

上海交通大学

SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY



多尺度材料模拟与计算

实验报告 - 一维周期性原子链

姓 名: 张三

学 号: XXXXXXXXXXXXXX

学 院: 材料科学与工程学院

2023 年 10 月 3 日

目录

1 实验目的	1
2 实验方法	1
3 实验内容	1
3.1 内容 1	1
3.2 内容 2	2
4 分析与讨论	3
5 结论	3
参考文献	4
A 第一部分	5
A.1 代码环境测试	5
A.1.1 python 编程语言	5
A.1.2 C 编程语言	6
B 第二部分	8

1 实验目的

这里是实验目的。这里是实验目的。这里是实验目的。这里是实验目的。这里是实验目的。这里是实验目的。这里是实验目的。这里是实验目的。这里是实验目的。这里是实验目的。



图 1-1 一维周期性原子链示意图

2 实验方法

这里是实验方法。这里是实验方法。这里是实验方法。这里是实验方法。这里是实验方法。这里是实验方法。这里是实验方法。这里是实验方法。这里是实验方法。这里是实验方法。

无编号的公式：

$$E_p = \frac{1}{2} kx^2$$

有编号的公式，如公式 2-1。

$$E_k = \frac{1}{2} mv^2 \tag{2-1}$$

一些数学直立体：

- 微分符号 d: \dd
- 圆周率 π : \uppi
- 自然对数的底 e: \ee
- 虚数单位 i, j: \ii \jj

3 实验内容

3.1 内容 1

实验方法见第 2 节。

这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。

三线表，如表 3-1。

表 3-1 实验数据

编号	物理量	数值
1	m	0.1
2	k	1.0
3	x	0.2

3.2 内容 2

具体代码见附录 A。

这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。

单张图，如图 3-1。



图 3-1 单张图

两张图并排且共用图题，如图 3-2。



图 3-2 两张图并排

4 分析与讨论

这里是分析与讨论。这里是分析与讨论。这里是分析与讨论。这里是分析与讨论。
这里是分析与讨论。这里是分析与讨论。这里是分析与讨论。这里是分析与讨论。这里
是分析与讨论。这里是分析与讨论。

文献引用测试：学位论文^[1]，专利文献^[2-3]，专著中析出的文献^[4-5]，期刊中析出的
文献^[6-7]，报纸中析出的文献^[8]，电子文献^[9-11]。多个文献引用^[1,9-11]。

5 结论

这里是结论。这里是结论。这里是结论。这里是结论。这里是结论。这里是结论。这
里是结论。这里是结论。这里是结论。这里是结论。

- 这里是结论 1。
- 这里是结论 2。
- 这里是结论 3。

参考文献

- [1] 张志祥. 间断动力系统的随机扰动及其在守恒律方程中的应用[D]. 北京: 北京大学数学学院, 1998: 50-55.
- [2] 姜锡洲. 一种温热外敷药制备方案: 中国, 88105607.3[P]. 1989-07-26.
- [3] 河北绿洲生态环境科技有限公司. 一种荒漠化地区生态植被综合培育种植方法: 中国, 01129210.5[P/OL]. 2001-10-24 [2002-05-28]. <http://211.152.9.47/sipoasp/zlijs/hyjs-yx-new.asp?recid=01129210.5&leixin>.
- [4] 程根伟. 1998 年长江洪水的成因与减灾对策[M]//许厚泽, 赵其国. 长江流域洪涝灾害与科技对策. 北京: 科学出版社, 1999: 32-36.
- [5] 国家标准局信息分类编码研究所. GB/T 2659-1986 世界各国和地区名称代码[S]//全国文献工作标准化技术委员会. 文献工作国家标准汇编: 3. 北京: 中国标准出版社, 1988: 59-92.
- [6] 李晓东, 张庆红, 叶瑾琳. 气候学研究的若干理论问题[J]. 北京大学学报: 自然科学版, 1999, 35(1): 101-106.
- [7] 李炳穆. 理想的图书管理员和信息专家的素养与形象[J]. 图书情报工作, 2000(2): 5-8.
- [8] 丁文祥. 数字革命与竞争国际化[N]. 中国青年报, 2000-11-20(15).
- [9] 江向东. 互联网环境下的信息处理与图书管理系统解决方案[J/OL]. 情报学报, 1999, 18(2): 4 [2000-01-18]. <http://www.chinainfo.gov.cn/periodical/qbxb/qbxb99/qbxb990203>.
- [10] CHRISTINE M. Plant physiology: plant biology in the Genome Era[J/OL]. Science, 1998, 281: 331-332 [1998-09-23]. <http://www.sciencemag.org/cgi/collection/anatmorp>.
- [11] 萧钰. 出版业信息化迈人快车道[EB/OL]. (2001-12-19) [2002-04-15]. <http://www.creader.com/news/20011219/200112190019.html>.

附录 A 第一部分

这里是附录 A。这里是附录 A。这里是附录 A。这里是附录 A。这里是附录 A。这里是附录 A。这里是附录 A。这里是附录 A。这里是附录 A。

A.1 代码环境测试

A.1.1 python 编程语言

```
1 import argparse
2
3
4 def handle_read(args):
5     print(args)
6     print(args.path, args.length, args.key)
7
8
9 def handle_write(args):
10    print(args)
11    print(args.path, args.encoding)
12
13
14 def main():
15     """
16     argparse处理具有2种不同参数数目的函数
17     """
18     parser = argparse.ArgumentParser()
19
20     subparsers = parser.add_subparsers(help='commands')
21
22     read_parser = subparsers.add_parser(name='read', help='read file')
23     read_parser.add_argument('--path', required=True, help="file path")
24     read_parser.add_argument('--length', required=True, help="file length")
25     read_parser.add_argument('--key', required=True, help="file key")
26     read_parser.set_defaults(func=handle_read) # 绑定处理函数
```

```

27
28     write_parser = subparsers.add_parser(name='write', help='write file')
29     write_parser.add_argument('--path', required=True, help="file path")
30     write_parser.add_argument('--encoding', required=True, help="file
        encoding")
31     write_parser.set_defaults(func=handle_write) # 绑定处理函数
32
33     args = parser.parse_args()
34     # 执行函数功能
35     args.func(args)
36
37
38 if __name__ == '__main__':
39     main()

```

A.1.2 C 编程语言

```

1 #include <stdio.h>
2 #include <unistd.h>
3 #include <sys/types.h>
4 #include <sys/wait.h>
5
6 int main() {
7     pid_t pid;
8
9     switch ((pid = fork())) {
10    case -1:
11        printf("fork failed\n");
12        break;
13    case 0:
14        /* child calls exec */
15        execl("/bin/ls", "ls", "-l", (char*)0);
16        printf("execl failed\n");
17        break;

```



```
18 default:
19     /* parent uses wait to suspend execution until child finishes */
20     wait((int*)0);
21     printf("is completed\n");
22     break;
23 }
24
25 return 0;
26 }
```

附录 B 第二部分

这里是附录 B。这里是附录 B。这里是附录 B。这里是附录 B。这里是附录 B。这里是附录 B。这里是附录 B。这里是附录 B。这里是附录 B。

E-mail: 3304839708@qq.com