

# 高星 简历

中山大学材料学院，深圳，518107，中国

[gxing@mail.sysu.edu.cn](mailto:gxing@mail.sysu.edu.cn), [gxaaas@gmail.com](mailto:gxaaas@gmail.com)

[gaox-qd.github.io](https://github.com/gaox-qd)

---

## 研究特色

- 量子模拟复杂体系动力学方法和算法：
  - a. 量子开放系统动力学：随机量子态扩散
  - b. 非绝热混合量子/经典动力学：投影哈密顿量，势能面跳跃方法，以及平均场
- 程序开发：
  - a. DFTB+非绝热电子激发态动力学及输运
  - b. 自旋轨道耦合计算 PySOC (<https://github.com/gaox-qd/pysoc>)
  - c. Non-Markovian 张量网络算法(<https://github.com/gaox-qd/TNStochastic.jl>)
- 应用体系：复杂有机光电材料和生物光合作用系统中的能量、电荷等的传输机制，激子分离过程和二维光谱模拟

## 主要工作经历

2020.9-至今，中山大学材料学院“百人计划”副教授

2018-2020，美国密歇根大学安娜堡分校，博士后（合作导师：Eitan Geva 教授）

2016-2018，德国马克斯普朗克复杂物理系统研究所，博士后（合作导师：Alex Eisfeld 博士）

2014-2016，德国马克斯普朗克煤炭研究所，博士后（合作导师：国际量子分子科学院院士 Walter Thiel 教授）

## 教育经历

2009-2014 清华大学化学系，理论与计算化学，博士（指导老师：国际量子分子科学院院士 帅志刚教授）

2002-2008 湖南大学，化学，本硕连读理科试验班（指导老师：中国科学院院士 俞汝勤教授）

## 文章列表

1. **Xing Gao\***, Eitan Geva\*. Improving the accuracy of quasiclassical mapping Hamiltonian methods by treating the window function width as an adjustable parameter ( *J. Phys. Chem. A*, 124 (52), 11006–11016, (2020))
2. **Xing Gao**, Eitan Geva\*. A Nonperturbative Methodology for Simulating Multidimensional Spectra of Multiexcitonic Molecular Systems via Quasiclassical Mapping Hamiltonian Methods, *J. Chem. Theory Comput.*, 16 (10), 6491-6502, (2020)
3. **Xing Gao**, Yifan Lai, Eitan Geva\*. Simulating Absorption Spectra of Multi-Excitonic Systems via Quasiclassical Mapping Hamiltonian Methods, *J. Chem. Theory Comput.*, 16 (10), 6465-6480, (2020)
4. **Xing Gao**, Maximilian AC Saller, Yudan Liu, Aaron Kelly, Jeremy O Richardson, Eitan Geva\*. Benchmarking Quasiclassical Mapping Hamiltonian Methods for Simulating Electronically Nonadiabatic Molecular Dynamics, *J. Chem. Theory Comput.*, 16 (5), 2883-2895, (2020)
5. **Xing Gao**, and Alexander Eisfeld. Change and energy transfer in large molecular assemblies: Quantum State Diffusion with an adaptive grid *J. Chem. Phys.*, 150, 234115, (2019), (JCP Special Topic on Dynamics of Open Quantum Systems)
6. **Xing Gao\***, and Alexander Eisfeld\*. Near-Field Spectroscopy of Nanoscale Molecular Aggregates, *J. Phys. Chem. Lett.*, 9 (20), 6003-6010, (2018)
7. **Xing Gao\***, and Walter Thiel. Non-Hermitian surface hopping, *Phy. Rev. E*, 95, 013308, (2017)
8. **Xing Gao\***, Shuming Bai, Daniele Fazzi, Thomas Niehaus, Mario Barbatti\* and Walter Thiel\*. Evaluation of Spin-Orbit Couplings with Linear-Response Time-Dependent Density Functional Methods, *J. Chem. Theory Comput.*, 13 (2), 515–524, (2017)
9. **Xing Gao**, Hua Geng, Qian Peng, Yuanping Yi, Dong, Wang and Zhigang Shuai\*. Nonadiabatic molecular dynamics modeling of the intrachain charge transport in conjugated polymers, *J. Phys. Chem. C*, 118 (13), 6631-6640, 2014
10. **Xing Gao**, Qian Peng, Yingli Niu, Dong Wang and Zhigang Shuai\*. Theoretical insight into the aggregation induced emission phenomena of diphenyldibenzofulvene: a nonadiabatic molecular dynamics study. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2012, 14, 14207-14216
11. Ellen Mulvihill , **Xing Gao**, Yudan Liu, Alexander Schubert, Barry D. Dunietz, and Eitan Geva. Combining the mapping Hamiltonian linearized semiclassical approach with the generalized quantum master equation to simulate electronically nonadiabatic molecular dynamics. *J. Chem. Phys.* 151, 074103 (2019)
12. Fulu Zheng, **Xing Gao**, Alexander Eisfeld. Excitonic Wave Function Reconstruction from Near-Field Spectra Using Machine Learning Techniques. *Phys. Rev. Lett.* 123, 163202 (2019)
13. Ran Liu, **Xing Gao**, Mario Barbatti, Jun Jiang and Guozhen Zhang. Promoting Intersystem Crossing of a Fluorescent Molecule via Single Functional Group Modification. *J. Phys. Chem. Lett.*, 106, 1388-1393, (2019)
14. Qian Peng, Yingli Niu, Qinghua Shi, **Xing Gao**, Zhigang Shuai\*, Correlation Function Formalism for Triplet Excited State Decay: Combined Spin-orbit and Non-adiabatic Couplings, *J. Chem. Theory Comput.* 9(2), 1132-1143, (2013)
15. Yuqian Jiang, Qian Peng, **Xing Gao**, Zhigang Shuai\*, Yingli Niu, Sheng Hsien Lin, Theoretical design of polythienylenevinylene derivatives for improvements of

- light-emitting and photovoltaic performances, *J. Mater. Chem.*, 22(10), 4491-4501, (2012)
16. Qunyan Wu, Qian Peng, Yingli Niu, **Xing Gao**, and Zhigang Shuai\*, Theoretical Insights into the Aggregation-Induced Emission by Hydrogen Bonding: A QM/MM Study, *J. Phys. Chem. A*, 116(15), 3881-3888, (2012)
  17. Yingli Niu, Qian Peng, Chunmei Deng, **Xing Gao**, Zhigang Shuai\*, Theory of Excited State Decays and Optical Spectra: Application to Polyatomic Molecules, *J. Phys. Chem. A*, 114(30), 7817-7831, (2010), (invited feature article)

## **主要研究**

有机/高分子光电材料和生物有机材料具有柔性、分子间弱作用等特点，传统的能带理论的描述很不完备，需要发展复杂体系的电子和激子的量子动力学计算方法，充分考虑电子-声子耦合非绝热过程和局域化现象。我们主要是针对大体系分子聚集体中长时间能量/电荷转移动力学过程，发展了复杂体系非绝热电子和激子动力学计算方法和程序，并对载流子迁移率和光谱进行预测。由于多电子态相干性，环境的量子效应以及复杂的电声子耦合作用，实现对大体系和长时间的动力学算法和程序都有很大的挑战。我们取得了以下进展：

### 1. 复杂体系量子态退相干机制的新方法

由于目前描述复杂体系基本上都是采用量子/经典结合的手段，这就带来了量子态退相干问题，如何在上述动力学模拟中正确地描述系统相干性是个长期的难题。受波函数精确分解理论的启发，我们推导出一个非厄米的动力学方程，发现可以对退相干时间进行正确的描述，该方法与势能面跳跃算法结合在一维散射模型中得到了验证，相关工作发表在 *Phy. Rev. E*, 2017, 95, 013308。我们进一步在投影哈密顿理论的基础上，改进了电子坐标的初始采样，系统性提高了对电子相干性的描述，从而更加普适，该方法在自旋-玻色模型和 Frenkel 激子模型中得到验证，并用于发展电子线性光谱和二维光谱理论（相关工作发表在 *J. Chem. Theory Comput.*, 16 (10), 6491-6502, (2020); *J. Chem. Theory Comput.*, 16 (10), 6465-6480, (2020); *J. Chem. Theory Comput.*, 16 (5), 2883-2895, (2020)）。

### 2. 开放量子系统随机扩散动力学算法及光谱

我们发展了开放量子系统动力学，解决环境和系统的相互作用问题。我们从量子态扩散理论出发，首先要将系统与环境的相互作用用含时的随机变量来表示。在波函数表象的计算中，发现分子聚集体中随机态扩散的局域化行为，并根据这一特征首次提出动态局域基组算法，成功地对二维体系，共 10000 个格点的激子扩散进行模拟。这是其他基于密度矩阵的开放量子动力学方法难以做到的（相关工作发表在 *J. Chem. Phys.*, 2019, 150,

234115, 开放量子系统动力学专辑)。该方法为大体系非马尔可夫动力学的精确计算提供新的途径。在光谱方面, 受到纳米金属近场会影响无机半导体纳米吸收谱的启发, 我们提出用近场光源激发分子聚集体的实验方案, 结合随机量子态扩散方法, 理论上预测聚集体的吸收选律会大大改变, (相关工作发表在 *J. Phys. Chem. Lett.*, 2018, 9 (20), 6003-6010), 利用这些光谱信息结合机器学习算法从而可以直接获得激子波函数信息 (相关合作的工作发表在 *Phys. Rev. Lett.* 2019, 123, 163202)。

### 3. 计算分子体系旋轨耦合的界面程序

针对磷光发射体系, 我们开发了含时密度泛函框架下、适用于多自旋势能面耦合体系的自旋轨道耦合程序 PySOC, 适用于自旋窜越过程的动力学, 并与高斯软件和紧束缚密度泛函软件连接, 成功计算分子体系旋轨耦合强度, 相关工作发表在 *J. Chem. Theory Comput.*, 2017, 13 (2), 515 - 524, 并提供给其他多个研究组使用。比如 (1) 和中科大张国栋, 江俊研究组合作的磷光材料设计的工作发表在 *J. Phys. Chem. Lett.* 2019, 106, 1388-1393; (2) 法国马赛大学 Mario Barbatti 研究组在其 Newton-X 非绝热动力学程序包中使用 PySOC 做为自旋轨道耦合的计算。

### 4. 混合量子/经典动力学程序和算法

我们将已有的紧束缚密度泛函程序和混合量子/经典动力学算法结合, 独立发展程序, 使得直接描述上千原子和皮秒量级的电子动力学成为可能。通过这个程序, 我们首次从动力学的角度阐明键角旋转对聚集诱导发光现象的重要性, 验证了实验机理, 相关工作发表在 *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2012, 14, 14207-14216; 并通过对有机共轭高分子的研究, 证明该程序为迁移率的直接预测提供一个有用的工具, 相关工作发表在 *J. Phys. Chem. C*, 2014, 118 (13), 6631-6640。

## **学术会议及经历**

- 2020年12月: 参加复杂体系计算统计力学研讨会, 口头报告(20分钟), 杭州, 中国
- 2019年4月: 参加密歇根量子科学与技术研讨会, 安娜堡, 美国
- 2017年3月: 德国物理学会春季会议, 口头报告(15分钟), 美因茨, 德国
- 2016年6月: 第八届分子量子力学会议, 张贴海报, 乌普萨拉, 瑞典
- 2014年6月: 欧洲材料学会春季会议, 张贴海报, 里尔, 法国
- 2014年6月: 第十二届全国量子化学会议, 太原, 中国
- 2012年7-8月: 访问王林望研究员课题组, 劳伦斯伯克利国家实验室, 美国
- 2012年6月: 第十四届国际量子化学会议, 张贴海报, 科罗拉多大学-博尔德, 美国
- 2011年5月: 第十一届全国量子化学会议, 合肥, 中国