**函数定义部分**

%定义兰纳琼斯拟合函数

function F = nihe(x,xdata)

F=x(1)\*xdata.^(-13)+x(2)\*xdata.^(-7);

End

%定义兰纳琼斯拟合函数

function F = nihe01(x,xdata)

F=x(1)\*xdata+x(2)\*xdata+x(3)\*xdata.^2+x(4)\*xdata.^3+x(5)\*xdata.^4+x(6)\*xdata.^5+x(7)\*xdata.^(-7）;

end

%定义兰纳琼斯修正函数

function F = nihebeta( x,xdata )

F=x(1)\*xdata.^(-13)+x(2)\*xdata.^(-7)+x(3)\*xdata.^(-5);

End

%在拟合求得系数后定义兰纳琼斯修正函数（方便求解第三问）

function F = shinenghanshu(r)

F=4\* 142.98842545429849337779160123318\*((0.94396543650484804544479955467617/r)^12- ( 0.94396543650484804544479955467617/r)^6- 0.24415874843770779545337745730649/r^4);

End

%在拟合求得系数后定义兰纳琼斯修正函数的导数函数即力函数（方便求解第三问）

function F= lihanshu(r)

F=-3435.7\*r.^(-13)+2428.0\*r.^(-7)-558.59\*r.^(-5);

end

**主函数部分**

**%% 第一问**

syms x1 y1 x2 y2 x3 y3 x4 y4

[x1,y1]=solve('y1^12-(1.5)^6\*y1^6-(2.611104485/4)\*x1^(-1)\*(1.5)^6=0','y1^12-(1.8)^6\*y1^6-(-1.061025201/4)\*x1^(-1)\*(1.8)^6=0');%带入数值联立方程解方程

[x2,y2]=solve('y2^12-(1.9)^6\*y2^6-(-1.341402343/4)\*x2^(-1)\*(1.9)^6=0','y2^12-(2.3)^6\*y2^6-(-1.481624726/4)\*x2^(-1)\*(2.3)^6=0');

[x3,y3]=solve('y3^12-(2.5)^6\*y3^6-(-1.370806496/4)\*x3^(-1)\*(2.5)^6=0','y3^12-(3)^6\*y3^6-(-0.912203381/4)\*x3^(-1)\*(3)^6=0');

[x4,y4]=solve('y4^12-(3.3)^6\*y4^6-(-0.589300528/4)\*x4^(-1)\*(3.3)^6=0','y4^12-(3.8)^6\*y4^6-(-0.191850231/4)\*x4^(-1)\*(3.8)^6=0');

x1=vpa(x1,8);%定义位数为8位

y1=vpa(y1,8);

x2=vpa(x2,8);

y2=vpa(y2,8);

x3=vpa(x3,8);

y3=vpa(y3,8);

x4=vpa(x4,8);

y4=vpa(y4,8);

A=[x1,x2,x3,x4;y1,y2,y3,y4];

mean(abs(A),2)

% x 代表势能井 y代表范德华半径

**%% 第二问—求兰纳琼斯函数初始值x0 ( 使用lsqcurvefit时需知道初始值x0，x0是一个数组)**

syms x1 x2

equ1=x1\*exp(1.5)+x2\*1.5.^(-7)-50.99339386==0;

equ2=x1\*exp(1.6)+x2\*1.6.^(-7)-29.45603784==0;

[x1,x2]=solve(equ1,equ2);

x1=vpa(x1,8)

x2=vpa(x2,8)

**%% 第二问—兰纳琼斯拟合**

xdata= [1.5

1.6

1.7

1.8

1.9

2

2.1

2.2

2.3

2.4

2.5

2.6

2.7

2.8

2.9

3

3.1

3.2

3.3

3.4

3.5

3.6

3.7

3.8

3.9

4

4.1

]

ydata= [50.99339386

29.45603784

16.14900065

8.149689578

3.500426677

0.922380883

0.697720557

-0.077584849

-0.770026947

-1.103052932

-1.461661639

-1.673505428

-1.777123806

-1.897867831

-2.007891984

-2.132391571

-2.205109185

-2.159555125

-1.995174244

-1.790830878

-1.624578884

-1.494768094

-1.399044847

-1.302741441

-1.168752552

-0.985335632

-0.72218956

];

x0=[-1.4288937,980.68585];

[x,resnorm,residual,exitflag,output] = lsqcurvefit(@nihe,x0,xdata,ydata) %lsqcurvefit拟合非线性方程

syms a b

equ1=a^(-1)\*(6808.6)+48\*b^12==0;

equ2=a^(-1)\*(300.41)-24\*b^6==0;

[a,b]=solve(equ1,equ2);

a=abs(vpa(a,8))

b=abs(vpa(b,8))

%a 是势能阱=1.104560997610864792051188487676

%b表示范德华=1.4987144912808439110738219226071

r=[1.5 1.8 1.9 2.3 2.5 3 3.3 3.8];

V1=arrayfun(@(r)4\*1.104560997610864792051188487676\*( ( 1.4987144912808439110738219226071/r)^12-( 1.4987144912808439110738219226071/r)^6) ,r );%输出求得的势能函数

V2=[2.611104485 -1.061025201 -1.341402343 -1.481624726 -1.370806496 -0.912203381 -0.589300528 -0.191850231];

subplot(1,2,1);

plot(xdata,nihe(x,xdata),'k','LineWidth',1);

hold on;

plot(xdata,ydata,'r-','LineWidth',1);

title('力与距离');

xlabel('距离(埃米)');

ylabel('力(eV/埃米)');

grid on;

legend('拟合图像','原始数据');

subplot(1,2,2);

plot(r,V1,'k','LineWidth',1);

hold on;

plot(r,V2,'r','LineWidth',1);

xlabel('距离(埃米)');

ylabel('势能(eV)');

grid on;

legend('拟合图像','原始数据');

title('势能与距离');

**%% 第二问—求兰纳琼斯修正函数 初始值x0( 使用lsqcurvefit时需知道初始值x0，x0是一个矩阵)**

syms x1 x2 x3

equ1=x1\*(1.5)^(-13)+x2\*(1.5)^(-7)+x3\*(1.5)^(-5)-(50.99339386)==0;

equ2=x1\*(1.6)^(-13)+x2\*(1.6)^(-7)+x3\*(1.6)^(-5)-(29.45603784)==0;

equ3=x1\*(1.7)^(-13)+x2\*(1.7)^(-7)+x3\*(1.7)^(-5)-(16.14900065)==0;

[x1,x2,x3]=solve(equ1,equ2,equ3);

x1=vpa(x1,8)

x2=vpa(x2,8)

x3=vpa(x3,8)

**%% 第二问—兰纳琼斯修正函数 拟合**

xdata= [1.5

1.6

1.7

1.8

1.9

2

2.1

2.2

2.3

2.4

2.5

2.6

2.7

2.8

2.9

3

3.1

3.2

3.3

3.4

3.5

3.6

3.7

3.8

3.9

4

4.1

]

ydata= [50.99339386

29.45603784

16.14900065

8.149689578

3.500426677

0.922380883

0.697720557

-0.077584849

-0.770026947

-1.103052932

-1.461661639

-1.673505428

-1.777123806

-1.897867831

-2.007891984

-2.132391571

-2.205109185

-2.159555125

-1.995174244

-1.790830878

-1.624578884

-1.494768094

-1.399044847

-1.302741441

-1.168752552

-0.985335632

-0.72218956

];

x0=[ -3574.4437, 2501.0917,-584.89598];

[x,resnorm,residual,exitflag,output] = lsqcurvefit(@nihebeta,x0,xdata,ydata)

syms a b c ;

equ1=-48\*b^(12)+3435.7\*a^(-1)==0;

equ2=24\*b^(6)-2428.0\*a^(-1)==0;

equ3=16\*c+558.59\*a^(-1)==0;

[a,b,c]=solve(equ1,equ2,equ3);

a=abs(vpa(a,8))

b=abs(vpa(b,8))

c=abs(vpa(c,8))

r=[1.5 1.8 1.9 2.3 2.5 3 3.3 3.8];

V1=arrayfun(@(r) 4\* 142.98842545429849337779160123318\*(( 0.94396543650484804544479955467617/(r+0.8))^12- ( 0.94396543650484804544479955467617/(r+0.8))^6- 0.24415874843770779545337745730649/((r+0.8)^4) ),r);

V2=[2.611104485 -1.061025201 -1.341402343 -1.481624726 -1.370806496 -0.912203381 -0.589300528 -0.191850231];

subplot(1,2,1)

plot(r,V1,'k','LineWidth',1);

hold on;

plot(r,V2,'r','LineWidth',1);

title('势能与距离');

xlabel('距离(埃米)');

ylabel('势能(eV)');

grid on;

legend('拟合图像','原始数据');

subplot(1,2,2)

plot(xdata,nihebeta(x,xdata),'k','LineWidth',1);

hold on;

plot(xdata,ydata,'r','LineWidth',1);

xlabel('距离(埃米)');

ylabel('力(eV/埃米)');

grid on;

legend('拟合图像','原始数据');

title('力与距离');

**%% 第二问 Buckingham函数拟合**

xdata= [1.5

1.6

1.7

1.8

1.9

2

2.1

2.2

2.3

2.4

2.5

2.6

2.7

2.8

2.9

3

3.1

3.2

3.3

3.4

3.5

3.6

3.7

3.8

3.9

4

4.1

]

ydata= [50.99339386

29.45603784

16.14900065

8.149689578

3.500426677

0.922380883

0.697720557

-0.077584849

-0.770026947

-1.103052932

-1.461661639

-1.673505428

-1.777123806

-1.897867831

-2.007891984

-2.132391571

-2.205109185

-2.159555125

-1.995174244

-1.790830878

-1.624578884

-1.494768094

-1.399044847

-1.302741441

-1.168752552

-0.985335632

-0.72218956

];

% x0=[-1177.0728,-74.294143,1722.8966,-981.97255, 282.28737];

[x,resnorm,residual,exitflag,output] = lsqcurvefit(@nihe01,x0 , xdata,ydata)

syms a b c ; %a 是A b是 phai c是c

equ1=(119.238222017794)\*b+a==0;

equ2=(-322.353558882783)\*b^2-a==0;

equ3=-(1113.18395448538)+6\*c==0;

[a,b,c]=solve(equ1,equ2,equ3)

a=abs(vpa(a,8))

b=abs(vpa(b,8))

c=abs(vpa(c,8))

r=[1.5:0.1:4.1];

y=@(r)(44.106085377933482050138991326094\*exp(-1\*r/0.36989888503496387572866410664574)- 185.53065908089664048929989803582\*r.^(-6))\*(1)

m=[1.5 1.8 1.9 2.3 2.5 3 3.3 3.8];

n=[2.611104485 -1.061025201 -1.341402343 -1.481624726 -1.370806496 -0.912203381 -0.589300528 -0.191850231];

subplot(1,2,1);

plot(xdata,nihe01(x,xdata),'k','Linewidth',1);

hold on;

plot(xdata,ydata,'r','Linewidth',1);

title('Buckingham力与距离');

xlabel('距离(埃米)');

ylabel('力(eV/埃米)');

grid on;

legend('拟合图像','原始数据');

subplot(1,2,2);

plot(r,y(r),'k','Linewidth',1);

hold on;

plot(m,n,'r','Linewidth',1);

xlabel('距离(埃米)');

ylabel('势能(eV)');

grid on;

legend('拟合图像','原始数据');

title('Buckingham势能与距离');

**%% 第三问 求解使系统势能最小的晶胞参数**

syms d ;

f1=1\*(8\*shinenghanshu(sqrt(3)\*d/2));

f2=8\*(shinenghanshu(sqrt(3)\*d/2)+3\*shinenghanshu(d)+3\*shinenghanshu(sqrt(2)\*d)+shinenghanshu(sqrt(3)\*d));

f=f1+f2;

df1=diff(f,d);

subplot(2,2,1);

ezplot(df1);%ezplot用来plot未知变量

title('体心立方势能导数函数');

xlabel('晶胞参数d(埃米)');

ylabel('势能导数V(r)’');

grid on;

subplot(2,2,2);

ezplot(f);

title('体心立方势能函数');

xlabel('晶胞参数(埃米)');

ylabel('V(r）(eV/埃米)');

grid on;

f3=6\*(8\*shinenghanshu(sqrt(3)\*d/2)+4\*shinenghanshu(sqrt(5)\*d/2)+1\*shinenghanshu(d) );

f4=8\*(3\*shinenghanshu(sqrt(2)\*d/2)+3\*shinenghanshu(d)+1\*shinenghanshu(sqrt(2)\*d)+3\*shinenghanshu(sqrt(3)\*d)+3\*shinenghanshu(sqrt(6)\*d/2));

m=f3+f4;

df2=diff(m,d);

subplot(2,2,3);

ezplot(df2);

title('面心立方势能导数函数');

xlabel('晶胞参数d(?)');

ylabel('势能导数V(r）’');

grid on;

subplot(2,2,4);

ezplot(m);

title('面心立方势能函数');

xlabel('晶胞参数(?)');

ylabel('V(r）(eV/?)');

grid on;

**%% 第四问 求解各个方向上的分力以及合力**

syms x y z a b c ;

r0=1.17;

n=[0:10];%长/宽/高的铁原子个数为(n+1)个

x=n\*2\*r0/sqrt(3);

y=n\*2\*r0/sqrt(3);%设探针原子在铁块上平面的中心

z=4\*n\*r0/sqrt(3)+2;%探针原子与铁块上平面的中心的高度距离

sum1=0;

sum2=0;

sum3=0;

a=0;

b=0;

c=0;

d1=sqrt((x-4\*a\*r0/sqrt(3)).^2+(y-4\*b\*r0/sqrt(3)).^2+(z-4\*c\*r0/sqrt(3)).^2);%边角原子距离

d2=sqrt( (x-2\*r0/sqrt(3)-4\*a\*r0/sqrt(3) ).^2 + (y-2\*r0/sqrt(3)-4\*b\*r0/sqrt(3)).^2 + (z-2\*r0/sqrt(3)-4\*c\*r0/sqrt(3) ).^2 );

F1=lihanshu(d1);%边角原子力

F2=lihanshu(d2);%中心原子力

thetax1=(x-4\*a\*r0/sqrt(3))/d1;%边角原子沿着x轴

thetay1=(y-4\*b\*r0/sqrt(3))/d1;%边角原子沿着y轴

thetaz1=(z-4\*c\*r0/sqrt(3))/d1;%边角原子沿着z轴

thetax2=(x-2\*r0/sqrt(3)-4\*a\*r0/sqrt(3))/d2;%中心原子沿着x轴

thetay2=(y-2\*r0/sqrt(3)-4\*b\*r0/sqrt(3))/d2;%中心原子沿着y轴

thetaz2=(z-2\*r0/sqrt(3)-4\*c\*r0/sqrt(3))/d2;%中心原子沿着z轴

Fx=F1\*thetax1+F2\*thetax2;%沿x轴方向的分力

Fy=F1\*thetay1+F2\*thetay2;%沿y轴方向的分力

Fz=F1\*thetaz1+F2\*thetaz2;%沿z轴方向的分力

for c=0:n

for b=0:n

for a=0:n

sum1=sum1+Fx;

end

end

end

for c=0:n

for b=0:n

for a=0:n

sum2=sum2+Fy;

end

end

end

for c=0:n

for b=0:n

for a=0:n

sum3=sum3+Fz;

end

end

end

sum1;

sum2;

sum3;

sum=sqrt(sum1.^2+sum2.^2+sum3.^2);

subplot(2,3,1)

plot(n,sum1,'r','LineWidth',1);

xlabel('n晶胞数量');

ylabel('力(eV/?10^(-10)m)');

title('Fx-n的变化函数');

subplot(2,3,2)

plot(n,sum2,'b','LineWidth',1);

xlabel('n晶胞数量');

ylabel('力(eV/10^(-10)m)');

title('Fy-n的变化函数');

subplot(2,3,3)

plot(n,sum3,'k','LineWidth',1);

xlabel('n晶胞数量');

ylabel('力(eV/10^(-10)m)');

title('Fz-n的变化函数');

subplot(2,3,4)

plot(n,sum3,'k','LineWidth',1);

xlabel('n晶胞数量');

ylabel('力(eV/10^(-10)m)');

hold on;

plot(n,sum1,'r','LineWidth',1);

xlabel('n晶胞数量');

ylabel('力(eV/10^(-10)m)');

title('Fx/Fy-Fz的比较');

subplot(2,3,5)

plot(n,sum,'k','LineWidth',1);

xlabel('n晶胞数量');

ylabel('力(eV/10^(-10)m)');

title('合力的模的大小');