

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

BÁO CÁO TỔNG KẾT CÔNG TÁC NĂM 2022

Trung tâm Vật lý tính toán

Hà Nội, 11/2022

1. Giới thiệu

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

- Vật lý vật liệu nano: các tính chất điện tử và truyền dẫn của vật liệu nano, các cấu trúc nano, các hệ lai hóa nano-sinh học.
- Vật lý sinh học và các chất mềm: các phân tử 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. Chu Thùy Anh | TS |
| 2. Trịnh Xuân Hoàng | PGS TS |
| 3. Đỗ Thị Nga | TS |
| 4. Nguyễn Thị Thùy Nhung | TS |
| 5. Nguyễn Huy Việt | PGS TS |

3.2. Cộng tác viên:

- | | |
|-----------------------|--|
| 1. Phan Đức Anh | TS, Viện nghiên cứu tiên tiến 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 Liễn | GS TSKH, Viện Vật lý Y-Sinh học, Tp. HCM |
| 5. Lê Duy Mạnh | TS, ĐH Duy Tân |
| 6. Tô Thị Thảo | TS, Học viện Công nghệ Bưu chính viễn thông |
| 7. Nguyễn Thế Toàn | PGS TS, ĐH KHTN Hà Nội |
| 8. Nguyễn Mạnh Thường | TS, Pacific Northwest National Laboratory, USA |
| 9. Bùi Phương Thúy | TS, ĐH Duy Tân |

3.4. 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 2022:

Công tác nước ngoài:

4. Các đề tài nghiên cứu

Các đề tài do cán bộ Trung tâm chủ nhiệm:

4.1. Đề tài NCCB thuộc Quỹ Nafosted: 01 đề tài

- “Nghiên cứu lý thuyết và mô phỏng về các phân tử sinh học và sự bám dính sinh học”, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 4/2020-4/2022 (*Quỹ gia hạn đến tháng 4/2023*). Kết quả: Đã công bố 04 bài báo ISI, 01 bài báo VAST 02, 04 báo cáo hội nghị.

4.2. Đề tài thuộc chương trình Vật lý: 01 đề tài

- “Nghiên cứu và định hướng vật liệu để tối ưu hóa bộ hấp thụ năng lượng mặt trời băng thông rộng và hệ chống tia cực tím”, Chủ nhiệm: Đỗ Thị Nga, Thời gian thực hiện: 1/2012-12/2023. Kết quả: đã gửi đăng 01 bài báo trên tạp chí SCI và 01 bài trên tuyển tập Hội nghị.

4.3. Đề tài hỗ trợ hoạt động nghiên cứu khoa học cho nghiên cứu viên cao cấp năm 2022: 02 nhiệm vụ hạng A

- Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 2022-2023
- Chủ nhiệm: Nguyễn Huy Việt, Thời gian thực hiện: 2022-2023

4.4. Đề tài cấp cơ sở trẻ năm 2022: 01 đề tài

- Chủ nhiệm: TS. Nguyễn Thị Thùy Nhung

4.5. Đề tài cấp cơ sở: 02 đề tài

- Đề tài cơ sở trung tâm Vật lý tính toán: “Nghiên cứu mô phỏng các quá trình động lực học của các phân tử sinh học”, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 2022
- Đề tài cơ sở Trung tâm Vật lý quốc tế: “Ứng dụng các phương pháp vật lý tính toán trong nghiên cứu vật liệu nano và các phân tử sinh học”, Chủ nhiệm: Trịnh Xuân Hoàng, Thời gian thực hiện: 2022.

5. Công bố khoa học

Trong thời gian 11/2021 - 11/2022, tổng số bài báo khoa học của Trung tâm là 04 bài (chỉ tính các bài báo có ghi địa chỉ Viện Vật lý), bao gồm:

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

Số bài báo 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 | 2022 | 2021 | 2020 | 2019 | 2018 | 2017 | 2016 | 2015 |
|---|----------|----------|----------|-----------|----------|-----------|-----------|-----------|
| Bài báo SCIE | 7 | 4 | 4 | 9 | 5 | 10 | 11 | 5 |
| Bài báo quốc tế không thuộc SCIE, có mã ISSN/ISBN | | | 1 | | 1 | 7 | 14 | 11 |
| Bài báo trong nước | 2 | 4 | | 2 | 1 | | | 1 |
| Tổng số: | 9 | 8 | 5 | 10 | 7 | 17 | 25 | 17 |

Danh sách các bài báo: xem Phụ lục 1.

Thông kê 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 | 2 | | 1 | 3 |
| 2 | Đỗ Thị Nga | 1 | | | 1 |
| 3 | Nguyễn Thị Thùy Nhung | | | 1 | 1 |
| 4 | Nguyễn Huy Việt | 3 | | 1 | 4 |

- 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 | Phan Đức Anh | 1 | | | 1 |
| 2 | Nguyễn Như Đạt | 1 | | | 1 |
| 3 | Bùi Phương Thúy | | | 1 | 1 |
| 4 | Nguyễn Việt Hưng | 1 | | | 1 |
| 5 | Nguyễn Mạnh Thường | 1 | | | 1 |

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

Tham gia và có báo cáo tại Hội nghị Vật lý lý thuyết Việt Nam lần thứ 47 (Tuy Hòa, 08/2022): Trịnh Xuân Hoàng, Nguyễn Thị Thùy Nhung, Chu Thùy Anh, Đỗ Thị Nga

7. Đào tạo:

7.1. Giảng dạy cho cao học Học viện KH&CN: Nguyễn Huy Việt, Trịnh Xuân Hoàng

7.2. Giảng dạy bên ngoài Học Viện KH&CN: Trịnh Xuân Hoàng (USTH)

7.3. Hướng dẫn tốt nghiệp:

8. Các hoạt động khác:

- Tổ chức Hội nghị Vật lý lý thuyết Việt Nam lần thứ 47 (Tuy Hòa, 8/2022): Trịnh Xuân Hoàng (Trưởng Ban tổ chức).

9. Góp ý đề xuất cho Lãnh đạo Viện:

10. Đánh giá, xếp loại viên chức:

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

| ST T | Họ và tên | Điểm KQLĐ | Tiêu chí khuyến khích | Tự đánh giá | Tập thể đánh giá |
|------|-----------------------|-----------|-----------------------|-------------------------|------------------------------|
| 1 | Chu Thùy Anh | 1.75 | | Hoàn thành tốt nhiệm vụ | Hoàn thành tốt nhiệm vụ |
| 2 | Trịnh Xuân Hoàng | 42.41 | Có | Hoàn thành tốt nhiệm vụ | Hoàn thành xuất sắc nhiệm vụ |
| 3 | Đỗ Thị Nga | 13 | | Hoàn thành tốt nhiệm vụ | Hoàn thành xuất sắc nhiệm vụ |
| 4 | Nguyễn Thị Thùy Nhung | 46.63 | | Hoàn thành tốt nhiệm vụ | Hoàn thành xuất sắc nhiệm vụ |
| 5 | Nguyễn Huy Việt | 37 | | Hoàn thành tốt nhiệm vụ | Hoàn thành xuất sắc 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: Trung tâm Vật lý tính toán
- Chiến sỹ thi đua của Viện Vật lý: Nguyễn Huy Việt
- Giấy khen của Viện Vật lý: Trịnh Xuân Hoàng, Đỗ Thị Nga
- Lao động tiên tiến:
 - Chu Thùy Anh
 - Trịnh Xuân Hoàng
 - Đỗ Thị Nga
 - Nguyễn Thị Thùy Nhung
 - Nguyễn Huy Việt

Phụ lục 1
Công bố khoa học của Trung tâm Vật lý tính toán
trong thời gian 11/2022 – 11/2022

Trên tạp chí SCIE

1. Pham Nam Phong, Nguyen Thi Ngoc, Pham Thanh Lam, Manh-Thuong Nguyen and Huy-Viet Nguyen, From half-metallic to magnetic semiconducting triazine g-C₄N₃: computational designs and insight, *RSC Advances* **11**, 38944–38948 (2021), DOI: [10.1039/d1ra05348e](https://doi.org/10.1039/d1ra05348e)
2. Pham Nam Phong, Huy-Viet Nguyen, Spin gapless semiconductors in antiferromagnetic monolayer HC₄N₃BN under strain, *Computational Materials Science* **203**, 111110 (2022); URL: [10.1016/j.commatsci.2021.111110](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.111110)
3. Nguyen Nhu Dat and Nguyen Thi Thuc Hien, Dielectric function and impurity-limited mobility of semiconductor quantum wires: effects of dielectric mismatch and finite confining potential, *Eur. Phys. J. B* **95**, 31 (2022), DOI: [10.1140/epjb/s10051-022-00295-z](https://doi.org/10.1140/epjb/s10051-022-00295-z)
4. Anh D. Phan, Nguyen K. Ngan, Do T. Nga, Nam B. Le, and Chu Viet Ha, Tailoring Drug Mobility by Photothermal Heating of Graphene Plasmons, *Phys. Status Solidi RRL* **16**, 2100496 (2022); DOI: [10.1002/pssr.202100496](https://doi.org/10.1002/pssr.202100496)
5. Tatjana Škrbić, Trinh Xuan Hoang, Achille Giacometti, Amos Maritan and Jayanth R. Banavar, Proteins - a celebration of consilience, *International Journal of Modern Physics B* **36**, 2140051 (2022); DOI: [10.1142/S0217979221400518](https://doi.org/10.1142/S0217979221400518)
6. V Hung Nguyen, Trinh X Hoang and J-C Charlier, Electronic properties of twisted multilayer graphene, *Journal of Physics: Materials* **5**, 034003 (2022); DOI: [10.1088/2515-7639/ac6c4a](https://doi.org/10.1088/2515-7639/ac6c4a)
7. Mai-Chung Nguyen and Huy-Viet Nguyen, Quantum interference of electrons through electric-field-induced edge states in stacked graphene nanoribbons, *PHYSICA SCRIPTA* **97**, 115814 (2022); DOI: [10.1088/1402-4896/ac9934](https://doi.org/10.1088/1402-4896/ac9934)

Trên tạp chí thuộc danh mục VAST2

1. Mai-Chung Nguyen, Nguyen Huy Viet, Electron Transport Through Experimentally Controllable Parabolic Bubbles on Graphene Nanoribbons, *Communications in Physics* **32**, (2022); DOI: [10.15625/0868-3166/16763](https://doi.org/10.15625/0868-3166/16763)
2. Nhung T. T. Nguyen, Phuong Thuy Bui, Trinh Xuan Hoang, Effects of macromolecular crowding on folding of small globular proteins, *Communications in Physics* **32**, 233-242 (2022); DOI: [10.15625/0868-3166/16763](https://doi.org/10.15625/0868-3166/16763)