

教育经历

杜克大学 (Duke University, 泰晤士全球排名 27), 美国

博士在读, 专业为 理论化学

导师为 美国科学院院士 David N. Beratan

2019 年 9 月 — 现在

硕士在读, 专业为 电子与计算机工程 (机器学习方向)

2023 年 3 月 — 现在

武汉大学, 中国

理学学士, 专业为 化学

2014 年 9 月 — 2018 年 6 月

研究经历

博士研究生 杜克大学 (Duke University)

2019 年 9 月 — 现在

- 与实验化学家合作, 利用DFT计算确定了质子耦合电子转移中各个电子态的能量和其间的耦合, 预测了转移概率和速率常数。
- 与量子计算公司 IonQ 的共同创始人合作, 确定了化学动力学中的量子优势区; 共同开发了可模拟一般耗散化学动力学的离子阱量子模拟通用新方案 (已通过实验验证)。
- 建立了多供体/多受体电荷转移的速率理论; 该理论是一个超越了一般费米黄金规则的微扰论, 非常适合用来描述分子组装体中的相干和非相干电荷/能量转移, 代码实现在 [🔗 *partial-summation*](#) 包中。
- 开发了一种含时极化子变换 (polaron transformation) 方法, 解决了极化子变换量子主方程中的初态问题。
- 开发了一种新算法来模拟开放量子系统; 将张量网络含时演化的计算效率提高了三个数量级。
- 将 DMRG 中的链映射技术推广到多个谱密度的情形, 为精确模拟复杂的非绝热化学动力学拓展了新路径。
- 开发了一种非酉相似变换方法来压缩数值模拟中量子系统随时间演化时的指数级纠缠增长。
- 开发了一个张量网络软件包 [🔗 *fishbone*](#), 其中包含了我为模拟化学动力学和开放量子系统所开发的张量网络基础代码和方法。
- 与实验研究者合作, 使用 Quantum Espresso 进行了 NiCo₂N 纳米片的平面波 DFT 计算, 研究了其 d 带中心对氨氧化反应催化活性的影响。

研究助理 香港大学

2018 年 9 月 — 2019 年 6 月

- 为核电子非厄米哈密顿量构建了一个全组态相互作用 (Full CI) 求解器

- 探索了晶体生长中的多体效应

本科学位论文 二甲基乙酰胺分子骨架中的协同性

2017 年 11 月—2018 年 5 月

- 获得“优秀本科论文”提名
- 分析了协同性旧有定义的缺陷；与指导老师合作重新定义了协同性
- 使用新定义计算了 NMA 链的协同性；发现了一个预测协同性的比例关系，该方案无需进行耗时的量子化学计算

其他

- 翻译了电子结构领域的名著“Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory” (Attila Szabo & Neil Ostlund), 涵盖了从基础的 Hartree-Fock 到高级的组态相互作用、耦合簇、格林函数等方法, 其中包括实现程序所需的基组和电子积分等重要主题, 见 <https://github.com/nominhanggai/szaboqc> (2020)
- 作为超理汉化组的成员, 共同翻译了“Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics” (Herbert B. Callen), 见 <https://github.com/laserroger/CallenThermo> (2017)

所修课程

随机信号与噪声, 机器学习的理论与算法, 矢量空间-方法与应用, 数据结构与算法 (C++), 研究生高等物理 (量子信息与凝聚态物理), 随机微积分, 量子化学, 量子多体系统的数值方法, 高等固体物理, 开放量子系统, 量子动力学, 复分析, 多尺度分析, 近代数学 (拓扑与流形), 电动力学, 固体物理, 统计热力学。

荣誉奖项

- 杜克大学纳米科学项目奖学金 (2023)
- 杜克大学化学系 Marcus Hobbs 奖学金 (2022)
- 武汉大学优秀学生奖学金 (2016, 2017)
- 武汉大学优秀新生奖学金 (2014)
- 武汉大学基础学科学生奖学金 (2014)

服务指导

- 共同发起创建了 TriMolS (北卡罗莱纳三角地区分子模拟学会), 组织了 TriMolS 历年的多项交流活动和学术研讨会。
- 2021-2022 年指导了来自南京大学的交换生吴佳熹 (Jiaxi Wu), 指导他使用相互作用表象下的链映射进行了复杂的开放量子系统模拟。吴同学后来被加州理工学院录取, 攻读天文学博士。

-
- 2024 至今在 Beratan 研究组内指导 Zinada Charyshnikova 研究 Chirality-Induced Spin Selectivity (CISS) 现象。

出版物

书籍

- *Dynamical Quantum Chemistry: Hands-on Studies of Coherence in Chemistry*, D.N. Beratan, **H. Nuomin** et al., in preparation

论文

1. Z. Charyshnikova, **H. Nuomin**, & D.N. Beratan, “Influence of magnetic Field on spin polarization in tight-binding models”, in preparation
2. H. Halkhunaizi, J.D. Schultz, **H. Nuomin**, P. Zhang, & D.N. Beratan, “Prospects for enhancing triplet energy transfer using a tight-binding model Hamiltonian”, in preparation
3. **H. Nuomin**, Z. Charyshnikova, N. Singh, K. Terai, P. Zhang, & D.N. Beratan, “Theories of chirality induced spin selectivity: a pedagogical review”, in preparation
4. **H. Nuomin**, P. Zhang, & D.N. Beratan, “Nonexponential length dependence of bridge-mediated electron transfer rates by breaking destructive interference”, in preparation
5. **H. Nuomin**, P. Zhang, & D.N. Beratan, “Time-dependent polaron transformation”, in preparation
6. G. Schwartz*, **H. Nuomin***, D.N. Beratan, & J. Kim, “Quantum simulation of Hertzberg-Teller spectroscopy”, in preparation
7. **H. Nuomin**, F.-F. Song, P. Zhang, & D.N. Beratan, “The properties of current induced chiral phonons recapitulate the characteristics of the CISS effect”, in preparation
8. **H. Nuomin**, P. Zhang, & D.N. Beratan, “Condensed phase dynamics of multi-acceptor electron transfer”, in preparation
9. F.-F. Song, **H. Nuomin**, & N. Kawashima, “Emergent intermediate phase in the J_1 - J_2 XY model from tensor network approaches”, arXiv:2412.18892
10. K. Sun*, M.-Y. Kang*, **H. Nuomin***, G. Schwartz, D.N. Beratan, K.R. Brown, & J. Kim, “Quantum simulation of spin-boson models with structured bath”, arXiv:2405.14624
11. M.-Y. Kang, **H. Nuomin**, S.N. Chowdhury, J.L. Yuly, K. Sun, J. Whitlow, J. Valdiviezo, Z.-D. Zhang, P. Zhang, D.N. Beratan, & K.R. Brown, “Seeking a quantum advantage with trapped-ion quantum simulations of condensed-phase chemical dynamics”, *Nat. Rev. Chem.* **8**, 340 (2024)
12. J.D. Schultz, J.L. Yuly, E.A. Arsenault, S.N. Chowdhury, R. Dani, S. Kundu, **H. Nuomin**, Z.-D. Zhang, J. Valdiviezo, P. Zhang, K.A. Parker, K. Orcutt, G.R. Fleming, N. Makri, J.P. Ogilvie, M.J. Therien, M.R. Wasielewski, & D.N. Beratan, “Coherence in chemistry: foundations and frontiers”, *Chem. Rev.*, **124**, 11641 (2024)
13. **H. Nuomin**, J.-X. Wu, P. Zhang, & D.N. Beratan, “Efficient simulation of open quantum systems with multiple coupling channels to a reservoir”, *J. Chem. Phys.* **161**, 124114

(2024)

14. H. Nuomin, F.-F. Song, P. Zhang, & D.N. Beratan, “Suppressing the entanglement growth in matrix product state evolution of quantum systems through nonunitary similarity transformations”, *Phys. Rev. B* **106**(10), 104306 (2022)
15. H. Nuomin, D.N. Beratan, & P. Zhang, “Improving the efficiency of open-quantum-system simulations using matrix product states in the interaction picture”, *Phys. Rev. A* **105**(3), 032406 (2022)
16. S. He, Y. Chen, M. Wang, H. Nuomin, P. Novello, X. Li & J. Liu, “Metal nitride nanosheets enable highly efficient electrochemical oxidation of ammonia”, *Nano Energy*, **80**, 105528 (2021)

会议摘要

1. K. Sun, M. Kang, H. Nuomin, K. Brown, J. Kim, & D.N. Beratan, Trapped-ion simulation of structured bath. *Bulletin of the American Physical Society* (2024).
2. S. He, J. Liu, Y. Chen, M. Wang, H. Nuomin, & S. Zhu, “D-band contraction of metal nitride nanosheets enables highly efficient and stable electrochemical oxidation of ammonia”, *239th ECS Meeting Abstracts*, **40**, 1297 (2021). The Electrochemical Society, Inc.

技能

编程技能

Python, Julia, C/C++, Mathematica, Vim, Bash, Git, L^AT_EX, T_EX, HTML/CSS/JavaScript, Vue

量子化学软件

ORCA, Gaussian, SHARC, Q-Chem

量子信息/量子计算 软件

QuTiP, Qiskit

语言技能

汉语（普通话），英语，蒙古语