

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

BÁO CÁO TỔNG KẾT CÔNG TÁC NĂM 2017

Trung tâm Vật lý tính toán

Hà Nội, 11/2017

1. Giới thiệu

- Địa điểm: Nhà 2H, 18 Hoàng Quốc Việt, Cầu Giấy, Hà Nội
- Điện thoại, Fax: +84 24 37662107 (Duong 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 5 biên chế (1 PGS, 3 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 hệ sinh học phân tử (protein, ADN, màng sinh học, virus...), cảm biến sinh học, các hệ lai hóa nano-sinh học
- Phát triển các phương pháp tính toán, mô phỏng trong vật lý.

- Cơ sở vật chất:

- Cụm máy tính: 1 nút chủ + 5 nút tính toán (34 cores), 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 hiện nay:

- | | |
|--------------------------|--------|
| 1. Trịnh Xuân Hoàng | PGS TS |
| 2. Nguyễn Việt Hưng | TS |
| 3. Đỗ Thị Nga | TS |
| 4. Nguyễn Thị Thùy Nhung | ThS |
| 5. Nguyễn Huy Việt | TS |

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

- | | |
|-----------------------|----|
| 1. Đinh Thị Diệu Linh | CN |
| 2. Phạm Văn Hoàng | CN |

3.3. Cán bộ hợp đồng công tác tại nước ngoài:

- | | |
|--------------------|--|
| 1. Phan Đức Anh | NCS tại ĐH Illinois, Urbana Champaign, USA |
| 2. Trần Thanh Thúy | Đã bảo vệ TS tại ĐH Cachan, Paris, Pháp |
| 3. Vũ Thị Hải Yến | NCS tại ĐH Polytechnique, Paris, Pháp |

3.4. Cộng tác viên:

- | | |
|--------------------|--|
| 1. Nguyễn Như Đạt | PGS TS, Đại học Duy Tân |
| 2. Nguyễn Văn Liễn | GS TSKH |
| 3. Lê Duy Mạnh | TS, Đại học Duy Tân |
| 4. Tô Thị Thảo | TS, Học viện Công nghệ Bưu chính viễn thông |
| 5. Nguyễn Thế Toàn | PGS TS, Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG Hà Nội |

6. Nguyễn Mạnh Thường TS, Pacific Northwest National Laboratory, USA

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 (đã bảo vệ cơ sở)
2. Nguyễn Thị Thùy Nhung	2014	Nguyễn Văn Liễn
3. Nguyễn Minh Vương	2014	Nguyễn Huy Việt, Nguyễn Việt Hưng

Biến động nhân sự trong năm 2017:

- CN. Đỗ Ngọc Hà, cán bộ hợp đồng, chấm dứt hợp đồng từ 01/6/2017.
- CN. Phạm Văn Hoàng, ký hợp đồng từ 01/6/2017.
- TS. Lê Duy Mạnh, cán bộ biên chế, chấm dứt hợp đồng từ 01/7/2017, chuyển công tác sang Đại học Duy Tân.
- TS. Phạm Tuấn Anh, cán bộ hợp đồng, Postdoc tại Lawrence Livermore National Lab, USA, chấm dứt hợp đồng từ 1/7/2017.
- TS. Vũ Thúy Hương, cán bộ hợp đồng, tốt nghiệp TS tại ĐH Maryland, College Park, USA, chấm dứt hợp đồng từ 1/7/2017.
- GS.TSKH Nguyễn Ái Việt mất ngày 12/9/2017.

Công tác nước ngoài:

- TS. Nguyễn Việt Hưng: Đại học Louvain, Bỉ.

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

- GS. Paul A. Pearce (University of Melbourne, Australia), 9-16/9/2017.

4. Các đề tài nghiên cứu

Các đề tài do cán bộ Trung tâm chủ nhiệm:

4.1. Đề tài NCCB thuộc Quỹ Nafosted: 05 đề tài

- “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, Đã nghiệm thu.
- “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.
- “Động lực học và hành xử pha của các polymer sinh học trong các mô hình đơn giản”, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 4/2017-4/2019.

4.2. Đề tài cơ sở cho cán bộ trẻ: 01 đề tài

- “Mô hình mối liên hệ giữa nhịp tim và áp suất bơm máu khi thay đổi”, Chủ nhiệm: Lê Duy Mạnh, Thời gian thực hiện: 2017.

4.3. Đề tài cơ sở chọn lọc: 01 đề tài

- “Ứng dụng phương pháp T-matrix trong nghiên cứu các tính chất truyền dẫn điện tử của vòng lượng tử (quantum ring) dựa trên graphene”, Chủ nhiệm: Đinh Thị Diệu Linh, Thời gian thực hiện: 2017.

4.4. Đề tài cấp cơ sở: 01 đề tài

- “Nghiên cứu sự hình thành sợi amyloid bằng phương pháp mô phỏng với mô hình đơn giản hóa”, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 2017.

5. Công bố khoa học

Trong thời gian 11/2016 - 11/2017, 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:

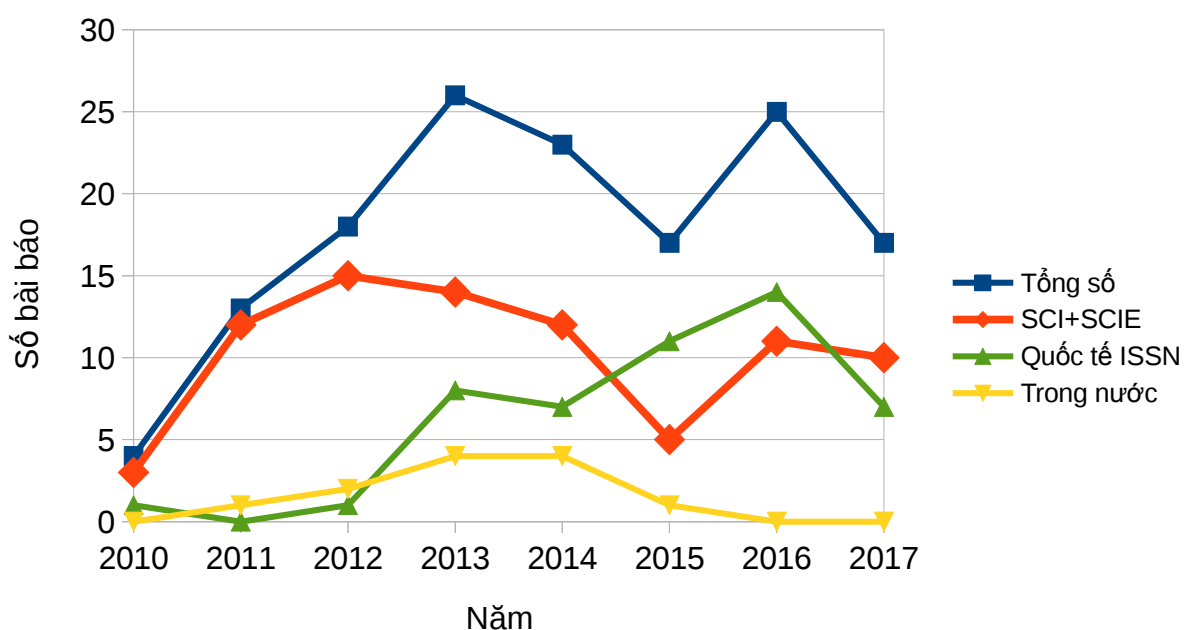
- Bài báo trên tạp chí SCI: 8 bài
- Bài báo trên tạp chí SCIE: 2 bài
- Bài báo quốc tế không thuộc ISI, có mã ISSN/ISBN: 7 bài

Số bài báo SCI/SCIE trên tổng số biên chế và hợp đồng: $10/11 = 0.91$

Số bài báo SCI/SCIE trên số biên chế: $6/6=1$ 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	2017	2016	2015	2014	2013	2012
Bài báo SCI/SCIE	10	11	5	12	14	15
Bài báo quốc tế không thuộc ISI, có mã ISSN/ISBN	7	14	11	7	8	1
Bài báo trong nước			1	2	4	2
Tổng số:	17	25	17	21	26	18



Danh sách các bài báo: xem Phụ lục.

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

- Thông kê theo tên tác giả là cán bộ biên chế và hợp đồng thuộc trung tâm:

TT	Họ và tên	Bài báo SCI	Bài báo SCIE	Bài báo quốc tế không thuộc ISI	Bài báo trong nước	Tổng số
1	Phan Đức Anh	2				2
2	Trịnh Xuân Hoàng	1				1
3	Nguyễn Thị Thùy Nhung	1				1
4	Đỗ Thị Nga	2		1		3
5	Nguyễn Huy Việt	2				2
6	Nguyễn Ái Việt	1		6		7

- Thông kê theo tên tác giả là cộng tác viên của trung tâm:

TT	Họ và tên	Bài báo SCI	Bài báo SCIE	Bài báo quốc tế không thuộc ISI	Bài báo trong nước	Tổng số
1	Nguyễn Văn Liễn	1				1
2	Lê Duy Mạnh	1				1
3	Nguyễn Mạnh Thường	2	2			4

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

- Hội nghị Vật lý lý thuyết lần thứ 42 (NCTP-42), Cần Thơ, 31/7-4/8/2017: Nguyễn Ái Việt, Trịnh Xuân Hoàng (báo cáo miệng), Nguyễn Huy Việt, Nguyễn Thị Thùy Nhung (báo cáo miệng), Đinh Thị Diệu Linh (báo cáo treo).
- Hội thảo quốc tế “International Workshop on Multiscale Simulations in Complex Biomolecular Systems: Linking Computations to Experimental Validation”, Hà Nội, 11-12/4/2017: Trịnh Xuân Hoàng (báo cáo mời).
- Lớp học và Hội thảo quốc tế “ICTP Asian Network School and Workshop on Complex Condensed Matter Systems”, Hà Nội, 20-24/11/2017: Trịnh Xuân Hoàng, Nguyễn Huy Việt, Nguyễn Thị Thùy Nhung.

7. Đào tạo:

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

- Trịnh Xuân Hoàng: giảng dạy môn Vật lý thống kê
- Nguyễn Huy Việt: giảng dạy môn Điện động lực học

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

7.3. Hướng dẫn tốt nghiệp:

- Trịnh Xuân Hoàng: 01 NCS (đã bảo vệ cơ sở).

8. Các hoạt động khác:

- Tổ chức Hội nghị Vật lý lý thuyết toàn quốc lần thứ 42 (Cần Thơ, 8/2017): Nguyễn Ái Việt (Chủ tịch Hội nghị), Trịnh Xuân Hoàng (Trưởng Ban tổ chức).
- Tổ chức Lớp học và Hội thảo quốc tế “ICTP Asian Network School and Workshop on Complex Condensed Matter Systems”, Hà Nội, 20-24/11/2017: Trịnh Xuân Hoàng

(Trưởng Ban tổ chức địa phương).

- Tổ chức 5 buổi seminar về vật lý lý thuyết và vật lý tính toán tại Viện Vật lý.
- Tham gia ngày Vật lý lý thuyết tại Tam Đảo, Vĩnh Phúc (1/4/2017).

9. Góp ý đề xuất cho Lãnh đạo Viện:

- Internet ở tầng 1 nhà 2H quá chậm.
- Viện cần kiến nghị VAST công hóa mương thoát nước bên cạnh nhà 2H để giảm ô nhiễm.
- Đề nghị Viện can thiệp các vụ đốt rác gây ô nhiễm không khí.

10. Thi đua khen thưởng:

Đề nghị Viện Vật lý xét các danh hiệu:

- Tập thể lao động xuất sắc:
- 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
 - Nguyễn Huy Việt
- Giấy khen của Viện Vật lý:
 - Nguyễn Thị Thùy Nhung
- Lao động tiên tiến:
 - Trịnh Xuân Hoàng
 - Nguyễn Việt Hưng
 - Đỗ Thị Nga
 - Nguyễn Thị Thùy Nhung
 - Nguyễn Huy Việt
 - Đinh Thị Diệu Linh
 - Phạm Văn Hoàng

Phụ lục
Công bố khoa học của Trung tâm Vật lý tính toán
trong thời gian 11/2016 – 11/2017

Trên tạp chí SCI

1. Tuan Anh Pham, Bay V. Tran, Manh-Thuong Nguyen, and Meike Stöhr Chiral-Selective Formation of 1D Polymers Based on Ullmann-Type Coupling: The Role of the Metallic Substrate, *SMALL* **13**, 1603675 (2017); DOI: [10.1002/sml.201603675](https://doi.org/10.1002/sml.201603675)
2. Anh D. Phan, Nghia C. Do, and Do T. Nga, Thermal-Induced Stress of Plasmonic Magnetic Nanocomposites, *Journal of the Physical Society of Japan* **86**, 084401 (2017); DOI: [10.7566/JPSJ.86.084401](https://doi.org/10.7566/JPSJ.86.084401)
3. Manh-Thuong Nguyen and Pham Nam Phong, Accelerating Dynamics of H on Graphene by Coadsorbates, *Journal of Physical Chemistry A* **121**, 5520 (2017); DOI: [10.1021/acs.jpca.7b02577](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b02577)
4. H Chau Nguyen, Nhung T T Nguyen, and V Lien Nguyen, On the density of states of circular graphene quantum dots, *Journal of Physics: Condensed Matter* **29**, 405301 (2017); DOI: [10.1088/1361-648X/aa7efd](https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa7efd)
5. Nguyen Ba Hung, Duy-Manh Le, and Trinh X. Hoang, Sequence dependent aggregation of peptides and fibril formation, *Journal of Chemical Physics* **147**, 105102 (2017); DOI: [10.1063/1.5001517](https://doi.org/10.1063/1.5001517)
6. Anh D. Phan, Do T. Nga, Nguyen A. Viet, Theoretical model for plasmonic photothermal response of gold nanostructures solutions, *Optics Communications* **410**, 108–111 (2017); DOI: [10.1016/j.optcom.2017.10.008](https://doi.org/10.1016/j.optcom.2017.10.008)
7. Huy-Viet Nguyen and Thinh H. Pham, Structural and electronic properties of defect-free and defect-containing polypropylene: a computational study by van der Waals density-functional method, *Physica Status Solidi B* **2017**, 1700036 (2017); DOI: [10.1002/pssb.201700036](https://doi.org/10.1002/pssb.201700036)
8. P Giannozzi, O Andreussi, T Brumme, O Bunau, M Buongiorno Nardelli, ... H-V Nguyen, ... T Thonhauser, P Umari, N Vast, X Wu and S Baroni, Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO, *Journal of Physics: Condensed Matter* **29**, 465901 (2017); DOI: [10.1088/1361-648X/aa8f79](https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79)

Trên tạp chí SCIE

1. Kanchan Ulman, Manh-Thuong Nguyen, Nicola Seriani, Simone Piccinin, and Ralph Gebauer, A Unified Picture of Water Oxidation on Bare and Gallium Oxide-Covered Hematite from Density Functional Theory, *ACS CATALYSIS* **7**, 1793-1804 (2017); DOI: [10.1021/acscatal.6b03162](https://doi.org/10.1021/acscatal.6b03162)
2. Manh-Thuong Nguyen and Pham Nam Phong, Atomic Transport at Charged Graphene: Why Hydrogen and Oxygen Are So Different, *Chemistry Select* **2**, 2797 (2017); DOI: [10.1002/slct.201700484](https://doi.org/10.1002/slct.201700484)

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

1. Do T. Nga, Do C. Nghia, Chu V. Ha, Plasmonic properties of graphene-based nanostructures in terahertz waves, *Journal of Science: Advanced Materials and Devices* **2**, 371-377 (2017), DOI: [10.1016/j.jsamd.2017.07.001](https://doi.org/10.1016/j.jsamd.2017.07.001)
2. Duong Thi Ha, Dinh Thi Thuy, Vo Thi Hoa, Tran Thi Thanh Van, Nguyen Ai Viet, On the theory of three types of polaritons (phonon, exciton and plasmon polaritons), *Journal of Physics: Conference Series* **865**, 012007 (2017); DOI: [10.1088/1742-6596/865/1/012007](https://doi.org/10.1088/1742-6596/865/1/012007)

3. N M Hoa, T H Nhung, T T Thao, L T Theu, N A Viet, On the concentration dependence of metallic nano-particles in enhanced Forster resonance energy transfer, *Journal of Physics: Conference Series* **865**, 012005 (2017); DOI: [10.1088/1742-6596/865/1/012005](https://doi.org/10.1088/1742-6596/865/1/012005)
4. Nguyen Van Hoa, Le Van Xuan, Nguyen Tri Lan and Nguyen Ai Viet, On the mass enhancement of black body background fluctuations, *Journal of Physics: Conference Series* **865**, 012013 (2017); DOI: [10.1088/1742-6596/865/1/012013](https://doi.org/10.1088/1742-6596/865/1/012013)
5. 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 entanglement of composite bosons, *Journal of Physics: Conference Series* **865**, 012002 (2017); DOI: [10.1088/1742-6596/865/1/012002](https://doi.org/10.1088/1742-6596/865/1/012002)
6. Ngo Gia Vinh, Man Van Ngu, Nguyen Tri Lan, Luu Thi Kim Thanh, Nguyen Thi Dung and Nguyen Ai Viet, Some applications using the connection between q-deformed harmonic oscillator and symmetric and asymmetric potentials *Journal of Physics: Conference Series* **865**, 012006 (2017); DOI: [10.1088/1742-6596/865/1/012006](https://doi.org/10.1088/1742-6596/865/1/012006)
7. Le Van Xuan, Nguyen Khac Ngoc, Nguyen Tri Lan and Nguyen Ai Viet, A non-extensive thermodynamic theory of ecological systems, *Journal of Physics: Conference Series* **865**, 012012 (2017); DOI: [10.1088/1742-6596/865/1/012012](https://doi.org/10.1088/1742-6596/865/1/012012)