Aplikace matematiky

Jan Kratochvíl

Grafická metoda řešení jednorozměrného modelu dislokace v krystalu

Aplikace matematiky, Vol. 11 (1966), No. 2, 124–132

Persistent URL: http://dml.cz/dmlcz/103007

Terms of use:

© Institute of Mathematics AS CR, 1966

Institute of Mathematics of the Czech Academy of Sciences provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.

This document has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* http://dml.cz

GRAFICKÁ METODA ŘEŠENÍ JEDNOROZMĚRNÉHO MODELU DISLOKACE V KRYSTALU

JAN KRATOCHVÍL

(Došlo dne 9. července 1964.)

1. Řadu důležitých vlastností dislokace v krystalu lze kvalitativně ocenit na jednorozměrném modelu, který je označován jako model Frenkelův [1]. Model je representován nekonečnou řadou „atomů" umístěných v periodickém potenciálu W a vzájemně spojených elastickými pružinami (obr. 1a). Vznik dislokace v tomto modelu si můžeme představit tak, že v pravé části atomové řady je proveden skluz o vzdálenost rovnou periodě potenciálu W. Porušené stavy jsou na obr. 1b, 1c. Polohy atomů musí vyhovovat podmínkám rovnováhy, které zapíšeme ve tvaru:

$$(1) \qquad (u_{k+1} - u_k) - (u_k - u_{k-1}) - V(u_k) = 0\,, \quad V(u_k) = \frac{\partial W}{\partial u_k}\,,$$

kde u_k udává výchylky k-tého atomu z neporušené polohy, k je celé číslo, $k \in (-\infty, \infty)$. Periodický potenciál W nahrazuje působení okolní krystalové mřížky na uvažovanou atomovou řadu a může zahrnovat i vliv vnějšího smykového napětí vloženého na krystal. O funkci $V(u)$ budeme předpokládat, že je definována a je spojitá na intervalu $(-\infty, \infty)$, je periodická s periodou 1 a pro $u \in \langle 0, \varepsilon_1 \rangle$, $\varepsilon_1 > 0$, platí

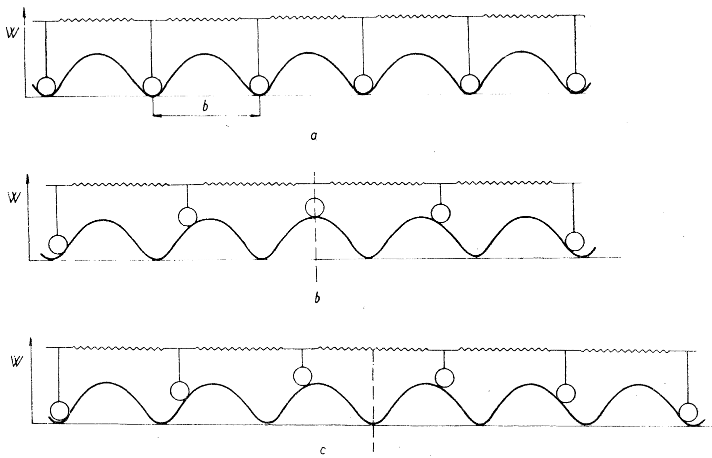
$$(2) \qquad V(u) = \varkappa u\,, \quad \varkappa > 0\,.$$

V dalším se budeme zajímat o statické rovnovážné polohy atomů u_k, jež splňují rovnici rovnováhy (1) a které odpovídají krystalu s jedinou dislokací, tj. platí

$$\text{(A)} \lim_{k \to -\infty} u_k = 0\,, \quad \text{(B)} \lim_{k \to \infty} u_k = 1\,, \quad \text{(C)}\ u_k \leqq u_{k+1} \quad \text{pro} \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\,.$$

Podmínky (A) a (B) charakterisují dislokaci jako hranici mezi levou a pravou částí skluzové roviny. Vpravo od dislokace byl proveden skluz o -1, vlevo zůstávají atomy v blízkosti neporušených poloh. Požadavek (C) znamená, že hledané řešení odpovídá jediné dislokaci s Burgersovým vektorem rovným -1 a ne řadě dislokací s různými Burgersovými vektory a s celkovým Burgersovým vektorem rovným -1.

Úloha tedy vyžaduje nalézt pro danou funkci $V(u)$ všechny posloupnosti čísel u_k, $k \in (-\infty, \infty)$, které splňují systém nelineárních diferenčních rovnic (1) a vyhovují podmínkám (A), (B), (C). V této práci popíšeme grafickou metodu řešení uvedeného problému. Podrobnější fysikální rozbor získaných výsledků je podán v článku [2]; tato práce je věnována matematickému zdůvodnění navrhované metody.



Obr. 1. a) Model ideálního krystalu; b) c) Dvě symetrické konfigurace atomů v modelu, který je porušen dislokací.

2. Pro grafickou metodu řešení systému (1) je výchozí a základní příbuzná úloha: Hledejme všechny posloupnosti čísel u_k, $k = s, s - 1, \ldots, -\infty$ které splňují rovnice (1) pro $k = s - 1, s - 2, \ldots, -\infty$, s je libovolně zvolené celé číslo.

Dále požadujeme, aby posloupnosti u_k splňovaly podmínky:

(A') existuje k_0, $-\infty < k_0 \leqq s$ tak, že $u_k \geqq 0$ pro $k < k_0$,

(A) $\lim\limits_{k \to -\infty} u_k = 0$.

Posloupnosti těchto vlastností nazveme řešením systému (1) pro $k = s - 1, \ldots, -\infty$.

Pokud $0 \leqq u_k \leqq \varepsilon_1$ pro všechna $k \leqq s$, řešení jsou dána rovnicemi

$$u_k = u_s e^{\beta(k-s)}, \tag{3}$$

$u_s \in \langle 0, \varepsilon_1 \rangle$, β je určeno vztahy $\cosh \beta = 1 + \frac{1}{2}\varkappa$, $\beta > 0$, $\varkappa$ je konstanta z (2). Množina řešení systému (1) pro $k = s - 1, \ldots, -\infty$ je neprázdná.

K systému rovnic (1) přiřadíme systém rovnic

$$u_{k+1} - u_k - \sum_{i=-\infty}^{k} V(u_i) = 0, \tag{4}$$

který jsme získali formálním sečtením rovnic (1) pro $i = k, k - 1, \ldots, -\infty$. Posloupnost čísel u_k pro $k = s, s - 1, \ldots, -\infty$, kde s je libovolné celé číslo, nazveme řešení systémem (4), konvergují-li řady $\sum_{i=-\infty}^{k} V(u_i)$, splňují-li u_k rovnice (4) pro $k = s - 1, s - 2, \ldots, -\infty$ a vyhovují-li podmínkám (A'), (A).

Platí: každé řešení systému (1) pro $k = s - 1, \ldots, -\infty$ je řešením systému (4) a naopak. Z podmínky (A'), (A) plyne, že existuje číslo k_1, pro které $0 \leqq u_k \leqq \varepsilon_1$, je-li $k < k_1$. To znamená, že pro $k < k_1 - 1$, u_k splňují lineární rovnice $(u_{k+1} - u_k) - (u_k - u_{k-1}) - \varkappa u_k = 0$ a podle (3) platí $u_k = D \exp \beta(k - k_1)$, $D > 0$. Pro posloupnost u_k platí např. $\lim_{k \to -\infty} u_k \,.\, k^2 = 0$ a tedy výrazy $\sum_{i=-\infty}^{k} u_i$, $\sum_{i=-\infty}^{k} V(u_i)$ konvergují. Odtud již snadno plyne uvedené tvrzení.

Řešení systému (4) (řešení budeme označovat indexem α) přiřadíme spočetnou množinu bodů v rovině u, v o souřadnicích

$$u = u_{k,\alpha}\,, \quad v = S_{k,\alpha}\,, \quad S_{k,\alpha} = \sum_{i=-\infty}^{k} V(u_{i,\alpha})\,. \tag{5}$$

Definice 1. *Dvě řešení systému (4), řešení α s koncovým bodem s a řešení α' s koncovým bodem s', budeme považovat za shodná, liší-li se jen tím, že číslování bodů je posunuto (tj. $u_{k,\alpha} = u_{k+r,\alpha'}$, $S_{k,\alpha} = S_{k+r,\alpha'}$, $s' = s + r$) nebo v řešení α' oproti řešení α jsou vynechány (resp. přidány) body $s, s - 1, \ldots, s - p + 1$, $s' = s - p$.*

Ve smyslu zavedené rovnosti je každému řešení systému (4) jednoznačně přiřazena spočetná uspořádaná množina bodů v rovině.

Věta 1. *Dvě řešení α a α' systému (4) jsou shodná mají-li jeden společný bod.*

Důkaz. Existuje číslo l takové, že $u_{l,\alpha} = u_{l,\alpha'}$, $S_{l,\alpha} = S_{l,\alpha'}$. (Má-li splývající bod v řešení α index l a v řešení α' index l', můžeme ve smyslu zavedené rovnosti body řešení α' přečíslovat.) Z $(l - 1)$-ní rovnice systému (4) a definice čísel S_l plyne

$$u_l - u_{l-1} = S_l - V(u_l)\,, \quad S_{l-1} = S_l - V(u_l)\,,$$

odtud z předpokladů věty dostáváme

$$u_{l-1,\alpha} = u_{l-1,\alpha'}\,, \quad S_{l-1,\alpha} = S_{l-1,\alpha'}\,.$$

Z l-té rovnice systému (4) obdobně

$$u_{l+1,\alpha} = u_{l+1,\alpha'}\,, \quad S_{l+1,\alpha} = S_{l+1,\alpha'}\,.$$

Shodují-li se řešení α, α' v bodě l, shodují se i v bodech $l + 1$, $l - 1$, atd.

Z věty 1 plyne, že k určení řešení systému (4) stačí předepsat souřadnice jediného bodu. Bod roviny u, v udávající řešení budeme nazývat representačním bodem řešení.

Lemma 1. *Nechť τ_0 je libovolně zvolené číslo $0 < \tau_0 \leqq \varepsilon_1$, za representační bod řešení vezměme bod $k = p$, kterému odpovídá největší hodnota z hodnot řešení*

$u_k \leqq \tau_0$. *Potom platí: Representační body všech řešení systému* (4), *která splňují nerovnost* $0 \leqq u_k \leqq \varepsilon_1$ *pro* $k \leqq s$, *vyplní v rovině* u, v *úsečku* $u = \tau$, $v = \varkappa\tau/(1 - e^{-\beta})$. *Číslo* τ *je parametr*, $\tau \in (\tau_0 e^{-\beta}, \tau_0)$. *Každému representačnímu bodu této úsečky odpovídá právě jedno řešení.*

Důkaz. Vzhledem k tomu, že

$$u_k = u_s \exp \beta(k - s)$$

a

$$v_k = S_k = \sum_{i=-\infty}^{k} V(u_k) = \varkappa u_s e^{-\beta s} \sum_{i=-\infty}^{k} e^{\beta i} = \varkappa/1 - e^{-\beta} \,.\, u_s \exp \beta(s - k)\,,$$

všechny body uvažovaného řešení leží na úsečce $v = \varkappa u/1 - e^{-\beta}$, $0 \leqq u \leqq \varepsilon_1$ a vzhledem k definici 1 nejméně jeden na úsečce $u = \tau$,

$$v = \frac{\varkappa}{1 - e^{-\beta}}\tau\,, \quad e^{-\beta}\tau_0 < \tau \leqq \tau_0\,.$$

Každé hodnotě τ z intervalu $\tau_0 e^{-\beta} < \tau \leqq \tau_0$ odpovídá representační bod řešení (4); stačí položit v rovnici $u_p = u_s \exp \beta(p - s)$, $u_s = \tau$, $p = s = 0$. Úsečka $\tau_0 e^{-\beta} < < \tau \leqq \tau_0$ je representačními body vyplněna. Závěrečné tvrzení vyplývá již triviálně.

K pevně zvolenému číslu τ_0, $0 < \tau_0 \leqq \varepsilon_1$, budeme postupně definovat 0-tý až l-tý oblouk křivky S, kde l je přirozené číslo. Body l-tého oblouku budeme označovat ${}^l u$, ${}^l v$.

Nultým obloukem nazveme úsečku ${}^0 u = \tau$, ${}^0 v = \varkappa\tau/1 - e^{-\beta}$, $\tau_0 e^{-\beta} < \tau \leqq \tau_0$. Podle lemmatu 1 nultý oblouk representuje všechna řešení (ve smyslu zavedené rovnosti) systému (4), která splňují požadavek $0 \leqq u_k \leqq \tau_0$, pro $k \leqq s$. Každé řešení těchto vlastností má na nultém oblouku právě jeden bod.

Na základě $(l - 1)$-ho oblouku definujeme l-tý oblouk: l-tým obloukem nazveme množinu bodů ${}^l u = {}^{l-1}u + {}^{l-1}v$, ${}^l v = {}^{l-1}v + V({}^{l-1}u + {}^{l-1}v)$. Vzhledem k vlastnostem funkce $V(u)$ je k spojitému $(l - 1)$-nímu oblouku l-tý oblouk udán těmito rovnicemi jednoznačně a je spojitý. Znamená to, že k danému τ, $\tau_0 e^{-\beta} < \tau \leqq \tau_0$ je na l-tém oblouku určen jednoznačně bod, který se spojitou změnou τ mění svoji polohu na l-tém oblouku spojitě.

Lemma 2. *Uvažujme všechna řešení systému* (4), *pro která platí*: $0 \leqq u_k \leqq \tau_0$ *pro* $k \leqq s - l$, *bod* $k = s - l + 1$ *leží na prvém oblouku*, …, *bod* $k = s - 1$ *leží na* $(l - 1)$-*ním oblouku. Representačním bodem takového řešení nazveme bod* $k = s$. *Tyto representační body vyplní* l-*tý oblouk. Každému řešení uvedených vlastností odpovídá na* l-*tém oblouku právě jeden bod.*

Užitím úvahy z důkazu lemmatu 1 lze dokázat lemma 2 snadno úplnou indukcí.

Lemma 3. *Oblouky na sebe spojitě navazují, tj. první oblouk navazuje na nultý, druhý na první, …,* l-*tý na* $(l - 1)$-*ní atd.*

Pod pojmem spojitého navazování rozumíme

$$\lim_{\tau \to \tau_0 e^{-\beta}} {}^l u = {}^{l-1}u(\tau_0), \quad \lim_{\tau \to \tau_0 e^{-\beta}} {}^l v = {}^{l-1}v(\tau_0).$$

Pro první oblouk platí, uvažujeme-li vztah $e^{\beta} + e^{-\beta} - 2 = \varkappa$,

$$\lim_{\tau \to \tau_0 e^{-\beta}} {}^1 u = \lim_{\tau \to \tau_0 e^{-\beta}} (\tau + \varkappa\tau)/(1 - e^{-\beta}) = \tau_0 = {}^0 u(\tau_0),$$

$$\lim_{\tau \to \tau_0 e^{-\beta}} {}^1 v = \lim_{\tau \to \tau_0 e^{-\beta}} [\varkappa\tau/(1 - e^{-\beta}) + V(\tau + \varkappa\tau)/(1 - e^{-\beta})] = \varkappa\tau_0 e^{-\beta}/(1 - e^{-\beta}) +$$
$$+ \varkappa\tau_0 = \varkappa\tau_0/(1 - e^{-\beta}) = {}^0 v(\tau_0),$$

a z indukce plyne tvrzení lemmatu 3.

Definice 2. *Pro dané τ_0 nazveme křivkou S množinu bodů, které vyplňují úsečku $v = \varkappa u/1 - e^{-\beta}$, $0 \leqq u \leqq \tau_0$ a první, druhý, ..., $(l - 1)$-ní, l-tý...oblouk.*

Věta 2. *Křivka S je definována jednoznačně nezávisle na volbě τ_0 a je spojitá.*

Důkaz: K danému τ_0 jsou oblouky definovány jednoznačně, tedy je jednoznačně určena i křivka S. Volíme-li za τ_0 jinou hodnotu τ'_0, $0 < \tau'_0 \leqq \varepsilon_1$ dosáhneme jen jiného dělení křivky S na oblouky. Podle věty 1 nemůžeme při vytváření oblouků odpovídajících hodnotě τ'_0 obdržet jiné body než body ležící na obloucích, které náležejí τ_0. Vzhledem k spojitosti oblouků a jejich spojitému navazování je křivky S spojitá.

Věta 3. *Všechny body přiřazené každému z řešení systému (4) leží na křivce S. Je možné nalézt čísla τ_0, l taková, že bod s leží na l-tém oblouku.*

Důkaz. Vezměme libovolné řešení systému (4) a zvolme jeho jeden bod $k = s$ za representační. Vzhledem k tomu, že řešení musí splňovat podmínky (A′) a (A), po konečném počtu kroků (jejich počet označme l) budou body $k \leqq s - l$ ležet v lineární oblasti a tedy nutně na úsečce $v = \varkappa u/(1 - e^{-\beta})$, $0 \leqq u \leqq \varepsilon_1$. Volme $\tau_0 = u_{s-l}$ tj. bod $k = s - l$ leží na nultém oblouku takto zavedeném dělení křivky S. To však znamená, že bod $s - l + 1$ leží v prvém oblouku atd. ... až bod $k = s$ leží na l-tém oblouku. Všechny body řešení leží nutně na křivce S. Tím je tvrzení věty 3 prokázáno.

Zvolme na křivce S libovolný bod. Vzhledem ke konstrukci křivky S lze vždy nalézt takový oblouk na křivce S (tj. zvolit takové τ_0), že zvolený bod patří do tohoto oblouku. Podle popsaných vět lze tento bod pokládat ta representační bod řešení systému (4). Přiřadíme-li k zvolenému bodu (můžeme jej nyní označit s) oblouk způsobem, který byl udán v důkaze věty 3, pak je správné tvrzení věty 4.

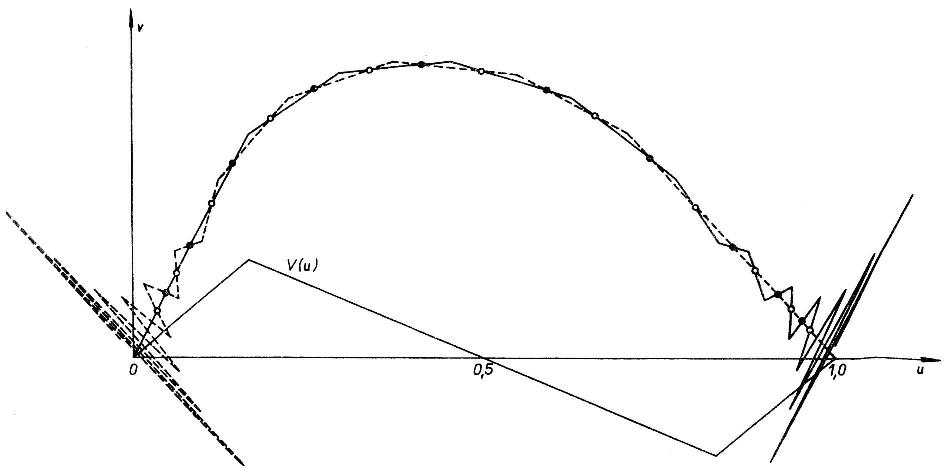
Věta 4. *Každé řešení systému (4) má na oblouku, který je přiřazen libovolně zvolenému bodu křivky S (vyjma bodu $u = 0$, $v = 0$), právě jeden bod.*

V tomto odstavci jsme dokázali existenci a jednoznačnost křivky S a do uvedených vět jsme shrnuli její podstatné vlastnosti.

3. Na základě úvah z druhého odstavce lze úlohu „nalézt všechna řešení systému (1), která splňují podmínky (A), (B), (C)", řešit následujícím způsobem. Zvolme libovolný atom řetězce a označme ho indexem $k = s$. Atom $k = s$ dělí řetězec na dvě části (dělení je možno zavést i jiným než uvedeným způsobem):

I. Řetězec, který je složen z atomů s indexem $k = -\infty, \ldots, s$.

II. Řetězec, který začíná pružinou mezi atomy s, $s + 1$ a zahrnuje atomy $k = s + 1, \ldots, \infty$.



Obr. 2. Grafické řešení systému (1) dané průsečíky křivek S a Z pro $V(u)$ složené z přímkových úseků. Plná čára představuje křivku S, čárkovaně je vytažena křivka Z. Kroužky a plně vyznačené průsečíky představují dvě možná řešení.

Všechny možné rovnovážné konfigurace řetězce I., který splňuje podmínky (A), (A') jsou representovány body křivky S. (Křivka S dává představu o silových poměrech v řetězci: S_s udává sílu, kterou bychom museli působit na atom $k = s$, aby byl vychýlen z neporušené polohy o vzdálenost u_s.)

Všechny možné rovnovážné konfigurace řetězce II. vyjádříme křivkou Z. (Nyní hledáme posloupnosti čísel u_k, $k = s, s + 1, \ldots, \infty$, které splňují rovnice (1) pro $k = s + 1, s + 2, \ldots, \infty$ a vyhovují podmínce (B) a podmínce analogické k (A').) Křivka Z je množina bodů roviny u, v o souřadnicích (γ značí index řešení)

$$u = u_{k,\gamma}\,, \quad v = Z_{k,\gamma}\,, \quad Z_{k,\gamma} - \sum_{i=k+1}^{\infty} V(u_i)\,. \tag{6}$$

Analogickým způsobem jako pro křivku S lze dokázat existenci, jednoznačnost a další vlastnosti křivky Z.

Řešení úlohy z prvého odstavce nalezneme z podmínky rovnováhy (1) s-tého atomu $(u_{s+1} - u_s) - (u_s - u_{s-1}) - V(u_s) = 0$, kterou vzhledem k definicím křivek

S a Z je možné napsat ve tvaru

(7) $$S_{s,\alpha} = Z_{s,\gamma},$$

při čemž žádáme $u_{s,\alpha} = u_{s,\gamma}$.

Pro dané $V(u)$ nalezneme řešení tak, že sestrojíme křivky S a Z a udáme jejich průsečíky. Z takto nalezených řešení budou představovat jedinou dislokaci ta řešení, která vyhovují podmínce (C). (Podmínka (A′) a analogická podmínka pro řetězec II. podmínku (C) plně nevystihuje.)

Řešení nezávisí na volbě indexu rozdělovacího bodu $k = s$ (viz definice 1). To znamená, protknou-li se křivky S a Z v bodě, který označíme s, protnou se i v bodech $k = -\infty, \ldots, s - 1, s + 1, \ldots, \infty$. Platí totiž, že $u_{s,\alpha}$ je možnou polohou atomu, je možnou polohou atomu i $u_{s+1,\alpha}, u_{s-1,\alpha}, \ldots$, které nalezneme k danému $u_{s,\alpha}$ z rovnic (4). Křivky S a Z buď nemají žádný společný bod, nebo jich mají alespoň spočetně nekonečně mnoho. Jednoduchý příklad křivek je uveden na obr. 2.

Křivky S a Z je možné snadno konstruovat a zjistit tak polohy atomů ve všech možných rovnovážných konfiguracích, které představují model krystalu porušený dislokací. (Změníme-li vhodně podmínky (A), (B), (C), lze studovat i skupiny dislokací.) Věta 4 umožňuje určit počet různých řešení z počtu průsečíků, které padnou do libovolného z oblouků křivky S.

Rozbor výsledků získaných grafickou metodou je popsán v práci [2].

Děkuji I. Babuškovi Dr. Sc., F. Kroupovi Dr. Sc. a E. Vitáskovi C. Sc. za cenné diskuse a pomoc při zpracování uvedených otázek.

Literatura

[1] *Prandtl L.:* ZAMM 8 (1928), 85.
Dehlinger V.: Ann. Phys. 2 (1929), 749.
Kontorova T. A., Frenkel J. I.: ŽETF 8 (1938), 89, 1340.
Indenbom V. L.: Kristallografija 3 (1958), 197.
Kratochvíl J. Indenbom V. L.: Czech. J. Phys. B 13 (1963), 814.
[2] *Kratochvíl J.:* Czech. J. Phys. B 15 (1965), 30.
[3] *Indenbom V. L.:* soukromé sdělení.

Резюме

ГРАФИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОЙ МОДЕЛИ ДИСЛОКАЦИИ В КРИСТАЛЛЕ

ЯН КРАТОХВИЛ (Jan Kratochvíl)

Предлагается графический метод решения бесконечной системы нелинейных разностных уравнений. Метод использован для получения статических равновесных конфигураций атомов, которые представляют одномерную модель

кристалла с дислокацией (1) (Рис. 1). Положения u_k атомов (k — индекс атома) в модели мы получили из условий равновесия (1) и условий (A), (B), (C).

Мы разделяем цепочку атомов на две части (s — любое целое число): I) цепочку, состоящую из атомов $k = -\infty, \ldots, s$, II) цепочку, начинающуюся пружиной между атомами s и $s + 1$ и содержающую атомы $k = s + 1, \ldots, \infty$.
Все возможные равновесные конфигурации цепочки I. представлены последовательностями u_k, $k = s, s - 1, \ldots, -\infty$, которые выполняют систему (1), $k = s - 1, s - 2, \ldots, -\infty$ и условия (A'), (A). Любой последовательности возможно сопоставить упорядоченное множество точек в плоскости u, v с координатами (5). В статье доказывается, что точки всех последовательностей образуют в плоскости u, v кривую S. Кривую S можно легко построить: для линейного $V(u)$, (2), u_k получаются в форме (3) и : $u = \tau$, $v = \varkappa\tau/(1 - e^{-\beta})$; для $(l - 1)$-ой точки кривой S мы находим координаты точки l из уравнений: $u_l - u_{l-1} = S_{l-1}$, $S_l = S_{l-1} + V(u_l)$.

Аналогично точки в плоскости u, v, которые принадлежат цепочке II, имеют координаты (6) и образуют кривую Z. Конфигурацию атомов в модели кристалла с дислокацией мы находим из условий равновесия, которые теперь можно написать в форме (7). Точки пересечения кривых S и Z (Рис. 2) представляют решения системы (1), которые выполняют условия (A), (B). Дислокации будут соответствовать последовательности, для которых выполнено (C).

Summary

GRAPHICAL SOLUTION METHOD OF ONE-DIMENSIONAL MODEL OF DISLOCATION IN CRYSTAL

JAN KRATOCHVÍL

A graphical method of solution of an infinite system of non-linear difference equations is presented. The method is used to determine the static equilibrium configurations of atoms which correspond to a one-dimensional model of a crystal disturbed by a dislocation (1) (Fig. 1). The positions u_k of the atoms (k is the index of the atom) in the model are found from the condition of equilibrium (1) and the conditions (A), (B), (C).

Consider an atomic chain composed of two parts (s is an arbitrary integer):

I. a chain which is composed of atoms $-\infty, \ldots, s$,

II. a chain which begins with the spirng between the atoms s and $s + 1$ and which contains the atoms $s + 1, \ldots, \infty$.

All possible equilibrium configurations of chain I are represented by the sequences of numbers u_k, $k = s, s - 1, \ldots, -\infty$, which fulfil the system (1), $k = s - 1$, $s - 2, \ldots, -\infty$, and satisfy conditions (A'), (A). To each sequence u_k we can assign,

in the u, v plane, a countably ordered set of points having the coordinates (5). It is proved that the points of all sequences u_k constitute a curve S in the u, v plane. The curve S can easily be constructed: for linear $V(u)$ (2), the u_k are given by (3) and $u = \tau$, $v = \varkappa\tau/(1 - e^{-\beta})$; for point $l - 1$ on the curve S we find the coordinates of the point l from the equations $u_l - u_{l-1} = S_{l-1}$, $S_l = S_{l-1} + V(u_l)$.

Analogously, in the u, v plane a curve Z is assigned to chain II. The curve Z is the set of the points having coordinates (6). The configuration of atoms in the model of a crystal with a dislocation is found from the conditions of equilibrium, which can be transformed to the form (7). The intersection points of the curves S and Z (Fig. 2) yield the solutions of the system (1) which satisfy conditions (A), (B). The dislocation is represented by those sequences u_k which satisfy (C).

Adresa autora: Jan Kratochvíl, Ústav fyziky pevných látek ČSAV, Cukrovarnická 10, Praha-Střešovice.