

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

BÁO CÁO TỔNG KẾT CÔNG TÁC NĂM 2019

Trung tâm Vật lý tính toán

Hà Nội, 11/2019

1. Giới thiệu

- Địa điểm: 10 Đào Tấn, Ba Đình, Hà Nội
- Điện thoại, Fax: +84 24 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 5 biên chế (2 PGS, 2 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 của các hệ lai hóa nano-sinh học, cảm biến sinh học.
- Phát triển các phương pháp tính toán, mô phỏng trong vật lý. Nghiên cứu về tính toán lượng tử.

- Cơ sở vật chất:

- Cụm máy tính: 1 nút chủ + 5 nút tính toán (120 cores).

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, NCVCC
2. Nguyễn Việt Hưng TS, NCV
3. Đỗ Thị Nga TS, NCV
4. Nguyễn Thị Thùy Nhung ThS, NCV
5. Nguyễn Huy Việt PGS TS, NCV

3.2. Cán bộ hợp đồng:

1. Lê Thế Anh TS, NCV (ký HĐ từ 6/2019)
2. Phạm Văn Hoàng CN, NCV

3.4. Cộng tác viên:

1. Phan Đức Anh TS, Đại học Phenikaa
2. Nguyễn Như Đạt PGS TS, Đại học Duy Tân
3. Nguyễn Văn Liễn GS TSKH, Viện Vật lý Y-Sinh học, Tp. HCM
4. Lê Duy Mạnh TS, Đại học Duy Tân
5. Tô Thị Thảo TS, Học viện Công nghệ Bưu chính viễn thông
6. Nguyễn Thế Toàn PGS TS, ĐH Khoa học Tự nhiên Hà Nội
7. Nguyễn Mạnh Thường TS, Pacific Northwest National Laboratory, USA
8. Bùi Phương Thúy TS, Đại học Duy Tân

3.5. Nghiên cứu sinh:

Họ và tên	Khóa	Người hướng dẫn
1. Nguyễn Thị Thùy Nhung	2014	Nguyễn Văn Liễn (đã bảo vệ cơ sở)
2. Nguyễn Minh Vương	2014	Nguyễn Huy Việt, Nguyễn Việt Hưng

Biến động nhân sự trong năm 2019:

- Lê Thế Anh: ký hợp đồng với Viện Vật lý từ tháng 6/2019.

Công tác nước ngoài:

- Nguyễn Việt Hưng: Đại học Louvain, Bỉ (dài hạn).
- Trịnh Xuân Hoàng: Viện Vật lý Quốc gia, Đại học Philippines Diliman, (2/11 - 12/11/2019)

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

- GS. Philippe Derreumaux (Paris Diderot University, France), 8-13/8/2019.

4. Các đề tài nghiên cứu

Các đề tài do cán bộ Trung tâm chủ nhiệm:

4.1. Đề tài NCCB thuộc Quỹ Nafosted: 04 đề tài

- “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: 5/2016-5/2019.
- “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: 8/2016-8/2019, Đã nộp báo cáo nghiệm thu.
- “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, Đã nghiệm thu Đạt.
- “Mô hình vật lý và mô phỏng cấu trúc nano plasmonic trong ứng dụng quang nhiệt và khai thác năng lượng mặt trời”, Chủ nhiệm: Đỗ Thị Nga, Thời gian thực hiện: 4/2019 - 4/2021.

4.2. Đề tài hợp tác quốc tế: 01 đề tài

- Nhiệm vụ hợp tác quốc tế với Liên bang Nga “Nghiên cứu chế tạo và tính chất của vật liệu nano tinh thể SiGe: thực nghiệm và mô phỏng”, Chủ nhiệm: Nguyễn Huy Việt, Thời gian thực hiện: 1/2018-12/2019.

4.3. Đề tài cơ sở chọn lọc: 01 đề tài

- “Nghiên cứu trạng thái ngưng tụ của polymer bán linh động”, Chủ nhiệm: Phạm Văn Hoàng, Thời gian thực hiện: 2019.

4.4. Đề tài cấp cơ sở: 03 đề tài

- Đề tài cơ sở Viện Vật lý: “Biến đổi tính chất điện và từ của hệ 2 chiều g-C₄N₃ bằng nguyên tử hấp thụ”, Chủ nhiệm: Nguyễn Huy Việt, Thời gian thực hiện: 1/2019 - 12/2019.
- Đề tài cơ sở Trung tâm Vật lý quốc tế: “Nghiên cứu tính toán và mô phỏng về các hệ phân tử sinh học và các hệ nano”, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 1/2019 - 12/2019.
- Đề tài hỗ trợ hoạt động khoa học cho NCVCC năm 2019, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân

Hoàng, Thời gian thực hiện: 1/2019 – 12/2019.

5. Công bố khoa học

Trong thời gian 11/2018 - 11/2019, tổng số bài báo khoa học của Trung tâm là 11 bài (chỉ tính các bài báo có ghi địa chỉ Viện Vật lý), bao gồm:

- Số bài trên tạp chí SCI: 7 bài
- Số bài trên tạp chí SCIE: 2 bài
- Số bài trong nước: 2 bài

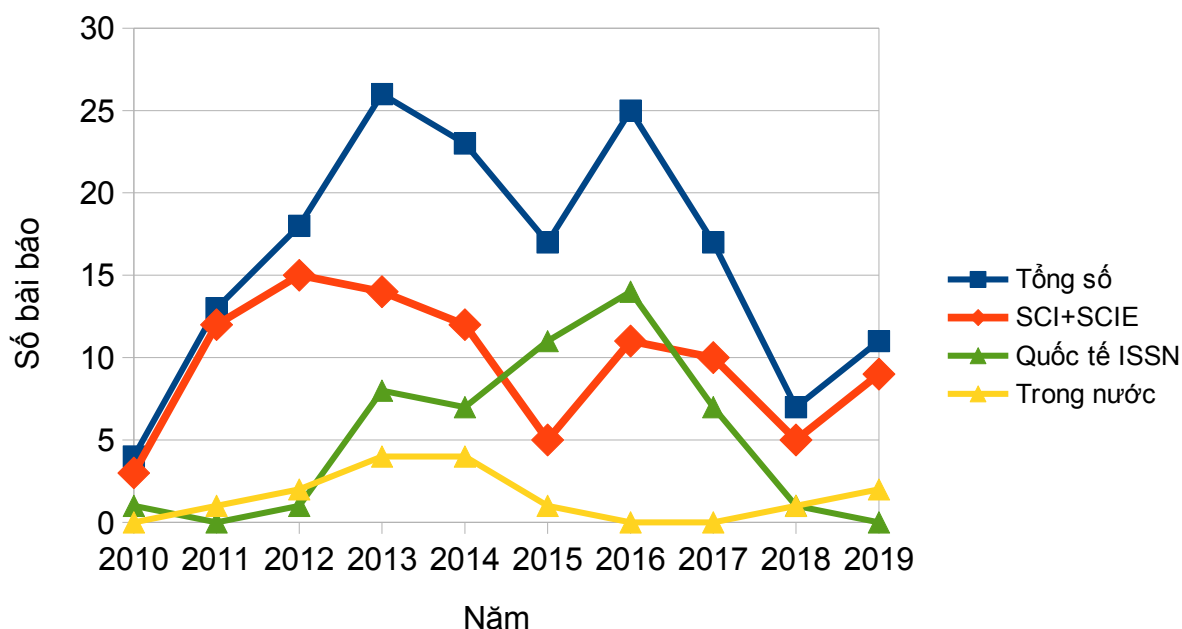
Số bài báo SCI/SCIE trên tổng số biên chế và hợp đồng: $9/7 = 1.29$

Số bài báo SCI/SCIE trên số biên chế: $6/5=1.2$ 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	2019	2018	2017	2016	2015	2014	2013
Bài báo SCI/SCIE	9	5	10	11	5	12	14
Bài báo quốc tế không thuộc ISI, có mã ISSN/ISBN	0	1	7	14	11	7	8
Bài báo trong nước	2	1			1	2	4
Tổng số:	11	7	17	25	17	21	26

Danh sách các bài báo: xem Phụ lục 1.



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	Lê Thế Anh	2				2
2	Trịnh Xuân Hoàng	3	2		1	6
3	Đỗ Thị Nga				1	1
4	Nguyễn Huy Việt	1				1

- 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	Phan Đức Anh	1	1			2
2	Nguyễn Như Đạt	1				1

6. Tham gia và trình bày báo cáo tại các hội nghị khoa học trong nước và quốc tế:

- Hội nghị Vật lý lý thuyết Việt Nam lần thứ 44 (VCTP-44), Đồng Hới, 29/7-1/8/2019: Trịnh Xuân Hoàng (báo cáo miệng), Đỗ Thị Nga (báo cáo treo).
- Lớp học quốc tế ICTP Asian Network School and Workshop on Complex Condensed Matter Systems 2019, Philippines, 4-8/11/2019: Trịnh Xuân Hoàng (đọc bài giảng).

7. Đào tạo:

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

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

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

- Trịnh Xuân Hoàng: Statistical Mechanics, Đại học USTH

7.3. Hướng dẫn tốt nghiệp:

- Trịnh Xuân Hoàng: 03 luận văn cao học.
- Nguyễn Huy Việt: đồng hướng dẫn 02 luận văn cao học.

8. Các hoạt động khác:

- Tổ chức Hội nghị Vật lý lý thuyết Việt Nam lần thứ 44 (Đồng Hới, 7/2019): Trịnh Xuân Hoàng (Trưởng Ban tổ chức).
- Tổ chức và tham gia 12 buổi seminar về vật lý lý thuyết và vật lý tính toán.
- Tham gia ngày Vật lý lý thuyết.
- Tham gia Lễ Kỷ niệm 50 năm thành lập Viện Vật lý.

9. Góp ý đề xuất cho Lãnh đạo Viện:

- Mua bục để máy chiếu cho phòng họp tầng 6.
- Viện nên có mẫu Excel để tính điểm kết quả lao động cho thuận tiện.

10. 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:
 - Nguyễn Huy Việt
- Giấy khen của Viện Vật lý:
 - Đỗ Thị Nga
- Lao động tiên tiến:
 - Phạm Văn Hoàng
 - Trịnh Xuân Hoàng
 - Đỗ Thị Nga
 - Nguyễn Thị Thùy Nhung
 - Nguyễn Huy Việt

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 11/2018 – 11/2019

Trên tạp chí SCI

1. Nguyen Nhu Dat, Le Thanh Hai, LO-Phonon-Limited Electron Mobility in a Core-Shell Polar Semiconductor Quantum Wire, *Brazilian Journal of Physics* 49, 628-635 (2019); DOI: [10.1007/s13538-019-00692-3](https://doi.org/10.1007/s13538-019-00692-3)
2. Hiroshi Fukui, Le The Anh, Masahiro Wada, Nozomu Hiraoka, Toshiaki Iitaka, Naohisa Hirao, Yuichi Akahama, and Tetsuo Irifune, Electronic structure of dense solid oxygen from insulator to metal investigated with X-ray Raman scattering, *Proceedings of the National Academy of Sciences of USA* 116 (43), 21385-21391 (2019); DOI: [10.1073/pnas.1905771116](https://doi.org/10.1073/pnas.1905771116)
3. Tatjana Skrbic, Trinh Xuan Hoang, Amos Maritan, Jayanth R. Banavar and Achille Giacometti, Local symmetry determines the phases of linear chains: a simple model for the self-assembly of peptides, *Soft Matter* 15, 5596-5613 (2019); DOI: [10.1039/c9sm00851a](https://doi.org/10.1039/c9sm00851a)
4. Le The Anh, Masahiro Wada, Hiroshi Fukui, Tsutomu Kawatsu, Toshiaki Iitaka, First-principles calculations of the epsilon phase of solid oxygen, *Scientific Reports* 9, 8731 (2019); DOI: [10.1038/s41598-019-45314-9](https://doi.org/10.1038/s41598-019-45314-9)
5. H. Chau Nguyen, Huy-Viet Nguyen, and Otfried G uhne, Geometry of Einstein-Podolsky-Rosen Correlations, *Physical Review Letters* 122, 240401 (2019); DOI: [10.1103/PhysRevLett.122.240401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.240401)
6. Anh D. Phan, Trinh X. Hoang, The pH-dependent electrostatic interaction of a metal nanoparticle with the MS2 virus-like particles, *Chemical Physics Letters* 730, 84-88 (2019); DOI: [10.1016/j.cplett.2019.05.045](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2019.05.045)
7. Tatjana Škrbić, Trinh X. Hoang, Amos Maritan, Jayanth R. Banavar, Achille Giacometti, The elixir phase of chain molecules, *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* 87 (3), 176-184 (2019); DOI: [10.1002/prot.25619](https://doi.org/10.1002/prot.25619)

Trên tạp chí SCIE

1. Trinh X. Hoang, Ha T. H. Mai, Anthony B. Brennan & Ly Le, Effects of inter-organism interactions in biofouling on microtopographic surfaces, *Biofouling* 35 (6), 684-695 (2019); DOI: [10.1080/08927014.2019.1650918](https://doi.org/10.1080/08927014.2019.1650918)
2. Anh D. Phan, Justyna Knapik-Kowalczyk, Marian Paluch, Trinh X. Hoang, and Katsunori Wakabayashi, Theoretical Model for the Structural Relaxation Time in Coamorphous Drugs, *Molecular Pharmaceutics* 16, 2992–2998 (2019); DOI: [10.1021/acs.molpharmaceut.9b00230](https://doi.org/10.1021/acs.molpharmaceut.9b00230)

Trên tạp chí quốc gia

1. Do Thi Nga, Microcanonical statistical model for fragmentation of small neutral carbon clusters, *Communications in Physics* 29 (3SI), 313-324 (2019); DOI: 10.15625/0868-3166/29/3SI/14333
2. Nguyen Ba Hung, Trinh Xuan Hoang, Sampling the folding transition state ensemble in a tube-like model of protein, *Communications in Physics* 29 (2), 129-139 (2019); DOI: 10.15625/0868-3166/29/2/13670