

孙嘉策

邮箱: jsun3@caltech.edu

[个人主页](#)

[github 主页](#)

[google scholar](#)

教育经历

中国科学技术大学	2015/09 - 2019/06
少年班学院, 学士学位	
专业: 理论物理	GPA: 3.96/4.30
加州理工学院	2019/10 -
化学与化学工程系	
导师: Thomas F. Miller III	2019/10 - 2022/01
Austin J. Minnich	2022/02 -

研究兴趣

量子科学: 量子化学 (电子结构, 量子动力学)
量子模拟
计算机科学: AI for Science
软件开发

研究项目

石墨烯纳米条带电子结构调控的方法开发	
中国科学技术大学	2017/09 - 2019/01
导师: 江俊	
<ul style="list-style-type: none">为掺杂石墨烯纳米条带开发了一种名为掺杂中心插入方案的嵌入式密度泛函理论 (Embedded DFT) 方法发现了由掺杂剂的长程相互作用调制的态密度 (DOS) 的波状振荡提出基于量子的理论模型以研究 DOS 振荡开发了一个 proof-of-principle 的协议以实现按需调控石墨烯纳米条带的 DOS	
多体电子结构方法的开发	
海德堡大学 (Heidelberg University)	2019/02 - 2019/04
导师: Andreas Dreuw	
<ul style="list-style-type: none">在 <i>Q-Chem</i> 软件中编写了电子亲和代数图解构造 (EA-ADC) 理论在一系列分子上对理论进行基准测试	

路径积分分子动力学 (Path Integral Molecular Dynamics) 的理论发展

加州理工学院 (California Institute of Technology)

2019/10 - 2020/05

导师: Thomas F. Miller III

- 开发了一类广义的强稳定和无量纲的 thermostatted ring-polymer molecular dynamics 积分器
- 基于收敛速度和计算期望值的效率对积分器进行分析
- 确认了 BCOCB 型积分器优于所有其他积分器

基于分子轨道的机器学习 (Molecular-orbital-based Machine Learning, MOB-ML) 方法的开发

加州理工学院 (California Institute of Technology)

2020/06 - Dec 2021/12

导师: Thomas F. Miller III

- 开发了改进的 MOB-ML 特征设计并取得了显著的准确性提升
- 使用改进的特征设计对机器学习化学反应和分子相互作用进行了基准测试
- 开发了 alternative blackbox matrix-matrix multiplication (AltBBMM) 算法来提高 MOB-ML 训练规模
- 对 AltBBMM 算法进行了基准测试, 在没有精度损失的情况下与原始算法相比实现了 4 倍的加速。
- 实现了 MOB-ML 预测和量子动力学模拟之间的接口
- 设计了一个经典的分子轨道分类算法, 与通过无监督学习 MOB-ML 的分类进行比较
- 为 MOB-ML 开发了一种旋转等变 (equivariant) 导数形式来学习响应特性
- 编写了 local MP2 偶极矩计算以生成响应性质的机器学习标签
- 对响应性质的学习进行了基准测试, 并在能量和偶极矩学习方面达到了最先进 (state of the art) 的精度
- 为 MOB-ML 开发了加法核 (additive kernel) 方法, 并将其扩展到开壳和多参考系统。

砷化镓电子输运过程中的双声子散射研究

加州理工学院 (California Institute of Technology)

2022/01 - 2022/12

导师: Austin J. Minnich

- 实现了电声相互作用的 on-shell 双声子处理, 并应用于 GaAs 中的传输和噪声计算
- 为电声相互作用的完整双声子贡献开发了一个半解析模型
- 将半解析模型应用于砷化镓, 分析与实验差异的来源
- 估算了砷化镓中电子-双声子散射的贡献并分析了与实验观察的关系

1. (Will be on arXiv soon) **Sun, J.**, Minnich, A. J. (2022). Transport and noise of hot electrons in GaAs using an ab-initio-based analytical model of two-phonon polar optical phonon scattering.
2. Cheng, L., **Sun, J.**, Emiliano Deustua, J., Bhethanabotla, V. C., & Miller III, T. F. (2022). Molecular-orbital-based machine learning for open-shell and multi-reference systems with kernel addition Gaussian process regression. *The Journal of Chemical Physics*, 157, 154105. [\[link\]](#)
3. **Sun, J.**, Cheng, L., & Miller III, T. F. (2022). Molecular dipole moment learning via rotationally equivariant Gaussian process regression with derivatives in molecular-orbital-based machine learning. *The Journal of Chemical Physics*, 157, 104109. [\[link\]](#)
4. Cheng, L., **Sun, J.** & Miller III, T.F. (2022). Accurate molecular-orbital-based machine learning energies via unsupervised clustering of chemical space. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 18, 8, 4826–4835. [\[link\]](#)
5. Lu, F., Cheng, L., DiRisio, R.J., Finney, J.M., Boyer, M.A., Moonkaen, P., **Sun, J.**, Lee, S.J., Deustua, J.E., Miller III, T.F. & McCoy, A.B. (2022). Fast near ab initio potential energy surfaces using machine learning. *The Journal of Physical Chemistry A*, 126(25), 4013-4024. [\[link\]](#)
6. Cheng, P. S., **Sun, J.**, Sun, S. N., Choi, A. Y., & Minnich, A. J. (2022). High-field transport and hot electron noise in GaAs from first principles: role of two-phonon scattering. *Physical Review B*, 106, 245201. [\[link\]](#)
7. Gui, X., Fan, W., **Sun, J.**, & Li, Y. (2022). New stable and fast ring-polymer molecular dynamics for calculating bimolecular rate coefficients with example of OH+CH₄. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 18, 9, 5203–5212. [\[link\]](#)
8. Zhang, S.X., Allcock, J., Wan, Z.Q., Liu, S., **Sun, J.**, Yu, H., Yang, X.H., Qiu, J., Ye, Z., Chen, Y.Q. & Lee, C.K. (2022). TensorCircuit: a quantum software framework for the NISQ era. arXiv preprint arXiv:2205.10091. [\[link\]](#)
9. **Sun, J.**, Cheng, L., & Miller III, T. F. (2021). Molecular energy learning using alternative blackbox matrix-matrix multiplication algorithm for exact Gaussian process. arXiv preprint arXiv:2109.09817. [\[link\]](#)
10. Husch, T., **Sun, J.**, Cheng, L., Lee, S. J., & Miller III, T. F. (2021). Improved accuracy and transferability of molecular-orbital-based machine learning: Organics, transition-metal complexes, non-covalent interactions, and transition states. *The Journal of Chemical Physics*, 154, 064108. [\[link\]](#)
11. Rosa-Raíces, J. L.* , **Sun, J.***, Bou-Rabee, N., & Miller III, T. F. (2021). A generalized class of strongly stable and dimension-free T-RPMD integrators. *The Journal of chemical physics*, 154, 024106. [\[link\]](#)

12. Sun, J.^{*}, Feng, S.^{*}, Wang, X., Zhang, G., Luo, Y., & Jiang, J. (2020). Regulation of electronic structure of Graphene nanoribbon by tuning long-range dopant–dopant coupling at distance of tens of nanometers. The Journal of Physical Chemistry Letters, 11(16), 6907-6913. [\[link\]](#)

软件开发

- *Chronus Quantum*: 高性能计算化学软件, 特别关注显式时间相关和 post-SCF 量子力学方法
我的贡献: (polarizable continuum model) 的实时动力学
- *Q-Chem*: 一个 general-purpose 的电子结构软件
我的贡献: 电子亲和代数图解构造 (EA-ADC) 理论
- *TensorCircuit* (主要开发者之一): 下一代量子电路模拟器
我的贡献: 矩阵乘积状态 (Matrix-Product-State) 模拟器

荣誉

- | | |
|---|------|
| • 鸿雁计划, 5 年 25 万人民币 (全校共 29 人) | 2019 |
| • 荣誉提名 (Honorable Mention), 跨学科建模竞赛 (The Interdisciplinary Contest in Modeling) | 2017 |
| • 国家二等奖, 中国大学生数学竞赛 | 2017 |
| • 一等奖, 优秀学生奖学金 (前 5%) | 2017 |
| • 第一名, 中国大学生物理竞赛校内赛 | 2017 |
| • 国家奖学金, (前 1%, 二年级最高荣誉) | 2016 |