

石临源

高新区科学大道 100 号 - 450001 郑州 - 河南

☎ 18539561385 • ✉ linyuan.shi@outlook.com • 中共党员

工作经历

郑州大学

材料科学与工程学院/中原关键金属实验室, 讲师, 硕士生导师

郑州, 中国

Aug 2021– Present

教育背景

佛罗里达大学

材料科学与工程, 博士, GPA:3.84/4.0, Supervisor: Simon R. Phillpot

盖恩斯维尔, 美国

Aug 2016–May 2021

中南大学

粉体材料科学与工程, 学士, GPA:88.20/100 Rank:5/88

长沙, 中国

Sep 2012–Jun 2016

研究课题

高纯低氧钛粉制备及其球形化

讲师, 何季麟院士团队

通过氢化脱氢-金属热还原法制备高纯低氧 3D 打印用钛粉

- 对海绵钛进行氢化并通过闭环气流磨对氢化钛破碎制粉。
- 采用氢辅助钙/镁热还原法降低氢化钛粉末中氧含量。
- 分析不同温度、不同比例还原剂配比条件下, 氢化钛粉降氧效果。
- 采用射频等离子球形化装置对低氧氢化钛粉末脱氢并球形化。
- 采用有限元方法对射频等离子球形化温场、流场进行模拟, 优化球形化工作参数。

郑州, 中国

Aug 2021–Present

中尺度框架下的热烧蚀防护系统的多重物理量模拟

研究助理, Dr. Simon R Phillpot 课题组

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相场模型上

盖恩斯维尔, 佛罗里达

Jan 2018–May 2021

锆-氢系统的力学性质的高性能计算

研究助理, Dr. Simon R Phillpot 课题组

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。

盖恩斯维尔, 佛罗里达

Feb 2017–Mar 2020

钨辐照的分子动力学模拟

研究助理, 粉末冶金国家重点实验室

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

长沙, 中国

Nov 2015–Jun 2016

素质能力

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 和高性能计算机软件的操作

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

论文

- **Linyuan Shi**, Marina Sessim, Michael R. Tonks, and Simon R. Phillpot. "High-temperature oxidation of carbon fiber and char by molecular dynamics simulation." *Carbon* (2021), 185, 449-463 (IF: 11.307)
- **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 (IF: 11.307)
- **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."
- Sessim M, **Shi L**, Phillpot S R, et al. Phase-field modeling of carbon fiber oxidation coupled with heat conduction[J]. *Computational Materials Science*, 2022, 204: 111156.
- Zhang R H, Hao Z H, **Shi L Y**, et al. Mechanism of Non-Contact Reduction of *MoO₃* to Prepare *MoO₂*[J]. *JOM*, 2022: 1-8.
- 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