

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 2 月 28 日

目 录

1. 实验目的	1
2. 实验原理	1
3. 实验内容	1
3.1. 实验内容 1	1
3.2. 实验内容 2	1
4. 结果与讨论	1
4.1. 结果	1
4.2. 讨论	1
5. 结论	1
参考文献	2
A 附录 A	3
A.1 Python 代码	3
A.2 C++ 代码	3
A.3 Rust 代码	5
B 附录 B	5

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。

2. 实验原理

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：

有编号公式，如公式

参考文献引用¹

3. 实验内容

3.1. 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。这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。这里是实验内容 1。

3.2. 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。这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。这里是实验内容 2。

4. 结果与讨论

4.1. 结果

这里是结果。这里是结果。这里是结果。这里是结果。这里是结果。这里是结果。这里是结果。
这里是结果。这里是结果。这里是结果。这里是结果。

4.2. 讨论

这里是讨论。这里是讨论。这里是讨论。这里是讨论。这里是讨论。这里是讨论。这里是讨论。
这里是讨论。这里是讨论。这里是讨论。这里是讨论。

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。

参考文献

1. Zhu, S. *et al.* Probing phase stability in CrMoNbV using cluster expansion method, CALPHAD calculations and experiments. *Acta Materialia* **255**, 119062 (2023)

A 附录 A

A.1 Python 代码

Python 源代码:

```
1  def main():  
2      operation = input("Enter operator (+, -, *, /): ")  
3      num1 = float(input("Enter first number: "))  
4      num2 = float(input("Enter second number: "))  
5  
6      if operation == '+':  
7          result = num1 + num2  
8      elif operation == '-':  
9          result = num1 - num2  
10     elif operation == '*':  
11         result = num1 * num2  
12     elif operation == '/':  
13         if num2 == 0:  
14             print("Error: Division by zero!")  
15             return  
16         result = num1 / num2  
17     else:  
18         print("Error: Invalid operator!")  
19         return  
20  
21     print("Result:", result)  
22  
23 if __name__ == "__main__":  
24     main()
```

A.2 C++ 代码

```
1  #include <iostream>  
2  using namespace std;  
3  
4  // Function to add two numbers  
5  float add(float a, float b) {  
6      return a + b;  
7  }  
8  
9  // Function to subtract two numbers  
10 float subtract(float a, float b) {  
11     return a - b;  
12 }  
13
```

```

14 // Function to multiply two numbers
15 float multiply(float a, float b) {
16     return a * b;
17 }
18
19 // Function to divide two numbers
20 float divide(float a, float b) {
21     if (b == 0) {
22         cerr << "Error: Division by zero!" << endl;
23         return 0;
24     }
25     return a / b;
26 }
27
28 int main() {
29     char operation;
30     float num1, num2, result;
31
32     cout << "Enter operator (+, -, *, /): ";
33     cin >> operation;
34
35     cout << "Enter two numbers: ";
36     cin >> num1 >> num2;
37
38     switch(operation) {
39         case '+':
40             result = add(num1, num2);
41             break;
42         case '-':
43             result = subtract(num1, num2);
44             break;
45         case '*':
46             result = multiply(num1, num2);
47             break;
48         case '/':
49             result = divide(num1, num2);
50             break;
51         default:
52             cerr << "Error: Invalid operator!" << endl;
53             return -1;
54     }
55
56     cout << "Result: " << result << endl;

```

```
57  
58     return 0;  
59 }
```

A.3 Rust 代码

Rust 源代码:

```
1 pub fn main() {  
2     println!("Hello, world!");  
3 }
```

B 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。这里是附录 B。这里是附录 B。