Minh Vương	2014	Nguyễn Huy Việt, Nguyễn Việt Hưng

3.6. Biến động nhân sự trong năm 2016:

- CN. Đinh Thị Diệu Linh ký hợp đồng từ 1/6/2016
- CN. Đỗ Ngọc Hà ký hợp đồng từ 1/6/2016
- ThS. Tô Duy Quang chấm dứt hợp đồng từ 10/2016
- Nguyễn Thị Thảo, cán bộ hợp đồng, NCS tại ĐH Quốc gia Pusan, Hàn quốc, chấm dứt hợp đồng từ 1/6/2016.

3.7. Công tác nước ngoài:

- Nguyễn Việt Hưng: tiếp tục công tác dài hạn tại Đại học Louvain, Bỉ
- Trịnh Xuân Hoàng: trao đổi khoa học tại Đại học Padova, Italy, 16/10/2016 - 13/11/2016.

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

- GS. Chi Keung Chan (Institute of Physics, Academia Sinica, Taipei, Taiwan), 29/12/2015 - 5/1/2016.

4. Các đề tài nghiên cứu

4.1. Các đề tài NCCB thuộc Quỹ Nafosted: 06 đề tài

- “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 Liễn, Thời gian thực hiện: 3/2014 – 3/2016. Đã nghiệm thu.
- “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. Đã nghiệm thu.
- “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.
- “Phương pháp mô hình hóa vật lý và một số ứng dụng cho các hệ không đơn giản”, Chủ nhiệm: Nguyễn Ái Việt, Thời gian thực hiện: 5/2016-5/2018.
- “Các mô hình hiệu dụng trong nghiên cứu đặc tính truyền dẫn của graphene đa tinh thể và các vật liệu hai chiều khác”, Chủ nhiệm: Nguyễn Huy Việt, Thời gian thực hiện: 5/2016-5/2018
- “Các tính chất electronic của các cấu trúc nano dựa trên graphene và các vật liệu hai chiều liên quan”, Chủ nhiệm: Nguyễn Văn Liễn, Thời gian thực hiện: 5/2016-5/2018

4.2. Các đề tài cơ sở cho cán bộ trẻ: 02 đề tài

- “Phương pháp feedback mới điều khiển nhịp đập kép của tim”, Chủ nhiệm: Lê Duy Mạnh, Thời gian thực hiện: 2016
- “Ứng dụng phương pháp T ma trận trong nghiên cứu tính chất truyền dẫn điện của chấm điện tử dựa trên graphene”, Chủ nhiệm: Nguyễn Thị Thùy Nhung, Thời gian thực hiện:

2016

4.3. Đề tài cấp cơ sở của Trung tâm:

- “Nghiên cứu hiện tượng kết tụ protein và sự hình thành amyloid”, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 2016.

4.4. Đề tài hỗ trợ nghiên cứu cơ bản của Trung tâm:

- “Nghiên cứu thiết kế linh kiện điện tử nano từ vật liệu graphene”, Chủ nhiệm: Nguyễn Huy Việt, Thời gian thực hiện: 2016.

5. Công bố khoa học

Trong thời gian 1/12/2015 - 30/11/2016, tổng số bài báo khoa học của Trung tâm là 25 bài (chỉ tính các bài báo có ghi địa chỉ Viện Vật lý, xem Phụ lục 1), bao gồm:

- Trên tạp chí SCI: 11 bài (gồm 9 bài năm 2016 và 2 bài năm 2015)
- Trên tạp chí/tuyển tập quốc tế không thuộc ISI: 14 bài (12 bài năm 2016 và 2 bài năm 2015)

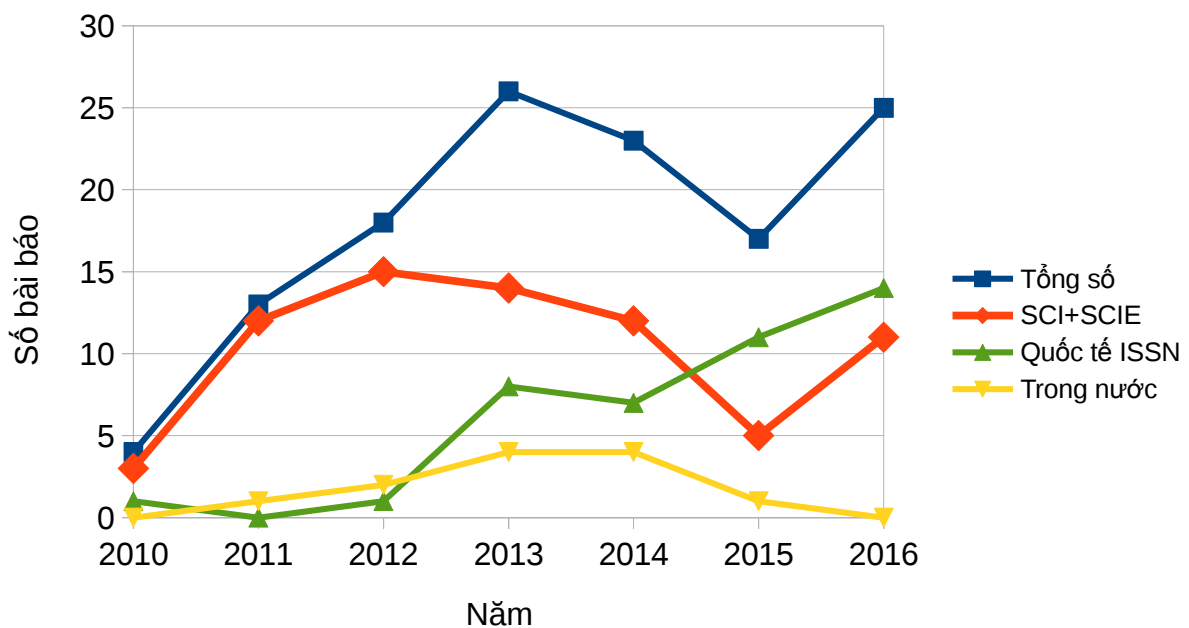
Số bài báo trên tổng số biên chế và hợp đồng: $25/14 = 1.79$

Số bài báo ISI trên tổng số biên chế và hợp đồng: $11/14 = 0.79$

Số bài báo ISI trên số biên chế: $11/7 = 1.57$ bài/người (chỉ tính bài của các cán bộ biên chế).

So sánh với các năm trước (theo chu kỳ từ 1/12/năm trước tới 30/11/năm sau):

Năm	2016	2015	2014	2013	2012	2011	2010
Tạp chí ISI (SCI + SCIE)	11	5	12	14	15	12	3
Tạp chí/tuyển tập quốc tế không thuộc ISI	14	11	7	8	1	0	1
Tạp chí/tuyển tập trong nước	0	1	2	4	2	1	0
Tổng số:	25	17	21	26	18	13	4



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

TT	Họ và tên	Tạp chí ISI	Tạp chí/ tuyển tập quốc tế không thuộc ISI	Tạp chí/ tuyển tập trong nước	Tổng số
1	Phan Đức Anh		1		1
2	Trịnh Xuân Hoàng	5	2		7
3	Nguyễn Việt Hưng	4	2		6
4	Lê Duy Mạnh	1	1		2
5	Nguyễn Thị Thùy Nhung	1			1
6	Đỗ Thị Nga		4		4
7	Nguyễn Ái Việt		10		10
8	Nguyễn Huy Việt	3	2		5

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

- Nguyễn Việt Hưng: 1 bài SCI (Phys. Rev. Lett.), 1 bài tuyển tập quốc tế
- Trần Thanh Thúy: 2 bài SCI.

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

- Hội nghị Vật lý lý thuyết lần thứ 41 (NCTP-41), Nha Trang, 1-4/8/2016: Nguyễn Ái Việt (Chủ tịch hội nghị), Trịnh Xuân Hoàng (Trưởng ban tổ chức), Lê Duy Mạnh.
- Hội nghị quốc tế về Kỹ nghệ y sinh học (BME6), Tp. Hồ Chí Minh, 27-29/6/2016: Trịnh Xuân Hoàng (báo cáo mời).

7. Đào tạo:

7.1. Giảng dạy cho cao học Học viện KH&CN:

- Trịnh Xuân Hoàng: Mô phỏng và Mô hình hóa

7.2. Giảng dạy bên ngoài Học Viện KH&CN:

- Nguyễn Huy Việt: Electronic Structures, Physics of Semiconductors (Trường USTH)

7.3. Hướng dẫn tốt nghiệp:

- Trịnh Xuân Hoàng: 02 NCS (01 NCS đã bảo vệ cơ sở)
- Nguyễn Ái Việt: 02 NCS (đã bảo vệ), 02 học viên cao học (đã bảo vệ)
- Đỗ Thị Nga: 02 khóa luận đại học (đã bảo vệ)

8. Các hoạt động khác:

- Tổ chức 7 buổi seminar về vật lý lý thuyết và vật lý tính toán tại Viện Vật lý
- Tham gia ngày Vật lý lý thuyết: Ba Bể, Bắc Kạn (1-2/4/2015)

9. Thi đua khen thưởng:

Đề nghị Viện Vật lý xét các danh hiệu:

- Tập thể lao động xuất sắc của Viện Hàn lâm:
- Tập thể lao động tiên tiến của Viện Vật lý: Trung tâm Vật lý tính toán
- Chiến sỹ thi đua của Viện Vật lý:

- Trịnh Xuân Hoàng
- Nguyễn Huy Việt
- Giấy khen của Viện Vật lý:
 - Lê Duy Mạnh
 - Đỗ Thị Nga
- Lao động tiên tiến:
 - Trịnh Xuân Hoàng
 - Nguyễn Việt Hưng
 - Lê Duy Mạnh
 - Đỗ Thị Nga
 - Nguyễn Thị Thùy Nhung
 - Nguyễn Ái Việt
 - Nguyễn Huy Việt

Hà Nội, ngày 21 tháng 11 năm 2016
Giám đốc Trung tâm Vật lý tính toán

Trịnh Xuân Hoàng

Phụ lục 1
Công bố khoa học của Trung tâm Vật lý tính toán
trong thời gian 1/12/2015 – 30/11/2016

Trên tạp chí SCI

1. M. Chung Nguyen, V. Hung Nguyen, Huy-Viet Nguyen and P. Dollfus, Strong negative differential conductance in strained graphene devices, *Journal of Applied Physics* **118**, 234306 (2015); DOI: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4937911>
2. Trinh X. Hoang, Hoa Lan Trinh, Achille Giacometti, Rudolf Podgornik, Jayanth R. Banavar, and Amos Maritan, Phase diagram of the ground states of DNA condensates *Physical Review E (Rapid Communications)* **92**, 060701(R) (2015); DOI: [10.1103/PhysRevE.92.060701](http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.92.060701)
3. V Hung Nguyen, and P Dollfus, Transport gap in vertical devices made of incommensurately misoriented graphene layers, *Journal of Physics D: Applied Physics* **49**, 045306 (2016); DOI: [10.1088/0022-3727/49/4/045306](http://dx.doi.org/10.1088/0022-3727/49/4/045306)
4. Phuong Thuy Bui and Trinh Xuan Hoang, Folding and escape of nascent proteins at ribosomal exit tunnel, *Journal of Chemical Physics* **144**, 095102 (2016); DOI: [10.1063/1.4943042](http://dx.doi.org/10.1063/1.4943042)
5. Tatjana Skrbic, Artem Badasyan, Trinh Xuan Hoang, Rudolf Podgornik and Achille Giacometti, From polymers to proteins: the effect of side chains and broken symmetry on the formation of secondary structures within a Wang–Landau approach, *Soft Matter* **12**, 4783 (2016); DOI: [10.1039/c6sm00542j](http://dx.doi.org/10.1039/c6sm00542j)
6. H Chau Nguyen, Nhung T T Nguyen and V Lien Nguyen, The transfer matrix approach to circular graphene quantum dots, *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**, 275301 (2016), DOI: [10.1088/0953-8984/28/27/275301](http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/28/27/275301)
7. V. Hung Nguyen, Trinh X. Hoang, P. Dollfus and J.-C. Charlier, Transport properties through graphene grain boundaries: strain effects versus lattice symmetry *Nanoscale* **8**, 11658 (2016); DOI: [10.1039/c6nr01359g](http://dx.doi.org/10.1039/c6nr01359g)
8. Thinh H. Pham, Rampi Ramprasad and Huy-Viet Nguyen, Density-functional description of polymer crystals: A comparative study of recent van der Waals functionals, *J. Chem. Phys.* **144**, 214905 (2016); DOI: [10.1063/1.4953170](http://dx.doi.org/10.1063/1.4953170)
9. Tatjana Škrbić, Trinh X. Hoang, and Achille Giacometti, Effective stiffness and formation of secondary structures in a protein-like model, *Journal of Chemical Physics* **145**, 084904 (2016); DOI: [10.1063/1.4961387](http://dx.doi.org/10.1063/1.4961387)
10. Huy-Viet Nguyen and V. Hung Nguyen, Comment on “Orientation dependence of the optical spectra in graphene at high frequencies”, *Phys. Rev. B* **94**, 117401 (2016); DOI: [10.1103/PhysRevB.94.117401](http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.94.117401)
11. Shiuani-Ni Liang, Duy-Manh Le, Pik-Yin Lai and C. K. Chan, Ionic characteristics in cardiac alternans suppression using T \pm feedback control, *Europhysics Letters* **115**, 48001 (2016); DOI: [10.1209/0295-5075/115/48001](http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/115/48001)

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

1. V. Hung Nguyen, J. Saint-Martin, P. Dollfus, M. Chung Nguyen, H. Viet Nguyen, High thermoelectric figure of merit in devices made of vertically stacked graphene layers *Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD), 2015 International Conference on*, p. 169 - 172 (2015); DOI: [10.1109/SISPAD.2015.7292286](http://dx.doi.org/10.1109/SISPAD.2015.7292286)
2. Viet-Hung Nguyen, Jérôme Saint-Martin, Philippe Dollfus, Huy-Viet Nguyen, Strain effects on the electronic properties of devices made of twisted graphene layers

- Computational Electronics (IWCE), 2015 International Workshop on* (2015); DOI: [10.1109/IWCE.2015.7301952](https://doi.org/10.1109/IWCE.2015.7301952)
3. Anh D. Phan, Trinh X. Hoang, Cascaded plasmon resonant field enhancement in protein-conjugated gold nanoparticles: Role of protein shell, *Journal of Science: Advanced Materials and Devices* **1**, 61-64 (2016); DOI: [10.1016/j.jsamd.2016.03.002](https://doi.org/10.1016/j.jsamd.2016.03.002)
 4. Oanh T. P. Kim, Manh D. Le, Hoang X. Trinh and Hai V. Nong, In silico studies for the interaction of tumor necrosis factor-alpha (TNF- α) with different saponins from Vietnamese ginseng (*Panax vietnamsis*), *Biophysics and Physicobiology* **13**, 173-180 (2016); DOI: [10.2142/biophysico.13.0_173](https://doi.org/10.2142/biophysico.13.0_173)
 5. Chu Thuy Anh, Truong Thi Ngoc Anh, Nguyen Tri Lan, and Nguyen Ai Viet, Generalized Bogoliubov Polariton Model: An Application to Stock Exchange Market *Journal of Physics: Conference Series* **726**, 012007 (2016); DOI: [10.1088/1742-6596/726/1/012007](https://doi.org/10.1088/1742-6596/726/1/012007)
 6. N M Hoa, C V Ha, D T Nga, N T Lan, T H Nhung and N A Viet, Simple Model for Gold Nano Particles Concentration Dependence of Resonance Energy Transfer Intensity *Journal of Physics: Conference Series* **726**, 012009 (2016); DOI: [10.1088/1742-6596/726/1/012009](https://doi.org/10.1088/1742-6596/726/1/012009)
 7. Man Van Ngu, Ngo Gia Vinh, Nguyen Tri Lan, Luu Thi Kim Thanh and Nguyen Ai Viet, Cooper pair of superconductivity in the coordinate representation and q-deformed harmonic oscillator, *Journal of Physics: Conference Series* **726**, 012017 (2016); DOI: [10.1088/1742-6596/726/1/012017](https://doi.org/10.1088/1742-6596/726/1/012017)
 8. Ngo Gia Vinh, Man Van Ngu, Nguyen Tri Lan, Luu Thi Kim Thanh and Nguyen Ai Viet, The possible connection between q-deformed harmonic oscillator formation and anharmonicity, *Journal of Physics: Conference Series* **726**, 012018 (2016); DOI: [10.1088/1742-6596/726/1/012018](https://doi.org/10.1088/1742-6596/726/1/012018)
 9. Nguyen Anh Sang, Do Thi Thu Thuy, Nguyen Thi Ha Loan, Nguyen Tri Lan and Nguyen Ai Viet, Energy spectrum inverse problem of q-deformed harmonic oscillator and WBK approximation, *Journal of Physics: Conference Series* **726**, 012019 (2016); DOI: [10.1088/1742-6596/726/1/012019](https://doi.org/10.1088/1742-6596/726/1/012019)
 10. Nguyen Van Hoa, Vu Ngoc Tuan, Le Van Xuan, Nguyen Tri Lan and Nguyen Ai Viet, On the fluctuation induced mass enhancement, *Journal of Physics: Conference Series* **726**, 012023 (2016); DOI: [10.1088/1742-6596/726/1/012023](https://doi.org/10.1088/1742-6596/726/1/012023)
 11. Le Van Xuan, Nguyen Tri Lan, and Nguyen Ai Viet, On application of non-extensive statistical mechanics to studying ecological diversity, *Journal of Physics: Conference Series* **726**, 012024 (2016); DOI: [10.1088/1742-6596/726/1/012024](https://doi.org/10.1088/1742-6596/726/1/012024)
 12. Dao Thu Ha, Chu Thuy Anh, Do Thi Nga, Le Minh Thanh, Tran Thi Thanh Van, Nguyen Ai Viet, π -Plasmon model for carbon nano structures: Application to porphyrin, *Journal of Physics: Conference Series* **726**, 012006 (2016); DOI: [10.1088/1742-6596/726/1/012006](https://doi.org/10.1088/1742-6596/726/1/012006)
 13. Nguyen Thi Phuong Lan, Do Thi Nga and Nguyen Ai Viet, A model of optical trapping cold atoms using a metallic nano wire with surface plasmon effect, *Journal of Physics: Conference Series* **726**, 012008 (2016); DOI: [10.1088/1742-6596/726/1/012008](https://doi.org/10.1088/1742-6596/726/1/012008)
 14. Nguyen Thi Phuong Lan, Do Thi Nga and Nguyen Ai Viet, Second quantization model for surface plasmon polariton in metallic nano wires, *Journal of Physics: Conference Series* **726**, 012025 (2016); DOI: [10.1088/1742-6596/726/1/012025](https://doi.org/10.1088/1742-6596/726/1/012025)

Phụ lục 2

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

1. Thanh Thuy Tran, Phuong H. Nguyen, and Philippe Derreumaux, Lattice model for amyloid peptides: OPEP force field parametrization and applications to the nucleus size of Alzheimer's peptides, *Journal of Chemical Physics* **144**, 205103 (2016); URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4951739>
2. Mara Chiricotto, Thanh Thuy Tran, Phuong H. Nguyen, Simone Melchionna, Fabio Sterpone, Philippe Derreumaux, Coarse-grained and All-atom Simulations towards the Early and Late Steps of Amyloid Fibril Formation, *Israel Journal of Chemistry* **56**, 1-11 (2016); DOI: [10.1002/ijch.201600048](https://doi.org/10.1002/ijch.201600048)
3. M. Chung Nguyen, Viet-Hung Nguyen, Jérôme Saint-Martin, Philippe Dollfus, Strong negative differential resistance in graphene devices with local strain, *Computational Electronics (IWCE), 2015 International Workshop on*, p. 1-3 (2015); DOI: [10.1109/IWCE.2015.7301954](https://doi.org/10.1109/IWCE.2015.7301954)
4. V. Hung Nguyen, S. Dechamps, P. Dollfus, and J.-C. Charlier, Valley filtering and electronic optics using polycrystalline graphene, *Physical Review Letters*, 2016 (accepted)