

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

BÁO CÁO TỔNG KẾT CÔNG TÁC NĂM 2021

Trung tâm Vật lý tính toán

Hà Nội, 11/2021

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, 3 TS).

- 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:

- Khoa học vật liệu tính toán: Phát triển và ứng dụng các phương pháp tính toán từ nguyên lý ban đầu trong nghiên cứu vật liệu.
- Vật lý nano: Nghiên cứu lý thuyết và tính toán về các hệ nano có tiềm năng ứng dụng cao trong công nghệ điện tử, quang tử, năng lượng và khoa học sự sống.
- Vật lý sinh học và chất mềm: Nghiên cứu lý thuyết và mô phỏng về các tính chất động lực học và cân bằng của các phân tử sinh học.

- Cơ sở vật chất:

- Cụm máy tính: 1 nút chủ + 9 nút tính toán (280 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. Chu Thùy Anh | TS, NCVC |
| 2. Trịnh Xuân Hoàng | PGS TS, NCVCC |
| 3. Đỗ Thị Nga | TS, NCVC |
| 4. Nguyễn Thị Thùy Nhung | TS, NCV |
| 5. Nguyễn Huy Việt | PGS TS, NCVCC |

3.2. Cộng tác viên:

- | | |
|-----------------------|--|
| 1. Phan Đức Anh | TS, Đại học Phenikaa |
| 2. Nguyễn Như Đạt | PGS TS, Đại học Duy Tân |
| 3. Nguyễn Việt Hưng | TS, Đại học Công giáo Louvain, Bỉ |
| 4. Nguyễn Văn Liên | GS TSKH, Viện Vật lý Y-Sinh học, Tp. HCM |
| 5. Lê Duy Mạnh | TS, Đại học Duy Tân |
| 6. Tô Thị Thảo | TS, Học viện Công nghệ Bưu chính viễn thông |
| 7. Nguyễn Thế Toàn | PGS TS, ĐH Khoa học Tự nhiên Hà Nội |
| 8. Nguyễn Mạnh Thường | TS, Pacific Northwest National Laboratory, USA |
| 9. Bùi Phương Thúy | TS, Đại học Duy Tân |

3.5. Nghiên cứu sinh:

- | <i>Họ và tên</i> | <i>Khóa</i> | <i>Người hướng dẫn</i> |
|----------------------|-------------|-----------------------------------|
| 1. Nguyễn Minh Vương | 2014 | Nguyễn Huy Việt, Nguyễn Việt Hưng |

Biến động nhân sự trong năm 2021:

- TS. Chu Thùy Anh chuyển vào Trung tâm Vật lý tính toán.
- TS. Nguyễn Việt Hưng chấm dứt biên chế tại Viện Vật lý.

4. Các đề tài nghiên cứu

Các đề tài do cán bộ Trung tâm chủ nhiệm:

| TT | Tên đề tài, nhiệm vụ | Chủ nhiệm | Kết quả | Thời gian | |
|---------------------------------|--|---------------------------|--|-----------|----------|
| | | | | Bắt đầu | Kết thúc |
| I Đề tài NAFOSTED | | | | | |
| 1 | Mô hình vật lý và mô phỏng cấu trúc nano plasmonic trong ứng dụng quang nhiệt và khai thác năng lượng mặt trời | TS. Đỗ Thị Nga | Đã nghiệm thu | 4/2019 | 4/2021 |
| 2 | Nghiên cứu lý thuyết và mô phỏng về các phân tử sinh học và sự bám dính sinh học | PGS. TS. Trịnh Xuân Hoàng | Đã công bố 04 bài báo ISI, 01 bài báo VAST 02, 04 báo cáo hội nghị | 4/2020 | 4/2022 |
| II Đề tài cấp cơ sở | | | | | |
| 1 | Đề tài cấp cơ sở trung tâm: Nghiên cứu tính chất plasmonic của một số cấu trúc nano phức hợp và ứng dụng | TS. Đỗ Thị Nga | Đã công bố 01 bài báo trong nước | 1/2021 | 12/2021 |
| 2 | Đề tài cơ sở trung tâm Vật lý Quốc tế: Ứng dụng các phương pháp mô hình hóa và tính toán trong nghiên cứu các hệ sinh học và vật liệu nano | PGS. TS. Trịnh Xuân Hoàng | 01 bài ISI đã được chấp nhận đăng | 1/2021 | 12/2021 |
| III Đề tài cấp cơ sở trẻ | | | | | |
| 1 | Nghiên cứu sự hình thành các pha bó chặt của polymer bán linh động | TS. Nguyễn Thị Thùy Nhung | 01 báo cáo hội nghị | 1/2021 | 12/2021 |
| IV Nhiệm vụ hỗ trợ NCVCC | | | | | |
| 1 | Hỗ trợ hoạt động nghiên cứu khoa học cho nghiên cứu viên cao cấp năm 2021 | PGS. TS. Trịnh Xuân Hoàng | Đang hoàn thiện bài báo | 1/2021 | 12/2021 |
| 2 | Hỗ trợ hoạt động nghiên cứu khoa học cho nghiên cứu viên cao cấp năm 2021 | PGS. TS. Nguyễn Huy Việt | Đang hoàn thiện bài báo | 1/2021 | 12/2021 |

5. Công bố khoa học

Trong thời gian 1/12/2020 - 30/11/2021, tổng số bài báo khoa học của Trung tâm là 08 bài, bao gồm:

- Số bài trên tạp chí SCIE: 4 bài
- Số bài báo trong nước: 4 bài

Số bài báo SCIE trên tổng số biên chế: $3/5 = 0.6$ bài/người (chỉ tính bài của cán bộ biên chế)

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

| Năm | 2021 | 2020 | 2019 | 2018 | 2017 | 2016 | 2015 | 2014 |
|----------------------|----------|----------|-----------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| Bài báo SCIE | 4 | 4 | 9 | 5 | 10 | 11 | 5 | 12 |
| Bài báo quốc tế ISSN | | 1 | 0 | 1 | 7 | 14 | 11 | 7 |
| Bài báo trong nước | 4 | | 2 | 1 | | | 1 | 2 |
| Tổng số: | 8 | 5 | 11 | 7 | 17 | 25 | 17 | 21 |

Danh sách các bài báo: xem Phụ lục.

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

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

| TT | Họ và tên | Bài báo SCIE | Bài báo quốc tế ISSN | Bài báo trong nước | Tổng số |
|----|-----------------------|--------------|----------------------|--------------------|---------|
| 1 | Trịnh Xuân Hoàng | 3 | | 1 | 4 |
| 2 | Đỗ Thị Nga | | | 2 | 2 |
| 3 | Nguyễn Thị Thùy Nhung | | | 2 | 2 |
| 4 | Nguyễn Huy Việt | | | 1 | 1 |

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

| TT | Họ và tên | Bài báo SCIE | Bài báo quốc tế ISSN | Bài báo trong nước | Tổng số |
|----|-----------------|--------------|----------------------|--------------------|---------|
| 1 | Nguyễn Như Đạt | 1 | | | 1 |
| 2 | Bùi Phương Thúy | 1 | | | 1 |
| 3 | Tô Thị Thảo | | | 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 46 (VCTP-46), Hà Nội, 4-6/10/2021: Trịnh Xuân Hoàng (báo cáo treo), Nguyễn Thị Thùy Nhung (báo cáo treo), Chu Thùy Anh (báo cáo treo).

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. Hướng dẫn cao học, NCS:

- Đỗ Thị Nga: 01 luận văn cao học (đã bảo vệ).

8. Các hoạt động khác:

- Tổ chức Hội nghị Vật lý lý thuyết Việt Nam lần thứ 46 (Hà Nội, 4-6/10/2021): Trịnh Xuân Hoàng (Trưởng Ban tổ chức).

9. Góp ý đề xuất cho Lãnh đạo Viện:

Không.

10. Đánh giá, xếp loại viên chức:

Tính điểm theo các tiêu chí đánh giá kết quả lao động của viên chức Viện Vật lý và kết quả đánh giá, xếp loại chất lượng viên chức của Trung tâm Vật lý tính toán:

| STT | Họ và tên | Điểm KQLĐ | Tiêu chí khuyến khích | Tự đánh giá | Tập thể đánh giá |
|-----|-----------------------|-----------|-----------------------|------------------------------|------------------------------|
| 1 | Chu Thùy Anh | 2.34 | | Hoàn thành tốt nhiệm vụ | Hoàn thành tốt nhiệm vụ |
| 2 | Trịnh Xuân Hoàng | 47 | Đạt | Hoàn thành tốt nhiệm vụ | Hoàn thành xuất sắc nhiệm vụ |
| 3 | Đỗ Thị Nga | 35.22 | | Hoàn thành xuất sắc nhiệm vụ | Hoàn thành xuất sắc nhiệm vụ |
| 4 | Nguyễn Thị Thùy Nhung | 10.3 | | Hoàn thành tốt nhiệm vụ | Hoàn thành tốt nhiệm vụ |
| 5 | Nguyễn Huy Việt | 8.8 | | Hoàn thành nhiệm vụ | Hoàn thành tốt nhiệm vụ |

11. 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:
- Chiến sỹ thi đua của Viện Vật lý:
 - Trịnh Xuân Hoàng
- Giấy khen của Viện Vật lý:
 - Đỗ Thị Nga
- Lao động tiên tiến:
 - Chu Thùy Anh
 - Trịnh Xuân Hoàng
 - Đỗ Thị Nga
 - Nguyễn Thị Thùy Nhung
 - Nguyễn Huy Việt

Giám đốc Trung tâm

Trịnh Xuân Hoàng

Phụ lục
Công bố khoa học của Trung tâm Vật lý tính toán
trong thời gian 1/12/2020 – 30/11/2021

Trên tạp chí SCIE

1. Tatjana Škrbić, Trinh Xuan Hoang, Achille Giacometti, Amos Maritan, and Jayanth R. Banavar, Spontaneous dimensional reduction and ground state degeneracy in a simple chain model, *Physical Review E* **104**, L012101 (2021), DOI: [10.1103/PhysRevE.104.L012101](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.104.L012101)
2. Tatjana Škrbić, Trinh Xuan Hoang, Achille Giacometti, Amos Maritan, and Jayanth R Banavar, Marginally compact phase and ordered ground states in a model polymer with side spheres, *Physical Review E* **104**, L012501 (2021), DOI: [10.1103/PhysRevE.104.L012501](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.104.L012501)
3. Phuong Thuy Bui and Trinh Xuan Hoang, Hydrophobic and electrostatic interactions modulate protein escape at the ribosomal exit tunnel, *Biophysical Journal* **120**, 4798-4808 (2021), DOI: [10.1016/j.bpj.2021.09.027](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2021.09.027)
4. Nguyen Thi Thuc Hien, Le Xuan Hung, Pham Thu Nga, and Nguyen Nhu Dat, Optical Properties of Ternary Alloyed CdSe_{1-x}Tex Quantum Dots, *Journal of Electronic Materials* **50**, 1275 (2021), DOI: [10.1007/s11664-020-08667-w](https://doi.org/10.1007/s11664-020-08667-w)

Trên tạp chí trong nước thuộc danh mục VAST2

1. Do Thi Nga, Le Ba Nam, To Thi Thao, and Vu Thi Thuy Duong, Plasmonic photothermal heating of gold nanoshell solutions, *Communications in Physics* **30**, 363-372 (2020), DOI: [10.15625/0868-3166/30/4/15152](https://doi.org/10.15625/0868-3166/30/4/15152)
2. Nhung T. T. Nguyen and Trinh Xuan Hoang, Aggregation of zoospores on sharklet microtopographic surfaces, *Communications in Physics* **31**, 279-287 (2021), DOI: [10.15625/0868-3166/15668](https://doi.org/10.15625/0868-3166/15668)
3. Do Thi Nga, Vu Van Huy, and Chu Viet Ha, Optical properties of silver nanowires conjugated with protein, *Communications in Physics* **31**, 313-320 (2021), DOI: [10.15625/0868-3166/15823](https://doi.org/10.15625/0868-3166/15823)
4. Tran Van Quang, Tran Thi Thuy Duong, Le Thanh Cong, Ngo Ngoc Ha, Nguyen Thi Thuy Nhung and Huy-Viet Nguyen, Unfolding band and absorption energy shift of Si-Ge nano crystals from first-principles calculations, *Communications in Physics* **31**, 219-225 (2021); DOI: [10.15625/0868-3166/14942](https://doi.org/10.15625/0868-3166/14942)