

**LÝ LỊCH KHOA HỌC**  
(đến tháng 6 năm 2022)

1. **Họ và tên:** PHẠM THẾ HẢI  
2. **Ngày sinh:** 03/03/1984      **Nam/Nữ:** Nam      **Dân tộc:** Kinh  
3. **Học hàm:** Phó giáo sư      **Năm được phong:** 2022  
**Học vị:** Tiến sĩ dược học      **Năm đạt học vị:** 2013

**4. Lĩnh vực nghiên cứu trong 5 năm gần đây:**

- Hóa dược
- Công nghệ dược phẩm và bào chế thuốc
- Tin sinh học và hóa học tính toán

**Các hướng nghiên cứu chủ yếu:**

- 1) Nghiên cứu thiết kế cấu trúc và sàng lọc tìm kiếm hoạt chất mới có tác dụng sinh học tốt, có đặc điểm dược động học và độc tính phù hợp để phát triển thành thuốc.
- 2) Phát triển các công cụ, phương pháp nghiên cứu tin sinh - hóa tin học, phân tích dữ liệu y - sinh với hiệu năng cao, có thể ứng dụng hiệu quả trong nghiên cứu và phát triển thuốc mới cũng như nghiên cứu độc chất và các ngành liên quan sức khỏe.

**5. Chức danh nghiên cứu:**

**Chức vụ hiện nay:** Giảng viên

**6. Địa chỉ nhà riêng:** Vinhomes Gardenia, Hàm Nghi, Nam Từ Liêm, Hà Nội

**Điện thoại NR:**      ; **CQ:** 02439330531      ; **Di động:**

**E-mail:** haipham@hup.edu.vn

**7. Cơ quan - nơi làm việc của cá nhân:**

Tên cơ quan: Trường ĐH Dược Hà Nội

Địa chỉ cơ quan: 13-15 Lê Thánh Tông, quận Hoàn Kiếm, Thành phố Hà Nội

Điện thoại: (024) 382-545-39

Fax: (024) 3.826-4464, (024) 3933-2332

Website: <http://www.hup.edu.vn>

**8. Quá trình đào tạo**

Bậc đào tạo	Nơi đào tạo	Chuyên ngành	Thời gian
Đại học	Đại học Dược Hà Nội	Dược học	2002-2003
Đại học	Trường Đại học Tổng hợp "Camilo Cienfuegos" Matanzas	Dự bị tiếng Tây Ban Nha	2003-2004

Đại học	Khoa Hóa Dược-Trường Đại học Tổng hợp Las Villas, Cuba	Dược học	2004-2009
Tiến sỹ	Khoa Hóa Dược-Trường Đại học Tổng hợp Las Villas, Cuba	Dược học	2009-2013

### 9. Quá trình công tác

Thời gian	Cơ quan công tác	Địa chỉ / điện thoại	Chức vụ
2010-2012	Khoa Dược, Bào chế Dược học và Kỹ sinh trùng, Đại học Valencia	Av. Vicent Andrés Estellés, s/n 46100 Burjassot. València, Spain	Nghiên cứu viên
2014-2016	Bộ môn Dược lý, Trường Đại học Dược Hà Nội	13-15 Lê Thánh Tông, Q. Hoàn Kiếm TP Hà Nội	Giảng viên
2016-nay	Bộ môn Hoá Dược, Trường Đại Học Dược Hà Nội	13-15 Lê Thánh Tông, Q. Hoàn Kiếm TP Hà Nội	Giảng viên

### 10. Trình độ ngoại ngữ (mỗi mục đề nghị ghi rõ mức độ: Tốt/Khá/TB)

TT	Ngoại ngữ	Đọc	Viết	Nói	Ghi chú
1	Tiếng Anh	Tốt	Tốt	Tốt	B2
2	Tiếng Tây Ban Nha	Tốt	Tốt	Tốt	Đại học

### 11. Danh sách đề tài/dự án nghiên cứu đã tham gia thực hiện

TT	Tên đề tài/dự án	Cơ quan tài trợ kinh phí	Thời gian thực hiện	Vai trò
1	Mạng lưới phát triển các phương pháp dược động học hợp lý nhằm nâng cao năng lực và ảnh hưởng xã hội của các ngành công nghiệp Dược địa phương (Mạng-Biofarma).	Ủy ban Châu Âu. Văn phòng hợp tác EuropeAid	10/2011-10/2014	Thành viên nghiên cứu chủ chốt
2	Dự đoán độc thủy sản của các hợp chất hữu cơ từ các cấu trúc phân tử sử dụng hệ thống tổ hợp dựa trên các kỹ thuật thống kê và trí tuệ nhân tạo	Đại học Công giáo Ecuador Esmeraldas	12/2013-12/2014	Tham gia
3	Phát triển sản phẩm thực phẩm chức năng và mỹ phẩm làm sáng da, chống nám từ nguyên liệu thiên nhiên Việt Nam	ĐHQG Hà Nội	02/2017-02/2020	Thành viên nghiên cứu chủ chốt
4	Dự đoán sinh khả dụng của thuốc dựa trên cấu trúc hóa học, tương tác thuốc - glycoprotein P và tương tác thuốc - CYP3A4	Đại học Dược Hà Nội	03/2015-03/2016	Chủ nhiệm đề tài
5	Xây dựng mô hình toán học mới nhằm phát hiện các hợp chất ức chế hệ thống ubiquitin-proteasome chỉ từ thông tin cấu trúc phân tử	Khoa Y Dược, ĐHQG, Hà Nội	05/2015-06/2016	Tham gia
6	Thiết kế, tổng hợp, thử tác dụng ức chế histone	Quỹ phát	10/2016-	Thành viên

	deacetylase và tác dụng kháng ung thư của các dẫn chất kiểu lai hóa quinazolin-acid hydroxamic	triển KH&CN Quốc gia NAFOSTED	10/2019	nghiên cứu chủ chốt
7	Sàng lọc in silico, thiết kế phân tử và tổng hợp các hợp chất hóa học có tác dụng ức chế enzyme histone deacetylase (HDAC)	ĐHQG Hà Nội	12/2015-11/2017	Thành viên nghiên cứu chủ chốt
8	Phát hiện hợp chất dẫn đường có tác dụng làm bền vững cấu trúc G4-DNA, có đặc điểm được động học và độc tính phù hợp để phát triển thành thuốc chống ung thư mới	Quỹ phát triển KH&CN Quốc gia NAFOSTED	12/2017-12/2020	Chủ nhiệm đề tài
9	Thiết kế, tổng hợp, thử tác dụng kháng ung thư của một số dãy dẫn chất acylhydrazon mới hướng hoạt hóa caspase	Quỹ phát triển KH&CN Quốc gia NAFOSTED	12/2017-12/2020	Thư ký khoa học
10	Thiết kế, tổng hợp và đánh giá hoạt tính kháng ung thư của một số dãy dẫn chất acetohydrazid mới mang hệ dị vòng hướng hoạt hóa caspase	Quỹ phát triển KH&CN Quốc gia NAFOSTED	12/2018-12/2021	Thành viên nghiên cứu chủ chốt
11	Thiết kế, tổng hợp và đánh giá hoạt tính kháng ung thư của một số dãy dẫn chất N-arylidencarbamoylaceto hydrazid dạng lai hóa hướng hoạt hóa caspase và/hoặc ức chế tubulin	Quỹ phát triển KH&CN Quốc gia NAFOSTED	12/2019-12/2022	Thành viên nghiên cứu chủ chốt
12	Thiết kế, tổng hợp, thử tác dụng kháng ung thư của các dẫn chất N-hydroxypropenamid, N-hydroxyheptanamid và acid benzhydroxamic mới mang dị vòng	Quỹ phát triển KH&CN Quốc gia NAFOSTED	12/2019-12/2022	Thành viên nghiên cứu chủ chốt
13	Thiết kế, tổng hợp, thử tác dụng kháng ung thư của các dẫn chất N-hydroxybenzamid mới	Quỹ phát triển KH&CN Quốc gia NAFOSTED	6/2018-6/2021	Thành viên nghiên cứu chủ chốt
14	Thiết kế, tổng hợp, thử tác dụng kháng ung thư của các dẫn chất N-hydroxyacrylamid mới mang dị vòng hướng ức chế histone deacetylase	Quỹ phát triển KH&CN Quốc gia NAFOSTED	8/2020-8/2023	Thành viên nghiên cứu chủ chốt
15	Thiết kế, tổng hợp, thử tác dụng kháng ung thư của các dẫn chất N-hydroxyacrylamid mới mang	Quỹ phát triển	12/2020-12/2023	Thành viên nghiên cứu

dị vòng hướng ức chế histone deacetylase	KH&CN Quốc gia NAFOSTED		chủ chốt
--	-------------------------------	--	----------

## 12. Các công trình KH&CN chủ yếu được công bố

ST T	Tên bài báo / báo cáo KH	Tên tạp chí hoặc kỷ yếu khoa học/ ISSN hoặc ISBN	Tập, số, trang	Năm công bố
	<b>Tạp chí quốc tế</b>			
1	Prioritizing Hits with Appropriate Trade-Offs Between HIV-1 Reverse Transcriptase Inhibitory Efficacy and MT4 Blood Cells Toxicity Through Desirability-Based Multiobjective Optimization and Ranking	<b>Molecular Informatics</b> , ISSN: 1868-1751 ISI (Q2), IF: 2,375	29(4), 303-321	2010
2	In Silico Prediction of Caco-2 Cell Permeability by a Classification QSAR Approach	<b>Molecular Informatics</b> , ISSN: 1868-1751 ISI (Q2), IF: 2,375	30(4), 376-385	2011
3	QSPR in oral bioavailability: specificity or integrality?	<b>Mini-Reviews in Medicinal Chemistry</b> , ISSN: 1875-5607 ISI (Q2), IF: 3,862	12(6), 534-550	2012
4	Provisional Classification and in Silico Study of Biopharmaceutical System Based on Caco-2 Cell Permeability and Dose Number	<b>Molecular Pharmaceutics</b> , ISSN: 1543-8392 ISI (Q1), IF: 4,396	10(6), 2445-2461	2013
5	The Use of Rule-Based and QSPR Approaches in ADME Profiling: A Case Study on Caco-2 Permeability	<b>Molecular Informatics</b> , ISSN: 1868-1751 ISI (Q2), IF: 2,375	32(5-6), 459-479	2013
6	Novel 3-Substituted-2-Oxindoline-Based N-hydroxypropenamides as Histone Deacetylase Inhibitors and Antitumor Agents	<b>Medicinal Chemistry</b> , ISSN: 1875-6638 ISI (Q3), IF: 2,745	11(8), 725-735	2015
7	Multi-Criteria Decision Making: the Best Choice for the Modeling of Chemicals against Hyper-pigmentation?	<b>Current Bioinformatics</b> , ISSN: 2212-392X ISI (Q3), IF: 3,543	10(5), 520-532	2015
8	Towards computational prediction of Biopharmaceutics Classification System: a QSPR approach	<b>SciForum (MOL2NET, International Conference on Multidisciplinary Sciences)</b> , ISSN: 2624-5078	b008. Tr. 1-11. DOI: 10.3390/MOL2NET-1-b008	2015
9	Exploring different strategies for imbalanced ADME data problem: case study on Caco-2	<b>Molecular Diversity</b> ,	20(1), 93-109	2016

	permeability modeling	ISSN: 1573-501X ISI (Q2), IF: 2,032		
10	Prediction of acute toxicity of phenol derivatives using multiple linear regression approach for <i>Tetrahymena pyriformis</i> contaminant identification in a median-size database	<b>Chemosphere</b> , ISSN: 0045-6535 ISI (Q1), IF: 5,108	Vol. 165, 434-441	2016
11	A Two QSAR Way for Antidiabetic Agents Targeting using $\alpha$ -Amylase and $\alpha$ -Glucosidase Inhibitors: Model Parameters Settings in Artificial Intelligence Techniques	<b>Letters in Drug Design &amp; Discovery</b> , ISSN: 1875-628X ISI (Q3), IF: 1,15	14(8), 862-868	2017
12	Learning from Multiple Classifier Systems: Perspectives for Improving Decision Making of QSAR Models in Medicinal Chemistry	<b>Current Topics in Medicinal Chemistry</b> , ISSN: 1568-0266 ISI (Q2), IF: 3,442	17(3), 3269-3288	2018
13	Design, synthesis and evaluation of novel N-hydroxybenzamides/N-hydroxypropenamides incorporating quinazolin-4(3H)-ones as histone deacetylase inhibitors and antitumor agents	<b>Bioorganic Chemistry</b> , ISSN: 1090-2120 ISI (Q2), IF: 5,275	T. 76, 258-267	2017
14	Machine learning-based models to predict modes of toxic action of phenols to <i>Tetrahymena pyriformis</i>	<b>SAR and QSAR in Environmental Research</b> , ISSN: 1029-046X ISI (Q2), IF: 3,000	28(9), 735-747	2017
15	Exploration of Some Thiazolidine-2,4-dione and 2-Oxoindoline Derivatives Incorporating 3,4,5-Trimethoxybenzyl Moiety as Novel Anticancer Agents	<b>Letters in Drug Design &amp; Discovery</b> , ISSN: 1875-628X ISI (Q3), IF: 1,15	15(4), 375-387	2017
16	Exploration of Some Indole-Based Hydroxamic Acids as Histone Deacetylase Inhibitors and Antitumor Agents	<b>Chemical Papers</b> , ISSN: 1336-9075 ISI (Q2), IF: 2,097	T.71, 1759–1769	2017
17	QuBiLS-MAS, Open Source Multi-Platform Software for Atom- and Bond-based Topological (2D) and Chiral (2.5D) Algebraic Molecular Descriptors Computations	<b>Journal of Cheminformatics</b> , ISSN: 1758-2946 ISI (Q1), IF: 4,154	9(1), 35	2017
18	Blood-Brain Barrier Passage Prediction Using Decision Tree	<b>SciForum (MOL2NET, International Conference on Multidisciplinary Sciences)</b> , ISSN: 2624-5078	Sciforum-014467. Tr. 1-2. DOI: 10.3390/mol2net-03-04627 13(7), 664-669	2017

19	Dry selection and wet evaluation for the rational discovery of new anthelmintics	<b>Molecular Physics,</b> ISSN: 1362-3028 ISI (Q2), IF: 1,962	115(17-18), 2300-2313	2017
20	Quantitative structure–activity relationship analysis and virtual screening studies for identifying HDAC2 inhibitors from known HDAC bioactive chemical libraries	<b>SAR and QSAR in Environmental Research,</b> ISSN: 1029-046X ISI (Q2), IF: 3,000	28(3), 199-220	2017
21	A Simple Method to Predict Blood-Brain Barrier Permeability of Drug- Like Compounds Using Classification Trees	<b>Medicinal Chemistry,</b> ISSN: 1875-6638 ISI (Q3), IF: 2,745	13(7), 664-669	2017
22	Novel N-Hydroxybenzamides Incorporating 2-Oxoindoline with Unexpected Potent Histone Deacetylase Inhibitory Effects and Antitumor Cytotoxicity	<b>Bioorganic Chemistry,</b> ISSN: 1090-2120 ISI (Q2), IF: 5,275	T. 71, 160-169	2017
23	In silico Study of The Pharmacologic Properties of Bioactive Compounds Isolated from The Fruits of Three Species of <i>Cleistanthus</i> genus (Euphorbiaceae)	The 2 <sup>nd</sup> International Conference on pharmacy education and research network of ASEAN	Tr. 306-316	2017
24	Atom based Linear Index Descriptors in QSAR-Machine Learning Classifiers for the Prediction of Ubiquitin-Proteasome Pathway Activity	<b>Medicinal Chemistry Research,</b> ISSN: 1554-8120 ISI (Q2), IF: 1,965	T. 27, 695-704	2018
25	In silico assessment of ADME properties: Advances in Caco-2 Cell Monolayer Permeability Modeling	<b>Current Topics in Medicinal Chemistry,</b> ISSN: 1568-0266 ISI (Q2), IF: 3,442	18(26), 2209-2229	2018
26	Computational identification of chemical compounds with potential activity against <i>Leishmania amazonensis</i> using nonlinear machine learning techniques	<b>Current Topics in Medicinal Chemistry,</b> ISSN: 1568-0266 ISI (Q2), IF: 3,442	18(27), 2347-2354	2018
27	Design, Synthesis and Evaluation of Novel 3/4-((Substituted benzamidophenoxy)methyl)-N-hydroxybenzamides / propenamides as Histone Deacetylase Inhibitors and Antitumor Agents	<b>Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry,</b> ISSN: 1871-5206 ISI (Q3), IF: 2,505	19(4), 546-556	2019
28	Design, synthesis and evaluation of novel hybrids between 4-anilinoquinazolines and substituted triazoles as potent cytotoxic agents	<b>Bioorganic &amp; Medicinal Chemistry Letters,</b> ISSN: 0960-894X ISI (Q1), IF: 2,823	28(23-24), 3741-3747	2018

29	Integrating Structure and Ligand-based Approaches for Modelling the Histone Deacetylase Inhibition Activity of Hydroxamic Acid Derivatives	<b>Asian Journal of Pharmaceutical and Clinical Research,</b> ISSN: 0974-2441 SCOPUS (Q3)	11(2), 198-206	2018
30	(E)-N'-Arylidene-2-(3-oxo-2,3-dihydro-4H-benzo[b][1,4]oxazin-4-yl)acetohydrazides: Synthesis and Evaluation of Caspase Activation Activity and Cytotoxicity	<b>Chemistry &amp; Biodiversity,</b> ISSN: 1612-1880 ISI (Q2), IF: 2,408	15(10), e1800322	2018
31	Novel hydroxamic acids incorporating 1-((1H-1,2,3-Triazol-4-yl)methyl)-3-hydroxyimino-indolin-2-ones: synthesis, biological evaluation, and SAR analysis	<b>Journal of Chemical Sciences,</b> ISSN: 0973-7103 ISI (Q2), IF: 1,573	T. 130, 63	2018
32	Integrating theoretical and experimental permeability estimations for provisional biopharmaceutical classification: Application to the WHO essential medicines	<b>Biopharmaceutics &amp; Drug Disposition,</b> ISSN: 0142-2782 ISI (Q2), IF: 1,611	39(7), 354-368	2018
33	Novel Hydroxamic Acids Incorporating 1-((1H-1,2,3-Triazol-4-yl)methyl)-3-substituted-2-oxoindolines: Synthesis, Biological Evaluation and SAR Analysis	<b>Medicinal Chemistry</b> ISSN: 1875-6638 ISI (Q3), IF: 2,745	14(8), 831-850	2018
34	Quinazoline-based Hydroxamic Acids: Design, Synthesis and Evaluation of Histone Deacetylase Inhibitory Effects and Cytotoxicity	<b>Chemistry &amp; Biodiversity,</b> ISSN: 1612-1880 ISI (Q2), IF: 2,408	15(6), e1800027	2018
35	A desirability-based multi objective approach for the virtual screening discovery of broad-spectrum anti-gastric cancer agents	<b>PLoS ONE,</b> ISSN: 1932-6203 ISI (Q1), IF: 3,240	13(2), e0192176	2018
36	Computational modeling of human oral bioavailability: what will be next?	<b>Expert Opinion on Drug Discovery,</b> ISSN: 1746-0441 ISI (Q1), IF: 4,421	13(6), 509-521	2018
37	Radicular cyst in a primary molar following pulp therapy used gutta-percha: A case report and literature review	<b>Journal of Clinical and Experimental Dentistry,</b> ISSN: 1989-5488 SCOPUS (Q2)	11(1), e85-e90	2019
38	Quinazolin-4(3H)-one-based Hydroxamic Acids: Design, Synthesis and Evaluation of Histone Deacetylase Inhibitory Effects and Cytotoxicity	<b>Chemistry &amp; Biodiversity,</b> ISSN: 1612-1880	16(4), e1800502	2019

		ISI (Q2), IF: 2,408		
39	Machine Learning Applications in Nanomedicine and Nanotoxicology: An Overview	<b>International Journal of Applied Nanotechnology Research (IJANR)</b> , ISSN: 2640-0383	4(1), 1-7	2019
40	(E)-N'-Arylidene-2-(4-oxoquinazolin-4(3H)-yl)acetohydrazides: Synthesis and Evaluation of Antitumor Cytotoxicity and Caspase Activation Activity	<b>Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry</b> , ISSN: 1475-6366 ISI (Q1), IF: 5.051	34(1), 465-478	2019
41	Beyond Model Interpretability using LDA and Decision Trees for $\alpha$ -Amylase and $\alpha$ -Glucosidase Inhibitor Classification Studies	<b>Chemical Biology &amp; Drug Design</b> , ISSN: 1747-0285 ISI (Q2), IF: 2,256	94(1), 1414-1421	2019
43	Higher-Order and Mixed Discrete Derivatives like a Novel Graph-Theoretical Invariant for Generating New Molecular Descriptors	<b>Current Topics in Medicinal Chemistry</b> , ISSN: 1568-0266 ISI (Q2), IF: 3,442	19(11), 944 - 956	2019
44	Design, Synthesis and Biological Evaluation of Novel N-hydroxyheptanamides Incorporating 6-hydroxy-2-methylquinazolin-4(3H)-ones as Histone Deacetylase Inhibitors and Cytotoxic Agents	<b>Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry</b> , ISSN: 1871-5206 ISI (Q3), IF: 2,505	19(12), 1543-1557	2019
45	Novel 3,4-Dihydro-4-oxoquinazoline-based Acetohydrazides: Design, Synthesis and Evaluation of Antitumor Cytotoxicity and Caspase Activation Activity	<b>Bioorganic Chemistry</b> , ISSN: 1090-2120 ISI (Q2), IF: 5,275	T. 92, 103202	2019
46	Design, Synthesis and Bioevaluation of Novel Oxindolin-2-one Derivatives Incorporating 1-Benzyl-1H-1,2,3-triazole	<b>Medicinal Chemistry Research</b> , ISSN: 1554-8120 ISI (Q2), IF: 1,965	T. 29, 396-408	2019
47	New Acetohydrazides Incorporating 2-Oxindoline and 4-Oxoquinazoline: Synthesis and Evaluation of Cytotoxicity and Caspase Activation Activity	<b>Chemistry &amp; Biodiversity</b> , ISSN: 1612-1880 ISI (Q2), IF: 2,408	17(3), e1900670	2020
48	Design, Synthesis and Bioevaluation of Two Series of 3-((1-Benzyl-1H-1,2,3-triazol-4-yl)methyl)quinazolin-4(3H)-ones and N-(1-benzylpiperidin-4-yl)quinazolin-4-amines	<b>Chemistry &amp; Biodiversity</b> , ISSN: 1612-1880 ISI (Q2), IF: 2,408	17(7): e2000290	2020
49	Emerging Role of Circulating Tumor Cells	<b>Cancers (Basel)</b> ,	12(3), 695	2020



	in Gastric Cancer	ISSN 2072-6694 ISI (Q1), IF: 6,639		
50	Exploration of Certain 1,3-Oxazole- and 1,3-Thiazole-Based Hydroxamic Acids as Histone Deacetylase Inhibitors and Antitumor Agents	<b>Bioorganic Chemistry</b> , ISSN: 1090-2120 ISI (Q2), IF: 5,275	T. 101, 103988	2020
51	Synthesis and biological evaluation of novel quinazoline-triazole hybrid compounds with potential use in Alzheimer's disease	<b>Bioorganic &amp; Medicinal Chemistry Letters</b> , ISSN: 0960-894X ISI (Q1), IF: 2,823	30(18): 127404	2020
52	Design, Synthesis and Evaluation of Novel Indirubin-based N-Hydroxybenzamides, N-Hydroxypropenamides and N-Hydroxyheptanamides as Histone Deacetylase Inhibitors and Antitumor Agents	<b>Bioorganic &amp; Medicinal Chemistry Letters</b> , ISSN: 0960-894X ISI (Q1), IF: 2,823	30(22): 127537	2020
53	Design, synthesis, and evaluation of novel N'-substituted-1-(4-chlorobenzyl)-1H-indol-3-carbohydrazides as antitumor agents	<b>Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry</b> , ISSN: 1475-6366 ISI (Q1), IF: 5.051	35(1): 1854-1865	2020
54	Novel Conjugated Quinazolinone-Based Hydroxamic Acids: Design, Synthesis and Biological Evaluation	<b>Medicinal Chemistry</b> , ISSN: 1875-6638 ISI (Q3), IF: 2,745	17(7): 732-749	2021
55	Computational identification of chemical compounds with potential anti-Chagas activity using a classification tree	<b>SAR and QSAR in Environmental Research</b> , ISSN: 1029-046X ISI (Q2), IF: 3,000	32(1): 71-83	2021
56	Novel 4-Oxoquinazoline-Based N - Hydroxypropenamides as Histone Deacetylase Inhibitors: Design, Synthesis, and Biological Evaluation	<b>ACS Omega</b> , ISSN: 2470-1343 ISI (Q1), IF: 3,512	6:4907-4920	2021
57	Potentialities and applications of computational design methods in environmental and pharmacokinetic studies	<b>Anales de la Academia de Ciencias de Cuba</b> ISSN: 2304-0106	11:1-11	2021
58	Design, synthesis, and evaluation of novel (E)-N'-(3-allyl-2-hydroxy)benzylidene-2-(4-oxoquinazolin-3(4H)-yl)acetohydrazides as antitumor agents	<b>Archiv der Pharmazie</b> ISSN: 1521-4184 ISI (Q2), IF: 3,751	355(1):e2100216	2021
59	Design, Synthesis and Evaluation of Novel (E)-N'-((1-(4-chlorobenzyl)-1H-indol-3-yl)methylene)-2-(4-oxoquinazolin-3(4H)-yl)acetohydrazides as Antitumor Agents	<b>Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry</b> ISSN: 1871-5206 ISI (Q3), IF: 2.505	22: DOI: 10.2174/1871520622666220118154914	2021

60	Ligand-based discovery of new potential acetylcholinesterase inhibitors for Alzheimer's disease treatment Ligand-based discovery of new potential acetylcholinesterase inhibitors for Alzheimer's disease treatment	<b>SAR and QSAR in environmental research</b> ISSN: 1029-046X ISI (Q2), IF: 3,000	33(1):49-61	2022
61	Essential oils of Uvaria boniana – chemical composition, in vitro bioactivity, docking, and in silico ADMET profiling of selective major compounds	<b>Zeitschrift fur Naturforschung C</b> ISSN: 1865-7125 ISI (Q2), IF: 1.632	77(5-6):207-218	2022
62	A Review of Computational Approaches Targeting SARS-CoV-2 Main Protease to the Discovery of New Potential Antiviral Compounds	<b>Current Topics in Medicinal Chemistry</b> ISSN: 1568-0266 ISI (Q2), IF: 3,442	DOI: 10.2174/2667387816666220426133555	2022
<b>2</b>	<b>Tạp chí quốc gia</b>			
1	Dược di truyền học: Tính đa hình hệ enzyme Cytochrome P450 và các phản ứng có hại của thuốc	<b>Tạp chí Dược học,</b> ISSN: 0866-7861	T.54, S.9, Tr. 2-8	2014
2	Dược di truyền học: Các vấn đề liên quan trong điều trị tăng huyết áp	<b>Tạp chí Dược học,</b> ISSN: 0866-7861	T.55, S.6, Tr. 2-6	2015
3	Xây dựng mô hình toán học mới nhằm phát hiện hợp chất ức chế hệ thống ubiquitin-proteasome chỉ từ thông tin cấu trúc phân tử	<b>Tạp chí Dược học,</b> ISSN: 0866-7861	T.55, S.10, Tr. 54-58	2015
4	Xây dựng mô hình toán học nhằm phát hiện hợp chất ức chế tyrosinase mới chỉ từ cấu trúc phân tử	<b>Tạp chí Nghiên cứu Dược &amp; Thông tin thuốc,</b> ISSN: 1859-364X	T. 6, S. 1/2015, Tr. 6-10	2015
5	QSAR study on Flavonoids as b-Secretase Inhibitors	<b>Journal of Medicinal Materials,</b> ISSN: 1859-4735	T. 21, S. 5, Tr. 329-333	2016
6	Xây dựng mô hình QSAR dự đoán tác dụng chống oxy hóa của các hợp chất flavonoid	<b>Tạp chí Nghiên cứu Dược &amp; Thông tin thuốc,</b>	T. 7, S. 4+5, Tr. 123-128	2016
7	Xây dựng mô hình toán học dự đoán sinh khả dụng của thuốc uống dựa trên cấu trúc phân tử và tương tác thuốc-CYP3A4/Pgp	<b>Tạp chí Dược học,</b> ISSN: 0866-7861	T. 65, S. 3, Tr. 42-45	2016
8	Xây dựng mô hình liên quan định lượng giữa cấu trúc và tác dụng ứng dụng trong sàng lọc tìm kiếm chất ức chế histon deacetylase	<b>Tạp chí Khoa học ĐHQG: Khoa học Y Dược,</b> ISSN: 0866-8612	T. 32, S. 2, Tr. 10-16	2016

9	Thiết kế, tổng hợp các dẫn chất dị vòng của N-(3-methoxy-4-aminoalkoxyphenyl) thiourea mới hướng tới thử tác dụng ức chế enzym Glutaminyl cyclase trong điều trị bệnh Alzheimer	<b>Tạp chí Nghiên cứu Dược &amp; Thông tin thuốc,</b> ISSN: 1859-364X	T. 7, S. 4+5, Tr. 123-128	2016
10	Sàng lọc hợp chất có tác dụng ức chế enzym tyrosinase bằng phương pháp in silico – in vitro	<b>Tạp chí Khoa học ĐHQG: Khoa học Y Dược,</b> ISSN: 0866-8612	T. 33, S. 1, Tr. 12-18	2017
11	Ứng dụng phương pháp thiết kế và phân tích dữ liệu In silico (ISIDA) trong thiết kế dẫn chất acid hydroxamic mới ức chế HDAC2	<b>Tạp chí Khoa học ĐHQG: Khoa học Y Dược,</b> ISSN: 0866-8612	T. 33, S. 2, Tr. 7-13	2017
12	Xây dựng mô hình liên quan định lượng cấu trúc – tác dụng (QSAR) trong thiết kế dẫn chất acid hydroxamic mới hướng ức chế histon deacetylase 2 (HDAC2)	<b>Tạp chí Nghiên cứu Dược &amp; Thông tin thuốc,</b> ISSN: 1859-364X	T. 8, S. 6, Tr. 18-23	2017
13	Sàng lọc in silico các hợp chất flavonoid tiềm năng có tác dụng ức chế UPD-Galactopyranose mutase (UGM)	<b>Tạp chí Nghiên cứu Dược &amp; Thông tin thuốc,</b> ISSN: 1859-364X	T. 9, S. 2, Tr. 17-21	2018
14	Sàng lọc in silico, thiết kế phân tử và tổng hợp các hợp chất hóa học có tác dụng ức chế enzym histon deacetylase (HDAC)	<b>Tạp chí Khoa học ĐHQG: Khoa học Y Dược,</b> ISSN: 0866-8612	T. 34, S. 1, Tr. 20-28	2018
15	Sàng lọc in silico các hợp chất flavonoid tiềm năng có tác dụng ức chế UDP-Galactopyranose mutase (UGM)	<b>Tạp chí Nghiên cứu Dược &amp; Thông tin thuốc,</b> ISSN: 1859-364X	Tập 9, số 2/ 2018, Tr. 17- 21	2018
16	Sàng lọc ảo các hợp chất có hoạt tính ức chế enzym ACE2 nhằm điều trị bệnh COVID-19 bằng phương pháp docking phân tử	<b>Tạp chí Khoa học ĐHQG: Khoa học Y Dược,</b> ISSN: 0866-8612	Vol. 36, No. 4, Tr. 1-11	2020
17	Đánh giá các hợp chất ức chế enzym Protein tyrosin phosphatase 1B nhằm điều trị bệnh đái tháo đường tuýp 2 từ cây Mướp đắng bằng phương pháp docking phân tử	<b>Tạp chí Khoa học ĐHQG: Khoa học Y Dược,</b> ISSN: 0866-8612	Vol. 37, No. 2, Tr. 39-49	2021

18	In silico screening of drug inhibitors of SARS-CoV-2 RNA-dependent RNA polymerase target	<b>Vietnam Journal of Science, Technology and Engineering</b> ISSN: 2525-2461	Vol. 63, No. 4, Tr. 47-54	2021
----	--	--	------------------------------	------

**14. Biên soạn sách tham khảo, chuyên khảo phục vụ đào tạo - trung cấp, cao đẳng, đại học và sau đại học:**

1	<b>Chương IX: Métodos in silico para solubilidad</b> <i>Sách tham khảo tiếng Tây Ban Nha: Metodologías Biofarmacéuticas en el desarrollo de Medicamentos</i>	Miguel Angel Cabrera Perez, Hai Pham The	NXB Đại học Miguel Hernández (Tây Ban Nha) ISBN: 978-84-16024-16-2	2015
2	<b>Chương XVIII: Métodos in silico para permeabilidad</b> <i>Sách tham khảo tiếng Tây Ban Nha: Metodologías Biofarmacéuticas en el desarrollo de Medicamentos</i>	Miguel Angel Cabrera Perez, Hai Pham The	NXB Đại học Miguel Hernández (Tây Ban Nha) ISBN: 978-84-16024-16-2	2015

**15. Hội nghị khoa học quốc tế**

1	Computational chemistry approach for the early detection of drug-induced idiosyncratic liver toxicity	XIX Conference of Chemistry, Santiago de Cuba, Cuba		2008
2	Classification QSAR models to predict intestinal permeability in Caco-2 cells	IV SIMPOSIO INTERNACIONAL DE QUIMICA (SIQ'2010), Villa Clara, Cuba		2010
3	In silico prediction of caco-2 cell permeability by a classification QSAR approach	XVIII Conference of European Symposium on QSAR: Discovery Informatics & Drug Design, Rodas, Grecia		2010
4	In silico contribution to Biopharmaceutics Classification System (BCS):Caco.2 permeability prediction	Conference of Farmacología Habana 2010. Primer Taller de Investigación- Desarrollo de Fármacos Genéricos, Habana, Cuba		2010
5	QSAR Approach to Classify Permeability in Caco-2 Cells	Conference of X Congreso de la Sociedad Española de Farmacia Industrial y Galénica. Universidad de Complutense, Madrid, Spain		2011
6	Mining the skewed data: an application of over-sampling strategy in absorption prediction problema	Conference of 8vo Seminario de Estudios Avanzados de Diseño Molecular y Bioinformática (SEADIM 8), Varadero, Cuba.		2011
7	Una estrategia multi-objetivo para el tamizaje virtual de inhibidores no nucleosidos de la transcritasa reversa de VIH-1	VIII Congreso Internacional de Química e Ingeniería Química, La Habana, Cuba		2012

8	Nuevas aproximaciones in-silico para la Clasificación de la permeabilidad intestinal de fármacos	Conference of CubaFARMACIA, Habana, Cuba	2012
9	The use of Rule-of-Thumb and QSPR models in ADME profiling: a case study on Caco-2 permeability	Conference of 19th EuroQSAR, Viena, Austria	2012
10	Modelos basados en reglas y QSPR para la predicción de la permeabilidad en Caco-2	Conference of SEFIG, Alicante, Spain	2012
11	In-silico Biopharmaceutical Systems for Provisional Classification of Oral Drugs	Annual Meeting of the Population Approach Group in Europe, Alicante, Spain	2014
12	In silico Biopharmaceutical System for Provisional Classification of Oral Drugs	Asian network symposium on Drug Discovery 2014, Chungbuk, Korea	2014
13	Towards computational prediction of Biopharmaceutics Classification System: a QSPR approach	Proceedings of the MOL2NET, 5–15 December 2015	2015
14	Nueva Base de Datos para la Clasificación Biofarmacéutica Provisional de Ingredientes Farmacéuticos Activos: Aplicación al Cuadro Básico de Medicamentos Cubanos	3rd International Congress - Research - Development and Innovative Technology in Biopharmaceutic Industry	2015
15	Blood-Brain Barrier Passage Prediction Using Decision Tree	MOL2NET-03. Section 02. OMICs, Biotechnology, Bioinformatics, Neurosciences, and Biomedical Engineering	2017
16	Classification QSAR models to predict human oral bioavailability from molecular structure: A relationship among P-Glycoprotein, CYP3A4 and bioavailability	2nd Asia Conference on Pharmaceutical Sciences (ASIA PHARM II). Seoul National University, Seoul, Korea	2017
17	The role of Pharmacoinformatics in modern Drug design and development	Invited International Researcher. North Dakota State University, Fargo. 17-25 December	2019
18	A desirability-based multi objective approach for the virtual screening discovery of broad-spectrum anti-gastric cancer agents	The 3rd International Conference on Pharmacy Education and Research Network of ASEAN - ASEAN PharmNET 2019	2019
19	QSARINS Based Computational Identification of Sars-Cov-2 Main Protease Inhibitors	MOL2NET-2021. Section 02. OMICs, Biotechnology, Bioinformatics, Neurosciences, and Biomedical Engineering	2021

## 16. Số lượng văn bằng bảo hộ sở hữu trí tuệ đã được cấp

STT	Tên và nội dung văn bằng	Năm cấp văn bằng
1	Novel 3-((1-Benzyl-1H-1,2,3-triazol-4-yl)methyl)quinazolin-4(3H)-ones and N-(1-benzylpiperidin-4-yl)quinazolin-4-amines and its use	Korean Patent No. 10-2020-0042040 (số nhận hồ sơ: 1-1-2020-0359420-65) Ngày 2018.05.25

## 17. Giải thưởng (về KH&CN, về chất lượng sản phẩm,...)

STT	Hình thức và nội dung giải thưởng	Năm tặng thưởng
-----	-----------------------------------	-----------------

1	Chiến lược nghiên cứu mới dựa trên tính toán-thực nghiệm trong phân nhóm sinh dược học các thuốc và ứng dụng trong phát triển thuốc generic cũng như sản phẩm dược phẩm tiên tiến khác. <i>Tác giả:</i> M. Á. Cabrera Perez; <b>Hai Pham-The</b> ; M. Bermejo Sanz; I. Gonzales Alvarez <b>Giải thưởng hàng năm của Viện Hàn lâm Khoa học Quốc gia, Cộng hòa Cu-Ba</b>	Trao tại La Havana, 20 tháng 3 năm 2015
2	Dự đoán độc tính cấp tính của các dẫn xuất phenol đối với Tetrahymena Pyriformis sử dụng phân tích hồi quy đa tuyến tính: phát hiện chất gây ô nhiễm từ thư viện hóa học kích thích trung bình <i>Tác giả:</i> Juan Alberto Castillo Garit, Huong Le Thi Thu, <b>Hai Pham The</b> , Gerardo M. Casañola Martin, Karel Diéguez Santana, Pedro Julio Villegas Aguilar. <b>Giải thưởng thường niên ngành Y tế, Cộng hòa Cu-Ba, lần thứ XLII năm 2017, hạng mục bài báo quốc tế</b>	Trao tại La Havana, 28 tháng 10 năm 2017
3	Một phương pháp đơn giản dựa trên cây phân lớp cho phép dự đoán tính thấm của dược chất qua hàng rào máu não. <i>Tác giả:</i> Juan A. Castillo Garit, Huong Le Thi Thu, Gerardo M. Casañola Martin, <b>Hai Pham The</b> , Stephen J. Barigye <b>Giải thưởng thường niên ngành Y tế, Cộng hòa Cu-Ba, lần thứ XLIII năm 2018, hạng mục bài báo quốc tế</b>	Trao tại La Havana, 27 tháng 10 năm 2018
4	Ứng dụng và tiềm năng của các phương pháp thiết kế tính toán trong nghiên cứu môi trường và dược động học <i>Tác giả:</i> Juan Alberto Castillo Garit, Humberto Gonzalez Díaz, Yudith Canizares Carmenate, Francisco Torrens Zaragoza, <b>Hai Pham-The</b> , Yoan Martinez Lopez, Karel Diéguez Santana <b>Giải thưởng hàng năm của Viện Hàn lâm Khoa học Quốc gia, Cộng hòa Cu-Ba</b>	Trao tại La Havana, tháng 3 năm 2020

## 18. Danh sách đào tạo sau đại học

Nghiên cứu sinh (Tiến sỹ)				
TT	Tên học viên	Tên đề tài	Cán bộ hướng dẫn	Năm bảo vệ
1	Đoàn Thanh Hiếu	Thiết kế, tổng hợp, thử tác dụng ức chế histon deacetylase và tác dụng kháng ung thư của các dẫn chất kiểu lai hóa quinazolin-acid hydroxamic	TS. Phạm Thế Hải GS.TS. Sang-Bae Han	2017-2021
2	Nguyễn Phương Nhung	Xác định các hợp chất chống ung thư bằng phương pháp hoá học di truyền.	TS. Phạm Thế Hải TS. Nguyễn Thị Kiều Oanh	2018-2021
Cao học (Thạc sỹ)				

1	Trịnh Tuấn Dũng	Xây dựng các mô hình toán học mới nhằm xác định phân lớp sinh dược học của một số thuốc trên thị trường Việt Nam	TS. Phạm Thế Hải PGS. TS. Đào Thị Vui	2016
2	Nguyễn Thị Ngọc	Sàng lọc các hợp chất có khả năng ức chế HDAC2 từ các thuốc và các hợp chất giống thuốc	TS. Phạm Thế Hải TS. Bùi Thanh Tùng	2017
3	Ninh Bảo Yên	Sàng lọc một số hợp chất có tác dụng ức chế tyrosinase <i>in silico-in vitro</i>	TS. Phạm Thế Hải TS. Đỗ Thị Nguyệt Quế	2017
4	Nguyễn Quốc Doanh	Nghiên cứu xác định đích phân tử bằng phương pháp phân tích mạng protein (ppin) nhằm ứng dụng tìm kiếm thuốc điều trị ung thư dạ dày	TS. Phạm Thế Hải	2019
5	Nguyễn Thị Hồng Nhiên	Nghiên cứu dự đoán khả năng thẩm thấu qua da của dược chất sử dụng mô hình QSPeR	TS. Phạm Thế Hải	2019
6	Nguyễn Thị Hiền	Nghiên cứu sàng lọc một số hợp chất mới có độc tính mạnh trên nhiều dòng tế bào ung thư phổi không tế bào nhỏ	TS. Phạm Thế Hải TS. Đỗ Thị Nguyệt Quế	2020
7	Nguyễn Hoài Thu	Sàng lọc một số hợp chất có tác dụng ức chế <i>in silico – in vitro</i>	TS. Lê Thị Thu Hường TS. Phạm Thế Hải	2020

**19. Kinh nghiệm về quản lý, đánh giá KH&CN** (số lượng các Hội đồng tư vấn, xét duyệt, nghiệm thu, đánh giá các chương trình, đề tài, dự án KH&CN cấp Nhà nước trong và ngoài nước đã tham gia trong 5 năm gần đây)

TT	Hình thức Hội đồng	Số lần

Tôi xin cam đoan những thông tin được ghi ở trên là hoàn toàn chính xác.

Hà Nội, ngày 1 tháng 6 năm 2022

**Xác nhận của Cơ quan chủ quản**  
**Thủ trưởng đơn vị**  
(Ký và ghi rõ họ tên)

**Người khai**  
(Ký và ghi rõ họ tên)

Phạm Thế Hải