

石临源

100 Rhines Hall – 32611 GAINESVILLE – US

☎ (352)283-9950 • ✉ linyuan.shi@outlook.com

教育背景

佛罗里达大学

盖恩斯维尔, 美国

材料科学与工程, 在读博士, GPA:3.86/4.0

Aug 2016–May 2021

中南大学

长沙, 中国

粉体材料科学与工程, GPA:88.20/100 Rank:5/88

Sep 2012–Jun 2016

研究课题

中尺度框架下的热烧蚀防护系统的多重物理量模拟

盖恩斯维尔, 佛罗里达

博士候选人, Dr. Simon R Phillpot 课题组

Jan 2018–Present

在 NASA AMES 研究中心的指导下开发一个可以预测碳纤维增强的树脂基材料 (PICA) 在高温热烧蚀条件下的结构及其他物理量的模拟软件

- 建立在原子尺度下的碳纤维模型和表征碳纤维结构。
- 通过该模型预测碳纤维的热力学性质如杨氏模量、抗拉强度和热导率等。
- 通过加速反应分子动力学来模拟碳纤维在超高温条件下的烧蚀和氧化过程。
- 预测碳纤维在高温下的氧化反应机理和其反应常数
- 与其他合作者合作将在分子尺度下计算得到的关键材料性质应用中尺度模型上并最终应用于 NASA 火星计划

锆-氢系统的力学性质的高性能计算

盖恩斯维尔, 佛罗里达

研究助理, Dr. Simon R Phillpot 课题组

Feb 2017–Mar 2020

通过纳米压痕技术来研究锆的氢脆机理和氢化锆的力学性质

- 评估 COMB3 势函数对锆-氢系统模拟的可靠性
- 计算氢化锆的力学性质
- 分析氢化锆在纳米压痕模拟中的载荷-压痕深度曲线和研究缺陷和位错在氢化锆中的生成机理。

钨辐照的分子动力学模拟

长沙, 中国

研究助理, 粉末冶金国家重点实验室

Nov 2015–Jun 2016

研究钨在辐照情况下的晶体结构、热力学性质及其级联反应

- 研究钨中的位移级联反应。
- 研究初级撞击原子产生的点缺陷数量和分布
- 研究钨在不同晶向下的产生级联反应所需要的能量阈值

技术能力

编程语言

- C++: 熟悉 Modern C++ 的新特性, 对 C++ STL、智能指针和模板有一定的接触, SFINAE、CRTP 和 EBCO 等 C++ 模板元编程方法有一定的了解。
- Python: 熟练掌握 Matplotlib 画图库和 Numpy, Scipy, Pandas 等科学计算库。
- Matlab: 熟悉使用 Matlab 进行科学计算和分析数据
- Fortran: 有一定的了解, 可以在文档的帮助下阅读源代码
- Shell: 熟悉使用 shell 在 Linux 环境下对 HPC 和高性能计算软件的操作

专业软件

- VASP: 熟悉使用 VASP 计算材料的热力学性质和能带
- LAMMPS: 精通分子动力学模拟和用其对材料性质进行高性能计算
- OVITO: 精通使用 Ovito 对 LAMMPS 模拟的数据进行后处理和可视化

- *CMake*: 熟悉使用 CMake 对 C++ 项目进行编译

荣誉

- ICMEd summer school fellowship awarded by National Science Foundation, June 2017
- 国家励志奖学金, Sep 2014

论文

- **Linyuan Shi**, Marina Sessim, Michael R. Tonks, and Simon R. Phillpot. "Generation and characterization of an improved carbon fiber model by molecular dynamics." *Carbon* (2021), 173, 232–244.
- **Linyuan Shi**, Michele L. Fullarton, and Simon R. Phillpot. "Nanoindentation of ZrH₂ by molecular dynamics simulation." *Journal of Nuclear Materials* (2020): 152391.
- **Linyuan Shi**, Marina Sessim, Michael Tonks and Simon Phillpot, Modeling Carbon fiber oxidation under high temperature by ReaxFF based molecular dynamics simulation, "AIAA SciTech Forum, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2020, Chaps."
- Phillpot, Simon R., Andrew C. Antony, **Linyuan Shi**, Michele L. Fullarton, Tao Liang, Susan B. Sinnott, Yongfeng Zhang, and S. Bulent Biner. "Charge Optimized Many Body (COMB) potentials for simulation of nuclear fuel and clad." *Computational Materials Science* 148 (2018): 231-241.
- D.Y. Dang, **L.Y. Shi**, J.L. Fan, H.R. Gong, First-principles study of W–TiC interface cohesion, *Surface and Coatings Technology*, 25 August 2015, ISSN 0257-8972