

**CỘNG HÒA XÃ HỘI CHỦ NGHĨA VIỆT NAM**  
**Độc lập - Tự do - Hạnh phúc**

Hà Nội, ngày 27 tháng 02 năm 2026

**BÁO CÁO KẾT QUẢ TỰ ĐÁNH GIÁ**  
**NHIỆM VỤ KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ CẤP QUỐC GIA**

**I. Thông tin chung về nhiệm vụ:**

**1. Tên nhiệm vụ, mã số:**

Xây dựng mô hình dược lý và sàng lọc thuốc giảm đau có định hướng với đích là thụ thể opioid.

Mã số: NĐT/DE/21/28

Thuộc:

- Chương trình (tên, mã số chương trình): Nhiệm vụ KH&CN theo Nghị định thư Việt - Đức

- Khác (ghi cụ thể):

**2. Mục tiêu nhiệm vụ:**

- Xây dựng được mô hình dược lý *in silico* sàng lọc tác dụng giảm đau hướng đích thụ thể  $\mu$ -opioid (MOR -  $\mu$ -opioid receptors).
- Sàng lọc xác định được một số hoạt chất giảm đau tiềm năng dựa trên mô hình dược lý *in silico* đã xây dựng.
- Đánh giá được tác dụng giảm đau của các hoạt chất tiềm năng trên mô hình *in vitro*.

**3. Chủ nhiệm nhiệm vụ:**

**4. Tổ chức chủ trì nhiệm vụ: Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQGHN**

**5. Tổng kinh phí thực hiện: 4.200 triệu đồng.**

Trong đó, kinh phí từ ngân sách SNKH: 4.200 triệu đồng.

Kinh phí từ nguồn khác: 0 triệu đồng.

**6. Thời gian thực hiện theo Hợp đồng:**

Theo hợp đồng ký kết: 36 tháng (10/2021 - 9/2024)

Thời gian thực hiện theo văn bản điều chỉnh của cơ quan có thẩm quyền (nếu có):

Được gia hạn: 16 tháng, đến hết tháng 01/2026.



**7. Danh sách thành viên chính thực hiện nhiệm vụ nêu trên gồm:**

TT	Họ và tên	Học hàm, học vị	Chức danh khoa học	Cơ quan công tác
1.	Nguyễn Thế Toàn	GS.TS	Chủ nhiệm nhiệm vụ	Trường Đại học Khoa học Tự nhiên
2.	Đỗ Minh Hà	TS	Thư ký nhiệm vụ	Trường Đại học Khoa học Tự nhiên
3.	Lê Thị Hải Yến	TS	Thành viên chính	Trường Đại học Khoa học Tự nhiên
4.	Bùi Thanh Tùng	PGS.TS	Thành viên chính	Trường Đại học Y dược, ĐHQGHN
5.	Lưu Thị Thu Phương	PGS.TS	Thành viên chính	Trường Đại học Khoa học Tự nhiên
6.	Nguyễn Viết Đức	TS	Thành viên chính	Viện Khoa học Công nghệ, Bộ Công An
7.	Trần Thanh Tuyền	NCS	Thành viên chính	Trường THPT Quế Võ số 3
8.	Lại Thị Thu Hiền	NCS	Thành viên chính	Trường Đại học Khoa học Tự nhiên

**II. Nội dung tự đánh giá về kết quả thực hiện nhiệm vụ:**

**1. Về sản phẩm khoa học:**

**1.1. Danh mục sản phẩm đã hoàn thành:**

TT	Tên sản phẩm	Số lượng			Khối lượng			Chất lượng		
		Xuất sắc	Đạt	Không đạt	Xuất sắc	Đạt	Không đạt	Xuất sắc	Đạt	Không đạt
1	05 hợp chất có tiềm năng giảm đau		x			x			x	
2	- 01 mô hình dược lý <i>in silico</i> sàng lọc tác dụng giảm đau hướng đích MOR; - 01 báo cáo kết quả sàng lọc hoạt chất giảm đau		x			x			x	

	dựa trên mô hình được lý <i>in silico</i> ; - 01 báo cáo kết quả đánh giá tác dụng giảm đau của hoạt chất tiềm năng dựa trên mô hình <i>in vitro</i>							
3	Hỗ trợ đào tạo: - 04 ThS chuyên ngành CN nano, Sinh học thực nghiệm; - 03 NCS chuyên ngành VLLT & VLT.	x			x			x
4	Công bố quốc tế: - 01 bài Advanced Theory and Simulations (2026, ISI, Q1); - 01 bài Biophysical Review (được nhận đăng, ISI, Q1) - 01 Intl' Journal of Advanced	x			x			x

NG  
 HOC  
 HIEN

	Science and Engineering (được nhận đăng, Scopus); - 01 J. Phys. Conf. Series (được nhận đăng sau khi chỉnh sửa, Scopus); - 01 bản thảo gửi đăng ACS Omega (ISI, Q2), đang phản biện)								
5	01 giải pháp hữu ích (được chấp nhận đơn về chế phẩm giảm đau)		x			x			x

**1.2. Danh mục sản phẩm khoa học dự kiến ứng dụng, chuyển giao (nếu có):**

TT	Tên sản phẩm	Thời gian dự kiến ứng dụng	Cơ quan dự kiến ứng dụng	Ghi chú
1				

**1.3. Danh mục sản phẩm khoa học đã được ứng dụng (nếu có):**

TT	Tên sản phẩm	Thời gian ứng dụng	Tên cơ quan ứng dụng	Ghi chú
1				

**2. Về những đóng góp mới của nhiệm vụ:**

- Làm chủ các phương pháp nghiên cứu hiện đại, có tính hệ thống trong lĩnh vực sinh dược học tiên tiến; xây dựng quy trình từ nghiên cứu lý thuyết bằng mô hình dược lý in silico, thực nghiệm kiểm chứng in vitro và bước đầu thử nghiệm in vivo.

- Phối hợp hiệu quả các nghiên cứu lý thuyết về mô phỏng tính toán với nghiên cứu thực nghiệm về sinh dược học, tiềm năng hướng tới sản phẩm ứng dụng thực tiễn.

- Đề tài sử dụng nhiều phương pháp tiên tiến kết hợp giữa mô phỏng với thực nghiệm, xuất phát từ việc xây dựng các mô hình tính toán để sàng lọc được các hợp chất giảm đau có nguồn gốc thiên nhiên phù hợp với bối cảnh trong nước, từ đó tiến hành xây dựng mô hình *in vitro* và *in vivo* có định hướng ứng dụng thực tiễn cao, phát triển tiềm năng thương mại hóa sản phẩm. Đề tài là tiền đề thúc đẩy các nghiên cứu có tính liên ngành, nâng tầm khoa học công nghệ trên trường quốc tế.

- Đề tài có thể mang lại hiệu quả lâu dài trong hợp tác nghiên cứu và đào tạo giữa Trường ĐHKHTN và Viện nghiên cứu Julich nói riêng, cũng như giữa VN và CHLB Đức nói chung, góp phần nâng cao chất lượng nguồn nhân lực, làm chủ công nghệ trong lĩnh vực sinh dược học.

### 3. Về hiệu quả của nhiệm vụ:

#### 3.1. Hiệu quả kinh tế

Có tiềm năng trong tận dụng được các dược liệu có nguồn gốc thiên nhiên, phù hợp với địa hình và khí hậu của Việt Nam nhằm xây dựng cơ sở khoa học về cơ chế giảm đau của các dược liệu truyền thống.

#### 3.2. Hiệu quả xã hội

Nhiệm vụ đã tạo tiền đề trong việc xây dựng cơ sở sàng lọc thuốc ảo với hiệu suất cao, có thể triển khai hợp tác với các cơ sở nghiên cứu về y dược trong và ngoài nước.

### III. Tự đánh giá, xếp loại kết quả thực hiện nhiệm vụ

#### 1. Về tiến độ thực hiện: (đánh dấu ✓ vào ô tương ứng):

- Nộp hồ sơ đúng hạn
- Nộp chậm từ trên 30 ngày đến 06 tháng
- Nộp hồ sơ chậm trên 06 tháng

#### 2. Về kết quả thực hiện nhiệm vụ:

- Xuất sắc
- Đạt
- Không đạt

#### Giải thích lý do:

- Sản phẩm bài báo quốc tế có 4 bài báo so với đăng ký 5 bài báo, và có 1 bản thảo đã gửi đăng tạp chí ISI, đang được phản biện.


- Đề tài có các sản phẩm dạng 1 về hợp chất có tiềm năng giảm đau và dạng 4 về hỗ trợ đào tạo NCS vượt mức về số lượng. Ngoài ra tuy không đăng ký nhưng đề tài có 4 bài báo quốc tế công bố trên tạp chí ISI cùng đối tác CHLB Đức (không cảm ơn đề tài), tham gia tổ chức 2 hội thảo quốc tế ở Việt Nam, đào tạo nguồn nhân lực cho Việt Nam (trao đổi ngắn hạn chuyên gia nước ngoài đến Việt Nam và thành viên Việt Nam đến CHLB Đức) và chuyển giao mã nguồn phần mềm từ đối tác.
- Căn cứ theo khoản c, mục 2, Điều 13 Thông tư 11/2014/TT-BKH&CN ngày 30/5/2014 của Bộ KH&CN.

Cam đoan nội dung của Báo cáo là trung thực; Chủ nhiệm và các thành viên tham gia thực hiện nhiệm vụ không sử dụng kết quả nghiên cứu của người khác trái với quy định của pháp luật.

**CHỦ NHIỆM NHIỆM VỤ**  
(Học hàm, học vị, Họ, tên và chữ ký)



GS.TS. Nguyễn Thế Toàn

**THỦ TRƯỞNG**  
**TỔ CHỨC CHỦ TRÌ NHIỆM VỤ**   
(Họ, tên, chữ ký và đóng dấu)



**PHÓ HIỆU TRƯỞNG**

PGS.TS. Trần Mạnh Cường