

# 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
A 附录 A .....	2
A.1 Python 代码 .....	2
A.2 C++ 代码 .....	2
A.3 Rust 代码 .....	4
B 附录 B .....	4
参考文献 .....	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<sup>[1]</sup>

## 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。

## 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。

## 参考文献

- [1] ZHU S, SHITTU J, PERRON A, et al. Probing phase stability in CrMoNbV using cluster expansion method, CALPHAD calculations and experiments[J/OL]. *Acta Materialia*, 2023, 255: 119062. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359645423003932>. DOI:<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.119062>.