

TS. Trần Doãn Huân: Những gì tốt nhất còn chưa đến

Tia sáng

Là một chuyên gia hàng đầu trong ngành tin học vật liệu (Materials Informatics), TS. Trần Doãn Huân đã có một hành trình đầy thú vị trong những dự án đột phá trên thế giới về chế tạo vật liệu.



TS. Trần Doãn Huân. Ảnh: ICISE

Trước khi có một sự nghiệp đáng kể trong ngành tin học vật liệu hiện nay, TS. Trần Doãn Huân đã trải qua một thời kì không hề ngắn để khám phá chính mình. Hồi phổ thông, anh học chuyên Toán Đại học Sư phạm Hà Nội 1 chứ không phải học vật lý. Mặc dù chia sẻ rằng anh bắt đầu "chuyển sự chú ý" sang vật lý từ cuối những năm học phổ thông, nhưng đến khi thi Đại học, anh lại chọn thi và học kinh tế. Sau một năm trên giảng đường Đại học Kinh tế Quốc dân, anh thi lại đại học. Nhưng, kể cả khi đỗ Khoa Vật lý kỹ thuật Đại học Bách khoa Hà Nội, anh vẫn chưa quyết định chuyển hẳn sang vật lý, mà vẫn đồng thời theo đuổi việc học và tốt nghiệp trường Đại học Kinh tế Quốc dân Hà Nội.

Anh chỉ chính thức chọn khoa học "là nghề của mình" khi được nhận công tác tại Bộ môn Vật lý Lý thuyết, Viện Vật lý kỹ thuật, trường Đại học Bách khoa Hà Nội sau khi tốt nghiệp vào năm 2000. Thời điểm đó, anh

tham gia nhóm nghiên cứu cùng với tôi*, GS. Đoàn Nhật Quang và GS. Nguyễn Huyền Tụng, mà đến bây giờ nhớ lại, anh cho rằng, đó là may mắn của mình. Trong khoảng ba năm, anh có hai công bố trên tạp chí Physical Review Letters và Physical Review B của Hội Vật lý Mỹ và đáng lẽ anh đã có một tương lai rất khác nếu tiếp tục ở lại làm tiến sĩ tại Đại học Bách khoa Hà Nội. "Tuy nhiên, lời khuyên của thầy tôi, GS. Đoàn Nhật Quang và GS. Nguyễn Huyền Tụng, về một chân trời lớn bắt đầu từ việc làm tiến sĩ ở Mỹ, đã gợi mở cho tôi chương tiếp theo trên hành trình của mình". – TS. Huân chia sẻ.

Mười năm sau đó của TS. Trần Doãn Huân là thời gian anh "phiêu lưu" trong thế giới lượng tử. Luận án tiến sĩ của anh tại Khoa Vật lý, Đại học bang Florida (Florida State University) là về một loại chuẩn hạt không giao hoán (non-Abelian anyons).

Một trong những vấn đề lớn nhất của máy tính lượng tử - ước mơ tương lai của con người về một thiết bị có khả năng tính toán và hiệu suất vượt xa máy tính truyền thống hiện nay, đó là nhiễu tín hiệu. Một phương án có thể giải quyết bài toán này là sử dụng chuẩn hạt không giao hoán với điện tích phân số, một loại hạt cơ bản của các hệ điện tử hai chiều tạo nên bởi các vật liệu bán dẫn tiên tiến nằm trong từ trường đủ mạnh và ở nhiệt độ đủ thấp.

Thời gian làm post-doc của TS. Doãn Huân ở Đại học Basel, Thụy Sĩ là cùng nhóm của GS. Stefan Goedecker, chuyên gia về vật lý tính toán để phát triển BigDFT – một phần mềm nguồn mở, dùng lý thuyết phiếm hàm mật độ (density functional theory - DFT) để mô phỏng các vật liệu rắn ở cấp độ nguyên tử. Trong thời gian này, TS. Huân đã trở thành một chuyên gia dày dặn trong lĩnh vực DFT và sử dụng công cụ này trong nghiên cứu vật liệu tiên tiến, chẳng hạn bán dẫn.

Đây cũng là khởi nguồn cho một trong những điểm sáng trong sự nghiệp của TS. Trần Doãn Huân với nghiên cứu mới về vật liệu hafnia (công thức hóa học HfO₂). Đây là một vật liệu điện môi quan trọng trong các thiết bị bán dẫn dựa trên silicon từ vài chục năm qua. Năm 2011, hiệu ứng sắt điện (ferroelectricity) được phát hiện trong vật liệu này ở dạng màng mỏng, và không ai biết lí do vì sao, bởi vì cho đến lúc đó, tất cả các pha cấu trúc đã biết của hafnia đều có đối xứng xuyên tâm, và vì thế không thể có phân cực điện.

TS. Doãn Huân đã sử dụng DFT và các công cụ tiên đoán cấu trúc hiện đại để tìm ra hai pha sắt điện chưa biết của hafnia (Pca21 và Pmn21) để giải thích thành công hiện tượng này, và ngay sau đó được xác nhận bằng thực nghiệm. Hiểu biết này về hafnia (đã được trích dẫn hơn 450 lần bởi các nhà khoa học khắp nơi trên thế giới), là cơ sở cho 10 năm phát triển rất nhanh những ứng dụng khác, chẳng hạn bộ nhớ dựa trên hiệu ứng sắt điện [1], của hafnia từ phòng thí nghiệm đến thị trường.

Có lẽ, nhiều năm theo đuổi những giải pháp đột phá, đòi hỏi hiểu biết và kỹ thuật liên ngành, đi đến tận cùng cấu tạo và đặc tính của vật liệu – cấu trúc và vận động của nó cấp độ nguyên tử và hạ nguyên tử, đã cuốn anh tới lĩnh vực tin học vật liệu.

Đi sâu vào lĩnh vực tin học vật liệu

Tin học Vật liệu (Materials Informatics) là một lĩnh vực khoa học mới được phát triển từ đầu những năm 2010 tại Mỹ. Mục tiêu cốt lõi của lĩnh vực này là phát triển các kỹ thuật Trí tuệ Nhân tạo cho các vấn đề quan trọng nhưng rất đặc thù của Khoa học Vật liệu.

Nhờ Tin học Vật liệu mà giờ đây người ta có thể nhanh chóng tìm hiểu và lượng hóa quan hệ giữa cấu trúc vật liệu (từ mức nanomet, qua micromet đến milimet và thậm chí hơn thế) với các điều kiện tổng hợp, gia công và sản xuất và với các tính chất hóa lý và phẩm chất vật liệu trong ứng dụng.

Với Tin học Vật liệu, quá trình thiết kế ngược có thể trở nên khả thi: xuất phát từ đặc tính cho trước, người ta có thể tăng tốc việc xác định vật liệu nào và quy trình gia công ra sao để thỏa mãn được yêu cầu đó. Trước đây, khoa học truyền thống đơn giản là không thể làm được những việc này hoặc nếu có thì đòi hỏi một quá trình thử và sai từ phòng thí nghiệm đến sản xuất thực tế kéo dài rất nhiều năm.

Lĩnh vực này có bản chất liên ngành rất cao, yêu cầu kết nối chuyên môn sâu trong nhiều ngành khoa học truyền thống như Vật lý, Hóa học, Toán học, Công nghệ thông tin. Hiện nay, ngành này đã kết nối và bắt tay chặt với khu vực sản xuất, bao gồm các công ty công nghệ cao đa quốc gia, để trực tiếp đẩy nhanh quy trình khám phá, thiết kế, và sản xuất các vật liệu mới đột phá như thuốc đặc trị, chất bán dẫn, vật liệu lưu trữ và chuyển hóa năng lượng (pin hóa học và pin nhiên liệu cho xe điện), vật liệu chịu nhiệt và giữ được những đặc tính quan trọng trong các điều kiện làm việc cực đoan, vật liệu thân thiện với môi trường (polymer có thể phân hủy có kiểm soát).

TS. Trần Doãn Huân thực sự bước chân vào lĩnh vực Tin học Vật liệu khi quay trở lại Mỹ vào năm 2013 để làm việc tại Đại học Connecticut. Hoạt động trong nhóm của GS. Rampi Ramprasad, trải qua nhiều dự án lớn có khi lên đến vài chục thành viên từ nhiều chuyên môn rất khác nhau nhưng bổ sung cho nhau nhằm sản xuất nhiều dòng vật liệu polymer cho các ứng dụng công nghiệp.

TS. Doãn Huân là một trong những thành viên chủ chốt trong dự án Polymer Genome nhằm phát triển một loạt các mô hình học máy giúp dự đoán hoặc truy xuất các tính chất của vật liệu polymers dựa vào genome - một nhóm nhỏ các cấu trúc nguyên tử và hình thái của chúng. Các mô hình của Polymer Genome được huấn luyện dựa trên dữ liệu của đặc điểm từ hơn 13 ngàn loại vật liệu polymers đã được biết đến trên thế giới. Người dùng chỉ cần nhập vào một chuỗi ký tự theo một quy tắc nhất định để biểu diễn một polymer giả định, và những mô hình này sẽ trả về các tính chất vật liệu tương ứng chỉ trong vòng chưa đầy một phút, nếu không phải là vài giây.

Những mô hình học máy vô tiền khoáng hậu này mở ra khả năng tạo ra những vật liệu polymer mới có tính chất vượt trội mà với những kinh nghiệm, hiểu biết của khoa học vật liệu truyền thống có thể sẽ không bao giờ khám phá ra được. Chẳng hạn, nhờ những công cụ phát triển trong dự án Polymer Genome, các nhà khoa học đã tìm ra và sản xuất các vật liệu chưa từng biết đến cho việc lưu trữ năng lượng điện. Những vật liệu này có điện dung (khả năng lưu giữ) cao gấp 3-5 lần các vật liệu trước đây.





TS. Trần Doãn Huân tham gia Ban tổ chức và diễn giả khách mời của chuỗi Hội thảo Khoa học quốc tế về Vật liệu. Ảnh: Hội thảo quốc tế về Tin học Vật liệu mới được tổ chức tại Quy Nhơn tháng 8 vừa qua. Ảnh: ICISE

Và sau khi anh Huân chuyển sang các dự án khác, và từ năm 2018 là sang Viện Công nghệ Georgia, những người tiếp theo đã tìm ra những vật liệu có khả năng lưu trữ thậm chí cao gấp 10 lần. Các hướng này đang được tiếp tục đẩy mạnh và sẽ có những vật liệu tốt hơn được công bố trong tương lai. Cho đến nay, Polymer Genome vẫn đang được tiếp tục nâng cấp và trở thành những mô hình tốt nhất thế giới và được giới khoa học của hơn 100 quốc gia sử dụng.

Bên cạnh vai trò là nghiên cứu viên cao cấp của Viện Công nghệ Georgia, giờ đây TS. Doãn Huân còn là Giám đốc nghiên cứu đổi mới của startup Matmerize – chuyên thiết kế vật liệu polymer dựa trên các kỹ thuật Trí tuệ Nhân tạo. Như một cái kết nối dài của câu chuyện Polymer Genome, anh là một trong những người đứng sau phần mềm PolymRize, một sản phẩm chủ chốt của Matmerize, được sử dụng bởi nhiều hãng công nghiệp lớn nhằm thiết kế vật liệu một cách thông minh, giảm bớt quá trình thử sai tốn kém và lãng phí.

Vượt xa Polymer Genome, PolymRize không chỉ dựa trên cơ sở dữ liệu có sẵn mà còn cho phép khách hàng sử dụng dữ liệu của riêng họ, xây dựng mô hình dự đoán tính chất của polymer "may đo" theo từng nhu cầu khác nhau. Hơn nữa, nếu Polymer Genome chỉ cho phép dự đoán một chiều từ cấu trúc nguyên tử đến đặc tính của vật liệu thì PolymRize còn có thể làm điều ngược lại: từ đặc tính cho trước, tìm ra cấu trúc và thiết kế của vật liệu.

Theo quan sát của người viết, TS. Doãn Huân là chuyên gia hàng đầu thế giới trong việc tìm hiểu và khám phá các vật liệu polymer. Nhưng mối quan tâm về vật liệu của anh còn đa dạng hơn thế. TS. Doãn Huân còn làm

việc với những loại vật liệu khác như vật liệu bán dẫn (semiconductor), vật liệu siêu dẫn (superconductor), vật liệu lai hữu cơ-vô cơ.

Polymers là vật liệu chủ yếu ở trạng thái không trật tự, vô định hình, và các tính chất phụ thuộc nhiều vào các tương tác yếu, tầm xa, và không thể hiện bản chất lượng tử. Ngược lại, vật liệu siêu dẫn chủ yếu là vật liệu tinh thể, có trật tự, và tính chất của chúng thể hiện bản chất lượng tử rất rõ nét. Bên cạnh cơ sở dữ liệu về polymers, anh cũng tham gia xây dựng cả cơ sở dữ liệu gồm hơn 1.300 vật liệu lai hữu cơ-vô cơ hiện được sử dụng rộng rãi trong giới khoa học.

Cầu nối từ Việt Nam tới thế giới

Làm việc trong lĩnh vực Tin học Vật liệu từ rất sớm, anh hiện có khoảng 90 công bố khoa học trên những tạp chí tốt nhất của ngành, bao gồm Physical Review Letters, Journal of Physical Chemistry Letters, Progress of Materials Science, Nature Reviews Materials, Nature Communications, and Nature Computational Science. Tính đến tháng 7/2024, các công bố của anh nhận được hơn 6 ngàn trích dẫn, và H-index hiện tại là 372. Ngoài ra, anh còn là thành viên ban biên tập (Editorial board) [3] của tạp chí Journal of Electronic Materials của nhà xuất bản Springer.

TS. Doãn Huân cho rằng công nghiệp bán dẫn (semiconductor) và trí tuệ nhân tạo (AI) là bộ đôi công nghệ của tương lai. Hai chuyên ngành này là trọng tâm của quá trình đổi mới sáng tạo (ĐMST), chuyển đổi số và Cách mạng công nghiệp 4.0 mà cả thế giới đều đang tập trung đầu tư mạnh mẽ. Nhận thức được điều đó, và lại đang làm việc ngay giữa tâm điểm của cả những lĩnh vực này, TS. Doãn Huân đã bắc cầu để đưa các chuyên gia hàng đầu đến với cộng đồng Khoa học Vật lý và Vật liệu của Việt nam.

Tháng 11/2018, anh mời TS. James Warren, một lãnh đạo chủ chốt của Materials Genome Initiative, một sáng kiến chiến lược của chính phủ Mỹ nhằm đến việc phát triển vật liệu mới nhanh gấp nhiều lần với một phần nhỏ chi phí, đến ĐH Bách khoa Hà Nội để làm seminar về vấn đề này. Anh tích cực tham gia ban tổ chức và diễn giả khách mời của chuỗi Hội thảo Khoa học quốc tế về Vật liệu (International Symposium on Frontiers in Materials Science) tổ chức định kỳ hai năm một lần, hai lần gần nhất tại Phú Quốc (Việt Nam, 11/2022) [4] và Hsinchu, (Đài Loan, Trung Quốc, 1/2024) [5].

Tin học Vật liệu là hướng đi mới mẻ với Việt Nam. Dù có thể "đứng trên vai người khổng lồ" bằng cách sử dụng những cơ sở dữ liệu và công cụ nguồn mở của thế giới, chúng ta cũng nên hướng tới các kế hoạch mang tính chiến lược hơn, xây dựng các cơ sở dữ liệu cũng như phát triển các kỹ thuật trí tuệ nhân tạo để giải quyết những bài toán về vật liệu đặc thù của riêng mình.

Dự án "Khám phá các vật liệu chức năng mới bằng phương pháp tiếp cận học máy (Novel Functional Materials Discovery by Machine-Learning Approaches) [6] của TS. Doãn Huân kết hợp cùng nhóm nghiên cứu của tôi tại BM Vật lý lý thuyết, Viện Vật lý kỹ thuật, ĐH Bách khoa Hà Nội là một trong những đề tài đầu tiên nhận được tài trợ của Quỹ Đổi mới Sáng tạo của VinGroup (VinIF). Các công bố của Dự án này đã nhận được sự chú ý nhất định của cộng đồng khoa học tại Mỹ [7].

Sau khi Dự án đã hoàn thành, TS. Doãn Huân cùng với tôi lên kế hoạch và tổ chức một Hội thảo Quốc tế về lĩnh vực này với tên gọi "Tin học Vật liệu: Tăng tốc nghiên cứu và thiết kế vật liệu bằng trí tuệ nhân tạo" (Materials Informatics: Accelerating Materials Research and Design with Artificial Intelligence) [8] tại Trung tâm Quốc tế Khoa học và Giáo dục liên ngành (ICISE, Quy Nhơn, Bình Định, Việt Nam) ngày 23-25/8/2024 với sự phối hợp tổ chức của Trung tâm Trí tuệ Môi trường, Đại học VinUni. Sự kiện này đã quy tụ được hơn 60 nhà khoa học quốc tế uy tín từ Mỹ, Đức, Pháp, Áo, Úc, Nhật, Ấn Độ, Singapore, và Việt Nam. TS. Doãn Huân và tôi hy vọng rằng sau hội thảo, hướng nghiên cứu mới và tiên tiến này sẽ thu hút được nhiều đồng nghiệp tại Việt nam.

Hoạt động tích cực trong lĩnh vực khoa học liên ngành mới nổi nhưng phát triển rất nhanh này của thế giới, TS. Trần Doãn Huân đã có một cuộc phiêu lưu đầy thú vị, nhưng với anh, "những gì tốt nhất là những gì vẫn còn chưa đến".

Tác giả là GS, TS, Trưởng Bộ môn Vật lý lý thuyết, Khoa Vật lý kỹ thuật, Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội

Chú thích :

- (1) <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcllett.3c03363> (Hafnia-Based Ferroelectric Memory: Device Physics Strongly Correlated with Materials Chemistry)
- (2) <https://scholar.google.com/citations?user=NWoSsJ8AAAAJ&hl=en>
- (3) <https://link.springer.com/journal/11664/editors>
- (4) <http://fms.uet.vnu.edu.vn/>
- (5) <https://fms2024.conf.nycu.edu.tw/>
- (6) <https://vinif.org/en/annual/vinif-2019-da03-novel-functional-materials-discovery-by-machine-learning-approaches/>
- (7) <https://www.hpcwire.com/readers-and-editors-choice-awards-2020-winners>, <https://today.ucsd.edu/story/georgia-tech-engineers-simulate-solar-cell-work-using-supercomputers>
- (8) <https://icisequynhon.com/conferences/2024/materials-informatics/>

Theo KHPT