

PHIẾU CUNG CẤP THÔNG TIN
VỀ PHÒNG THÍ NGHIỆM, TRUNG TÂM NGHIÊN CỨU

1. Tên phòng thí nghiệm/ Trung tâm nghiên cứu: Trung tâm Ứng dụng Tin học trong Hóa học
2. Loại hình: PTN *chuyên đề*
3. Ngành/ Chuyên ngành đào tạo (*Theo danh mục ngành/chuyên ngành đào tạo của ĐHQGHN*):
Hóa lý thuyết và Hóa lý
4. Trưởng phòng thí nghiệm / Giám đốc trung tâm: GS.TSKH Đặng Ứng Vận (GD); BCN Khoa giao PGS.TS Nguyễn Cẩm Hà tạm thời phụ trách
5. Danh sách cán bộ cơ hữu (*họ tên, học hàm, học vị*): TS. Nguyễn Hữu Thọ, TS. Nguyễn Hòa Mi, TS. Vũ Việt Cường, TS. Bùi Thái Thanh Thu, TS. Vũ Ngọc Duy,
6. Danh sách cán bộ nghiên cứu chủ chốt (*họ tên, học hàm, học vị*): TS. Nguyễn Hữu Thọ, TS. Nguyễn Hòa Mi, TS. Vũ Việt Cường, TS. Bùi Thái Thanh Thu, TS. Vũ Ngọc Duy, GS.TS. Lâm Ngọc Thiềm (đã về hưu, kiêm nhiệm), PGS.TS. Phạm Văn Nhiều (đã về hưu, kiêm nhiệm), GS.TSKH. Đặng Ứng Vận (đã về hưu, kiêm nhiệm), PGS.TS. Lê Kim Long ĐH Giáo dục, cộng tác)
7. Mức độ đầu tư: PTN hiện có và trong kế hoạch cần được đầu tư bổ sung
8. Các thiết bị nghiên cứu chính:
Hệ thống máy tính trang bị tính toán được lắp đặt và vận hành tại trung tâm từ năm 2000 và hiện nay đã lỗi thời không còn giá trị sử dụng (dòng máy tính thế hệ Pentium 4).
9. Hướng nghiên cứu chính: Kết hợp phương pháp lượng tử với cơ học phân tử và sử dụng một số phương pháp tìm trạng thái chuyển tiếp để xây dựng cơ chế phản ứng chi tiết, xác định đường phản ứng và năng lượng hoạt hóa cho phản ứng thủy phân các cơ chất trong cơ thể sống nhờ xúc tác enzyme. Nghiên cứu phương pháp động học phân tử bán lượng tử. Ứng dụng các phương pháp hóa tin và thuật giải trí tuệ nhân tạo nghiên cứu mô hình tương tác giữa các chất hóa học với DNA và protein. Nghiên cứu liên kết Halogen ngoài phân tử dựa trên mô hình đa cực về mật độ điện tích. Ứng dụng tin học trong hỗ trợ tổng hợp thuốc.
 - 5 từ khóa về hướng nghiên cứu chính: hóa lý thuyết, DNA và protein, trí tuệ nhân tạo, mô hình đa cực về mật độ điện tích, Lý thuyết các quá trình chuyển hóa;
10. Sản phẩm đã có, có thể chuyển giao:
11. Dự kiến sản phẩm KHCN trong giai đoạn 2016-2020:
 - Mô tả vấn đề sản phẩm:
 - + Phục vụ đào tạo SV khóa luận tốt nghiệp, học viên cao học và NCS
 - + Các bài báo quốc tế ISI, các tạp chí chuyên ngành trong nước và quốc tế
 - 3 từ khóa về sản phẩm: Chương trình, mô hình mô phỏng đa cực về cấu trúc và mật độ điện tích của phân tử, đại phân tử; Ấn phẩm khoa học.