

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

BÁO CÁO TỔNG KẾT CÔNG TÁC NĂM 2023

Trung tâm Vật lý tính toán

Hà Nội, 11/2023

1. Giới thiệu

- Địa điểm: 10 Đào Tấn, Ba Đình, Hà Nội
- Điện thoại, Fax: +84 24 37662107 (Duong Thị Mân)
- Trang tin điện tử: <http://iop.vast.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 6 biên chế (3 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 lý thuyết phiếm hàm mật độ và các phương pháp tính toán từ nguyên lý ban đầu trong nghiên cứu và thiết kế 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 và các hệ sinh học.

- Cơ sở vật chất:

- Cụm máy tính: 10 node, 344 core.

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 |
| 2. Cao Thị Bích | TS |
| 3. Trịnh Xuân Hoàng | PGS TS |
| 4. Đỗ Thị Nga | TS |
| 5. Nguyễn Thị Thùy Nhung | TS (biên chế tại Viện Vật lý đến 6/2023) |
| 6. Nguyễn Hồng Quang | PGS TS |
| 7. Nguyễn Huy Việt | PGS TS |

3.2. Cán bộ hợp đồng:

- | | |
|-------------------|-----------------------------|
| 1. Phạm Tuấn Kiệt | CN (ký HĐ từ tháng 10/2023) |
|-------------------|-----------------------------|

3.3. 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 Văn Liễn | GS TSKH, Emeritus |
| 4. Lê Duy Mạnh | TS, ĐH Duy Tân |
| 5. Tô Thị Thảo | TS, Học viện Công nghệ Bưu chính viễn thông |
| 6. Nguyễn Thế Toàn | GS TS, ĐH KHTN Hà Nội |
| 7. Nguyễn Mạnh Thường | TS, Pacific Northwest National Laboratory, USA |

hệ”, Chủ nhiệm: TS. Chu Thùy Anh. Thời gian thực hiện: 2023. Kết quả: Đã hoàn thành các kết quả nghiên cứu.

- Đề tài cơ sở Trung tâm Vật lý quốc tế: “Ứng dụng các phương pháp vật lý tính toán trong nghiên cứu vật liệu và các hệ phức hợp”, Chủ nhiệm: PGS.TS. Trịnh Xuân Hoàng. Thời gian thực hiện: 2023. Kết quả: Đang hoàn thành các kết quả nghiên cứu.
- Đề tài cơ sở Trung tâm Vật lý quốc tế: “Sử dụng phần mềm Gromacs và OpenFoam mô phỏng đặc trưng ổn định nhiệt của protein và chuyển động của sol khí”, Chủ nhiệm: TS. Nguyễn Thị Thùy Nhung. Thời gian thực hiện: 2023. Kết quả: Đã thiết lập được chương trình mô phỏng sử dụng Gromacs và OpenFoam để nghiên cứu tính ổn định nhiệt của protein G6PD không có phối tử và chuyển động của các sol khí trong mẫu bước ngược.

5. Công bố khoa học

Trong thời gian 11/2022 - 11/2023, tổng số bài báo khoa học của Trung tâm là 08 bài (chỉ tính các bài báo có ghi địa chỉ Viện Vật lý), bao gồm:

- Bài báo trên tạp chí SCIE: 5 bài
- Bài báo quốc tế không thuộc SCIE, có mã ISSN/ISBN: 1 bài
- Bài báo thuộc danh mục VAST 2: 1 bài
- Bài báo trong nước khác: 1 bài

Số bài báo SCIE trên số biên chế: $5/6 = 0.83$ 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	2023	2022	2021	2020	2019	2018	2017	2016	2015
Bài báo SCIE	5	7	4	4	9	5	10	11	5
Bài báo quốc tế không thuộc SCIE, có mã ISSN/ISBN	1			1		1	7	14	11
Bài báo trong nước	2	2	4		2	1			1
Tổng số:	8	9	8	5	10	7	17	25	17

Danh sách các bài báo: xem Phụ lục 1.

- Thống kê số bài báo của các cán bộ biên chế và hợp đồng thuộc trung tâm:

TT	Họ và tên	Bài báo SCIE	Bài báo quốc tế không thuộc SCIE	Bài báo trong nước	Tổng số
1.	Chu Thùy Anh		1		1
2.	Cao Thị Bích	1			1
3.	Trịnh Xuân Hoàng	2		2	4
4.	Đỗ Thị Nga	2	1		3
5.	Nguyễn Thị Thùy Nhung	1			1
6.	Nguyễn Hồng Quang	1			1
7.	Nguyễn Huy Việt				0

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

- Hội nghị Asia Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry APATCC-10, 19-23/2/2023 tại Quy Nhơn: Trịnh Xuân Hoàng (báo cáo mời).
- Hội nghị Vật lý lý thuyết Việt Nam lần thứ 48, 31/7-3/8/2023 tại Đà Nẵng: Nguyễn Huy Việt (báo cáo miệng), Nguyễn Hồng Quang (báo cáo treo).
- Hội nghị Vật lý kỹ thuật và ứng dụng lần thứ 8, 10/2023 tại Bình Dương: Nguyễn Thị Thùy Nhung (báo cáo treo).
- Lớp học và Hội thảo Mạng lưới châu Á về vật lý các hệ đồng đặc và phức hợp 2023, 6-10/11/2023, Hà Nội: Trịnh Xuân Hoàng, Nguyễn Thị Thùy Nhung (báo cáo treo).

7. Đào tạo:

7.1. Giảng dạy cho 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 48 (Đà Nẵng, 31/7-03/08/2023): Trịnh Xuân Hoàng (Ban tổ chức), Nguyễn Huy Việt (Ban chương trình).
- Tổ chức Lớp học và Hội thảo của Mạng lưới châu Á về vật lý các hệ đồng đặc và phức hợp 2023: Trịnh Xuân Hoàng (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:

STT	Họ và tên	Điểm KQLĐ	Đạt tiêu chí khuyến khích	Tự đánh giá	Tập thể đánh giá
1	Chu Thùy Anh	5		Hoàn thành nhiệm vụ	Hoàn thành tốt
2	Cao Thị Bích	21		Hoàn thành tốt nhiệm vụ	Hoàn thành xuất sắc
3	Trịnh Xuân Hoàng	47.55	X	Hoàn thành tốt nhiệm vụ	Hoàn thành xuất sắc
4	Đỗ Thị Nga	35		Hoàn thành tốt nhiệm vụ	Hoàn thành xuất sắc
5	Nguyễn Thị Thùy Nhung	17.65	X	Hoàn thành tốt nhiệm vụ	Hoàn thành xuất sắc
6	Nguyễn Hồng Quang	17.56		Hoàn thành tốt nhiệm vụ	Hoàn thành xuất sắc
7	Nguyễn Huy Việt	41.3		Hoàn thành nhiệm vụ	Hoàn thành xuất sắc

11. Bình bầu thi đua khen thưởng:

Đề nghị Viện Vật lý xét các danh hiệu:

- Tập thể lao động xuất sắc: Không
- 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 Thị Thùy Nhung
- Giấy khen của Viện Vật lý:
 - Cao Thị Bích
 - Trịnh Xuân Hoàng
- Lao động tiên tiến:
 - Chu Thùy Anh
 - Cao Thị Bích
 - Trịnh Xuân Hoàng
 - Đỗ Thị Nga
 - Nguyễn Thị Thùy Nhung
 - Nguyễn Hồng Quang
 - Nguyễn Huy Việt

Hà Nội, ngày 15 tháng 11 năm 2023

Giám đốc Trung tâm VLTT

Trịnh Xuân Hoàng

Phụ lục 1
Công bố khoa học của Trung tâm Vật lý tính toán
trong thời gian 11/2022 – 11/2023

Tạp chí SCIE

1. Do T. Nga, Anh D. Phan, Vu D. Lam, Trevon Badloe, and Junsuk Rho, Optimizing the design of broadband solar metamaterial absorbers based on titanium nitride nanorings, *Optical Materials Express* **13**, 2788 (2023); DOI: [10.1364/OME.499630](https://doi.org/10.1364/OME.499630)
2. Cao Thi Bich and Nguyen Ba An, Bidirectional remote hyperstate preparation under common quantum control using hyperentanglement, *Journal of the Optical Society of America B* **40**, 11 (2023); DOI: [10.1364/JOSAB.471680](https://doi.org/10.1364/JOSAB.471680)
3. Do T. Nga, Anh D. Phan, Thudsaphungthong Julie, Nam B. Le, Chu Viet Ha, Photo-to-heat conversion of broadband metamaterial absorbers based on TiN nanoparticles under laser and solar illumination, *Materials Today Communications* **35**, 105794 (2023); DOI: [10.1016/j.mtcomm.2023.105794](https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.105794)
4. Nhung T. T. Nguyen, Anh T. Ngo, Trinh Xuan Hoang, Energetic preference and topological constraint effects on the formation of DNA twisted toroidal bundles, *Journal of Chemical Physics* **158**, 114904 (2023); DOI: [10.1063/5.0134710](https://doi.org/10.1063/5.0134710)
5. Phuong Thuy Bui, and Trinh Xuan Hoang, The protein escape process at the ribosomal exit tunnel has conserved mechanisms across the domains of life, *Journal of Chemical Physics* **158**, 015102 (2023); DOI: [10.1063/5.0129532](https://doi.org/10.1063/5.0129532)

Tạp chí không thuộc SCIE

1. Le Duy Manh, Bui Phuong Thuy, Bui Van Hai, Man Minh Tan, Trinh Xuan Hoang, Cross-Fourier analysis for differentiating prolonged and self-terminating ventricular tachycardia in isolated rat hearts, *Journal of Military Science and Technology* **87**, 85-93 (2023); DOI: [10.54939/1859-1043.j.mst.87.2023.85-93](https://doi.org/10.54939/1859-1043.j.mst.87.2023.85-93)
2. Do T. Nga, Thudsaphungthong Julie, Chu Viet Ha, Chu Thuy Anh, Do Chi Nghia and Anh D. Phan, Optimization of TiN-based ultra- exible materials for photothermal and solar harvesting applications, *Journal of Physics: Conference Series* **2485**, 012003 (2023); DOI: [10.1088/1742-6596/2485/1/012003](https://doi.org/10.1088/1742-6596/2485/1/012003)
3. Bui Phuong Thuy, Le Duy Manh, Nguyen Thi Hai Yen and Trinh Xuan Hoang, Effects of hydrophobic and electrostatic interactions onthe escape of nascent proteins at bacterial ribosomal exit tunnel, *Communications in Physics* **33**, 73-84 (2023); DOI: [10.15625/0868-3166/17434](https://doi.org/10.15625/0868-3166/17434)