

# 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

2024 年 01 月 29 日

# 目录

<b>1 实验目的</b>	<b>1</b>
<b>2 实验方法</b>	<b>1</b>
<b>3 实验内容</b>	<b>1</b>
3.1 内容 1 . . . . .	1
3.2 内容 2 . . . . .	2
<b>4 分析与讨论</b>	<b>3</b>
<b>5 结论</b>	<b>3</b>
<b>参考文献</b>	<b>4</b>
<b>A 第一部分</b>	<b>5</b>
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>B 第二部分</b>	<b>8</b>

# 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。

无编号公式：

$$E_p = \frac{1}{2} k x^2$$

有编号公式，如公式 2-1。

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

一些数学直立体：

- 微分符号 d: \dd
- 圆周率  $\pi$ : \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：文献引用<sup>[1]</sup>；文献引用<sup>[1-3]</sup>；文献引用<sup>[1-2,4]</sup>；

## 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