

THÔNG TIN VỀ LUẬN ÁN TIẾN SĨ

1. Họ và tên nghiên cứu sinh: Nguyễn Viết Đức
2. Giới tính: Nam
3. Ngày sinh: 24/06/1984
4. Nơi sinh: Hà Nội
5. Quyết định công nhận nghiên cứu sinh: 4982/QĐ-ĐHKHTN ngày 27/11/2013 của Hiệu trưởng trường Đại học Khoa học tự nhiên.
6. Các thay đổi trong quá trình đào tạo: Quyết định gia hạn số 1033/QĐ-ĐHKHTN ngày 25/4/2017 và số 597/QĐ-ĐHKHTN ngày 06/3/2018 của Hiệu trưởng trường Đại học Khoa học Tự nhiên.
7. Tên đề tài luận án: Ứng dụng các phương pháp lý thuyết và mô phỏng vật lý thống kê để nghiên cứu tương tác tĩnh điện của hệ các phân tử ADN.
8. Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và Vật lý toán
9. Mã số: 9440130.01
10. Cán bộ hướng dẫn khoa học: Hướng dẫn chính: PGS. TS. Nguyễn Thế Toàn
Hướng dẫn phụ: PGS. TS. Nguyễn Vũ Nhân
11. Tóm tắt các kết quả mới của luận án:
 - Giải thích định tính hiện tượng đảo dấu điện tích của đại phân tử sinh học và hiện tượng hút nhau giữa các đại phân tử sinh học, bằng cách giải phương trình trường trung bình với giả thiết các ion ngưng tụ trên bề mặt đại phân tử sinh học tạo thành một chất lỏng tương quan mạnh.
 - Xây dựng và thực hiện phương pháp mô phỏng Monte Carlo chính tắc lớn cho dung dịch nhiều muối.
 - Khảo sát tương tác hiệu dụng của các phân tử ADN, áp suất thẩm thấu, phân bố các loại ion khác nhau trong hệ mạng lực giác ADN. Kết quả khớp định tính và định lượng với các nghiên cứu thực nghiệm của virus ADN.
 - Chỉ ra được rằng trạng thái khử proton của các amino acid cysteine trong cấu trúc ngón tay kẽm là cần thiết cho việc bám ADN của các protein chứa cấu trúc này.
12. Khả năng ứng dụng thực tiễn: Có khả năng dùng làm mô đun chuyên dụng cho mô phỏng và thiết kế thuốc thế hệ mới theo cách tiếp cận tính toán đa tỷ lệ.
13. Các hướng nghiên cứu tiếp theo:
 - Tích hợp phương pháp mô phỏng Monte Carlo chính tắc lớn vào các phần mềm mô phỏng đa tỷ lệ cho các hệ sinh y được phân tử.

– Khảo sát các hiệu ứng tương phản điện môi; vai trò kích cỡ của đồng ion; hoàn thiện thuật toán mô phỏng Monte Carlo chính xác lớn cho các dạng ion hình dạng khác nhau phức hợp; mở rộng cho hệ protein.

14. Các công trình công bố liên quan đến luận án:

- [1] Viet Duc Nguyen, Toan T. Nguyen and Paolo Carloni (2017), “DNA like-charge attraction and overcharging by divalent counterions in the presence of divalent co-ions”, *Journal of Biological Physics*, **43**(2), pp. 185–195.
- [2] Nguyen V Duc, Toan T Nguyen (2017), “Grand–Canonical Monte–Carlo simulation of DNA condensation in equilibrium with a salt mixture containing 2:2 salt”, *Journal of Physics: Conf. Series*, **865**, pp. 012010.
- [3]. Duc Viet Nguyen, Toan T. Nguyen (2019), “Size effect in Grand-canonical Monte-Carlo simulation of solutions of electrolyte”, *VNU Journal of Science: Mathematics and Physics*, **35**(2), pp. 13–21.
- [4]. Nguyen Viet Duc, Ly Hai Nguyen, Hien T. T. Lai, Toan T. Nguyen (2019) “Computational study of the effect of protonation states of PSA protein zinc fingers on its DNA binding”, *Journal of Physics: Conf. Series*, **1274**, pp. 012002.
- [5]. Nguyen Vu Nhan, Nguyen Viet Duc, Toan T. Nguyen (2019) “The phenomena of charge inversion and effective attraction between the spherical macromolecules in electrolyte solvent”, *Scientific journal of Hanoi Metropolitan University* **35**, pp. 42–53.

Ngày tháng năm 2020

Người hướng dẫn luận án

Nghiên cứu sinh

PGS. TS. Nguyễn Thế Toàn

Nguyễn Việt Đức

INFORMATION ON DOCTORAL THESIS

1. Full name: Nguyen Viet Duc
2. Sex: Male
3. Date of birth: 24/06/1984
4. Place of birth: Ha Noi.
5. Admission decision number: Decision No. 4982/QĐ-ĐHKHTN dated on 27 November, 2013 by Rector of VNU University of Science.
6. Changes in academic process: Decision No. 1033/QĐ-ĐHKHTN date on 25/4/2017 and Decision No. 597/QĐ-ĐHKHTN date on 06/3/2018, signed by the Rector of VNU University of Science.
7. Official thesis title: Application of theoretical and computational approaches to investigate electrostatic interactions in biological systems containing DNA molecules.
8. Major: Theoretical and mathematical physics
9. Code: 9440130.01
10. Supervisors: Assoc. Prof. Dr. Nguyen The Toan
Assoc. Prof. Dr. Nguyen Vu Nhan
11. Summary of the new findings of the thesis
 - Explain qualitatively the phenomena of charge inversion and effective attraction between same charge macro molecules by using Poisson – Boltzmann mean-field equation and the assumption that counterions condense on the surface of macromolecules to form a strongly correlation liquid.
 - Construct and perform Grand Canonical Monte - Carlo Simulation for solutions of salt mixtures.
 - Investigate the effective attraction between DNA molecules, the osmotic pressure, the distribution of various species in DNA hexagonal lattice. The results are in qualitative and quantitative agreement with experimental study of DNA packaging virus.
 - Show that deprotonated state of cysteine amino acid is essential for Zinc finger proteins that bonding to DNA.
12. Paratical applicability, if any:
 - This method can be used to develop computational module for biomolecules simulation and drug discovery in a multiscale computational approaches.
13. Further research directions, if any:
 - Integrate the Monte Carlo simulation method into multiscale simulation softwares for molecular biomedical systems.

- Investigate the effect of dielectric contrast; role of co-ion sizes; improve the Grand Canonical Monte - Carlo simulation of complex shapes of ions; extend to simulation of protein systems.

14. Thesis-related publications:

- [1]. Viet Duc Nguyen, Toan T. Nguyen and Paolo Carloni (2017), “DNA like-charge attraction and overcharging by divalent counterions in the presence of divalent co-ions”, *Journal of Biological Physics*, **43**(2), pp. 185–195.
- [2]. Nguyen V Duc, Toan T Nguyen (2017), “Grand–Canonical Monte–Carlo simulation of DNA condensation in equilibrium with a salt mixture containing 2:2 salt”, *Journal of Physics: Conf. Series*, **865**, pp. 012010.
- [3]. Duc Viet Nguyen, Toan T. Nguyen (2019), “Size effect in Grand-canonical Monte-Carlo simulation of solutions of electrolyte”, *VNU Journal of Science: Mathematics and Physics*, **35**(2), pp. 13–21.
- [4]. Nguyen Viet Duc, Ly Hai Nguyen, Hien T. T. Lai, Toan T. Nguyen (2019) “Computational study of the effect of protonation states of PSA protein zinc fingers on its DNA binding”, *Journal of Physics: Conf. Series*, **1274**, pp. 012002.
- [5]. Nguyen Vu Nhan, Nguyen Viet Duc, Toan T. Nguyen (2019) “The phenomena of charge inversion and effective attraction between the spherical macromolecules in electrolyte solvent”, *Scientific journal of Hanoi Metropolitan University* **35**, pp. 42–53.

Date:

Supervisor

PhD Student

Assoc. Prof. Dr. Nguyen The Toan

Nguyen Viet Duc