

本期封面



2001年11期

栏目:

DOI:

论文题目: 两相法和单相法在集团变分法中的应用

作者姓名: 马钢 夏源明

工作单位: 中国科学技术大学力学和机械工程系, 合肥230027

通信作者: 马钢

通信作者Email: magang@ustc.edu.cn

文章摘要: 本文提出了用于集团变分法中计算相平衡的两相法和计算失稳点的单相法. 对于一级相变, 两相法要求一种结构的对称群包含另一种结构的对称群, 这样可以得到精度很高的相变点. 一级相变的相变点和失稳点不同, 在温度-化学势图和温度-组分图中, 单相法得到的失稳点都滞后于两相法得到的相变点; 随着变化步长的减小可以得到精确的失稳点. 对于二级相变, 相变点和失稳点相同, 两种方法都可以得到相变点和失稳点. 虽然在化学势变化步长很小时难以用单相法确切判断二级相变的失稳点, 但在变化步长不是很小时, 单相法已经可以给出足够精确的相变点.

关键词: 集团变分法, 两相法, 单相法, 相平衡

分类号: 0176

关闭