王聪

中共党员 • 北京大学博士后 • 路径积分分子动力学
frankcongwang@pku.edu.cn • 18811602976

教育经历

- **物理化学博士**，北京师范大学，2022　导师: 邵久书，刘剑
- **化学学士（基础学科拔尖学生培养试验计划）**，南开大学，2015　导师: 程鹏，师唯，孙宏伟

研究工作经历

- **科研助理**，北京大学化学与分子工程学院，2022　合作导师: 国际量子分子科学院院士刘剑
- **博士后**，北京大学物理学院，2023–今　合作导师: 李新征

学术论文发表

1. **Wang**†,He, Zeng, Yang, Ye*, Li*, Revisiting the fermion sign problem from the structure of Lee-Yang zeros. III. Re-weighted simulation and identification of zeros. (一作，将投稿)
2. He†, Zeng†, Yang, **Wang***, Ye*, Li*, Revisiting the fermion sign problem from the structure of Lee-Yang zeros. II. Finite temperature results and continuation on the complex plane, arXiv: 2606.07415. (共同通讯，Physical Review E 已投稿)
3. He†, Zeng†, Yang, **Wang***, Ye*, Li*, Revisiting the fermion sign problem from the structure of Lee-Yang zeros. I. The Form of Partition Function for Anyon and Its zeros at 0 K, Physical Review E, **113**, 024115(2026). (共同通讯)
4. Liang†, Wang†, **Wang**†, Wang, She, Wang, Shao, Liu*, An efficient integrator scheme for sampling the (quantum) isobaric–isothermal ensemble in (path integral) molecular dynamics Simulations, J. Chem. Theory Comput. **21**, 6394 (2025). (共一，JCTC 邀稿)
5. **Wang**†, Zhang, Liu*, Shao*, Generalized fourth-order decompositions of imaginary time path integral: Implications of the harmonic oscillator, Chin. J. Chem. Phys. **35**, 516 (2022). (一作，CJCP 特刊"Quantum and Classical Dynamics in Chemistry" 邀稿)
6. Li, Han, Chai, **Wang**, Zhang, Chen, Liu*, Shao*, Stationary state distribution and efficiency analysis of the Langevin equation via real or virtual dynamics, J. Chem. Phys. **147**, 184104 (2017).
7. **Wang**, Zhang, Liu*, Shao*, An efficient algorithm for the fourth-order decomposition for path integral molecular dynamics. (In preparation)
8. **Wang**, Zhang, Liu*, Shao*, Application of the generalized fourth-order decomposition schemes to perturbed path integral. (In preparation)

报告、墙报和奖励

- Revisiting the fermion sign problem from the structure of Lee-Yang zeros, 第 19 届全国化学动力学会议, Sept 18-21, 2025, Chun'an Hangzhou Zhejiang
  (口头报告)
- Fermion sign problem and distribution of Lee-Yang zeros, Frontiers in Ab Initio Quantum Molecular Dynamics (CECAM Flagship School), Jul 25-29, 2026, Beijing
  (优秀墙报奖)

- Lee-Yang zeros and path integral molecular dynamics of indistinguishable particles, 第 35 届中国化学会年会, Apr 11-14, 2026, Chongqing
(优秀墙报奖)

- Efficient algorithms for sampling canonical and isobaric ensembles via molecular dynamics, 第 31 届中国化学会年会, May 5-8, 2018, Hangzhou Zhejiang
(优秀墙报奖)

- 南开大学功能分子材料团队，大学生“小平科技创新团队”，中国青少年科技创新奖励基金，2014
团队负责人

研究方向

- **路径积分分子动力学方法加速**
路径积分分子动力学 (path integral molecular dynamics, PIMD) 是研究化学和物理体系原子核量子效应的有效方法，但其巨大的计算量限制了其在生物和溶液体系的潜在应用。

  – 我们发展了通过调整热浴顺序扩大采样步长的居中（“Middle scheme”）热库算法，将其应用到了经典和路径积分分子动力学对正则系综（JCP 2017）和恒温恒压系综（JCTC 2025）的采样中。**这一算法已得到 Amber 等软件的广泛采用。**

  – 我们发展使用含参数的广义四阶拆分（factorized generalized fourth-order decomposition）代替二阶 Trotter 拆分，并通过对一维谐振子可解析体系的分析进行了参数优化（CJCP 2022）。**这一工作已得到路径积分方法资深研究者、四阶拆分算法的提出者、德州农工大学教授 Chin 的多次引用。**四阶拆分方法及优化参数可应用到基于有限差分的开链和闭链 PIMD 中，能有效提高采样效率、扩大研究体系（待发表）。

  – 我们证明了微扰路径积分（perturbed path integral, PPI）至少具备四阶精度，并可以与广义四阶拆分相结合，通过调整参数进一步提高 PIMD 的计算效率（将投稿）。

- **费米子符号问题和不可分辨粒子的路径积分分子动力学**
在涉及到交换对称性的体系中，不可分辨粒子（玻色子 $\xi = 1$、费米子 $\xi = -1$）的 PIMD 是研究超流、超固体系的有效方法。当前玻色子 PIMD 的计算量已被降低到随体系大小平方增长，但存在潜在的采样遍历问题；而费米子 PIMD 受限于交换的正负贡献抵消带来的符号问题（FSP），难以应用于大体系和低温情况。

  – 我们将 FSP 与李政道-杨振宁的相变理论建立联系，将 ξ 拓展到复空间，发现了配分函数是 ξ 的多项式，在 ξ 空间所有体系在零温下具有仅与其粒子数有关的固定零点（PRE 2026）。这一工作已得到**温稠密物质研究领军人物、德国德累斯顿-多森多夫亥姆霍兹中心高能量密度部门负责人 Dornheim 的多次引用。**

  – 我们利用李-杨零点解释了 FSP 的来源，利用无相互作用的可解析体系分析了有限温度下零点的移动规律，并提出了根据费米子体系高温下热力学性质解析延拓得到受 FSP 严重影响的低温性质的方法（PRE 已投稿）。

  – 我们提出了通过数值计算得到普遍体系的李-杨零点的方法，研究了零点对有相互作用的体系的物理性质的影响，并将零点分布用于指导费米子 PIMD 的热力学性质计算（待发表）。

  以上三篇组成系列文章，建立了通过李-杨理论研究 FSP 的理论框架，解释了当前基于路径积分的费米子研究方法的局限性，指导了解决费米子符号问题的方法发展。

未来研究计划

- **不可分辨粒子路径积分的加速方法**
当前不可分辨粒子的路径积分方法已应用于超固体的探索和均一电子气（UEG）、温稠密氢和铍等体系的模拟，可以和美国国家点火装置（NIF）的 X 射线汤姆逊散射数据对照，但仍受限于体系增大带来的计算量增加和 FSP。这些问题可以通过路径积分的加速来缓解。

- 适用于可分辨粒子路径积分的简正模（normal mode）坐标变换和阶梯（staging）坐标变换，无法将不可分辨粒子的坐标解耦合，这一问题制约了采样效率。我们计划发展新的坐标变换方式，以提高采样效率。
- 研究发现，四阶路径积分方法与交换分区（permutation blocking）、高阶费米子传播子等方法结合，可以缓解 FSP。而我们发展的可调参数的广义四阶拆分，可以应用于玻色子和费米子的研究，结合机器学习方法对不同体系进行参数调整，有望进一步扩大路径积分可研究的体系尺度和温度范围。

- **不可分辨粒子的实时动力学方法**
  目前可分辨粒子的 PIMC 表现出比 PIMD 更高的采样效率，因此在热力学性质的采样中得到了更广泛的使用。但通过 PIMC 无法得到体系的实时动力学性质。基于可分辨粒子 PIMD 的近似动力学方法如环形高分子动力学（RPMD）、质心动力学（CMD），虽然有理论的局限性，但具有很强的体系可迁移性，已被广泛应用于光谱计算和反应速率计算。当前对玻色子的 RPMD 方法发展的探索已经开始。将交换对称性引入动力学研究，将有望实现对氢转移、电子转移等反应的动力学和隧穿劈裂等能谱学问题的准确刻画。

  - 使用实时动力学方法计算 UEG 的动态结构因子，替代 Dornheim 等当前使用的、对 PIMC 虚时关联函数进行解析延拓重建动态结构因子的方式，以克服后者在数学上固有的不适应性（ill-posedness）。
  - 将现有费米子路径积分方法与 RPMD 结合，应用于多甲基体系甲基旋转的隧穿劈裂研究，结果可能在有机化学反应选择性、大分子粗粒化模拟、燃烧化学等领域有潜在应用。
  - 将费米子路径积分方法与耗散动力学方法结合，应用于表面和笼中涉及到核量子效应及交换对称性的反应（如 $H + H_2$ 及更复杂反应），结果可能解释星际冰面反应等天体化学中的重要问题。

  以上反应体系涉及的振动模式数量巨大，现有的波函数方法（如多组态含时 Hartree，MCTDH）难以处理，但有望使用基于费米子路径积分的动力学方法研究交换对称性在其中的作用。

推荐人

- 李新征　北京大学物理学院　zxli@pku.edu.cn
- 邵久书　北京师范大学化学学院　jiushu@bnu.edu.cn
- 刘剑　北京大学化学与分子工程学院　jianliupku@pku.edu.cn