

上海交通大学

SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY



Multiscale Materials Modeling and Simulation

report - 1D periodic atomic chain

Student Name: San Zhang

Student ID: XXXXXXXXXXXXXX

School: SMSE

01 / 29 / 2024

目录

1	Experimental Purpose	1
2	Experimental Method	1
3	Experimental Content	1
3.1	Content 1	1
3.2	Content 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

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。

Reference citation test: Reference^[1], Reference^[1-3]; Reference^[1-2,4].

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] CHEN Y, HAMMERSCHMIDT T, PETTIFOR D, et al. Influence of vibrational entropy on structural stability of Nb–Si and Mo–Si systems at elevated temperatures[J]. *Acta Materialia*, 2009, 57(9): 2657-2664.
- [2] TANG Y, XIAO B, CHEN J, et al. Multi-component Alloying Effects on the Stability and Mechanical Properties of Nb and Nb–Si Alloys: A First-Principles Study[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2023, 54(2): 450-472.
- [3] YIN S, ZUO Y, ABU-ODEH A, et al. Atomistic simulations of dislocation mobility in refractory high-entropy alloys and the effect of chemical short-range order[J]. *Nature Communications*, 2021, 12(1): 4873.
- [4] ZHU S, SHITTU J, PERRON A, et al. Probing phase stability in CrMoNbV using cluster expansion method, CALPHAD calculations and experiments[J]. *Acta Materialia*, 2023, 255: 119062.

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