



## Das Frenkel-Kontorova-Modell – Eine unendliche Geschichte

*Wolfgang Quapp (MLS)*

*Mathematisches Institut, Universität Leipzig, PF 100920, D-04009 Leipzig,*

*Josep Maria Bofill*

*Departament de Química Orgánica, Universitat de Barcelona und  
Institut de Química Teórica i Computacional, Martí i Franqués, 1, 08028 Barcelona  
Spain*

Veröffentlicht: 1. Juni 2023

### Abstract

The Frenkel-Kontorova model (FK model) is a physical model, which can be imagined as a chain of pendulums, which are coupled to each other. It successfully describes dislocations in solids or in crystals and other phenomena, thus it is applied in many ways in solid state physics. By various additional assumptions or modifications of the original approach it results in an extended theory, which is still being studied today. The present paper mainly discusses stationary states of the simplest model, which give rise to the notion of a soliton.

Additionally, a transition from the discrete to the continuous form, of the chain of oscillators to a vibrating string with nonlinear excitation, is treated. The latter moves according to the so-called Sine-Gordon equation, a well-known soliton equation. A soliton solution describes, among other things, a long-lived wandering disorder in a crystal.

In another limit transition, a supposed extension of the chain to infinity is criticized, and wrong uses of the so-called Twist Map are revealed.

### Zusammenfassung

Das Frenkel-Kontorova-Modell (FK-Modell) ist ein physikalisches Modell, das man sich als eine Kette von Pendeln vorstellen kann, die untereinander gekoppelt sind. Es beschreibt erfolgreich Versetzungen in Festkörpern oder in Kristallen und weitere Phänomene; es wird in der Festkörperphysik vielfältig verwendet. Durch diverse Zusatzannahmen bzw. Modifikationen des ursprünglichen Ansatzes ergibt sich eine ausgedehnte Theorie, zu der bis heute geforscht wird. Hier sollen hauptsächlich stationäre Zustände des einfachsten Modells diskutiert werden, die zum Begriff eines Solitons Anlass geben.

Weiterhin wird ein Grenzübergang vom Diskreten zum Kontinuierlichen, nämlich von der Kette von Oszillatoren zu einer schwingenden Saite mit nichtlinearer Anregung vorgestellt. Letztere bewegt sich gemäß der sogenannten Sinus-Gordon-Gleichung, einer bekannten Solitongleichung. Eine Solitonenlösung beschreibt dann unter anderem eine langlebige wandernde Störung in einem Kristall. In einem anderen Grenzübergang wird eine vermeintliche Verlängerung der Kette ins Unendliche kritisiert, und es werden falsche Verwendungen der sogenannten Twist Map aufgezeigt.

### Keywords / Schlüsselwörter:

FK model, soliton, Newton trajectory, potential energy surface, Sine-Gordon Equation, Twist Map

FK-Modell, Soliton, Newton Trajektorie, Potential-Energie-Fläche, Sinus-Gordon-Gleichung, Twist Map

## 1 Einleitung

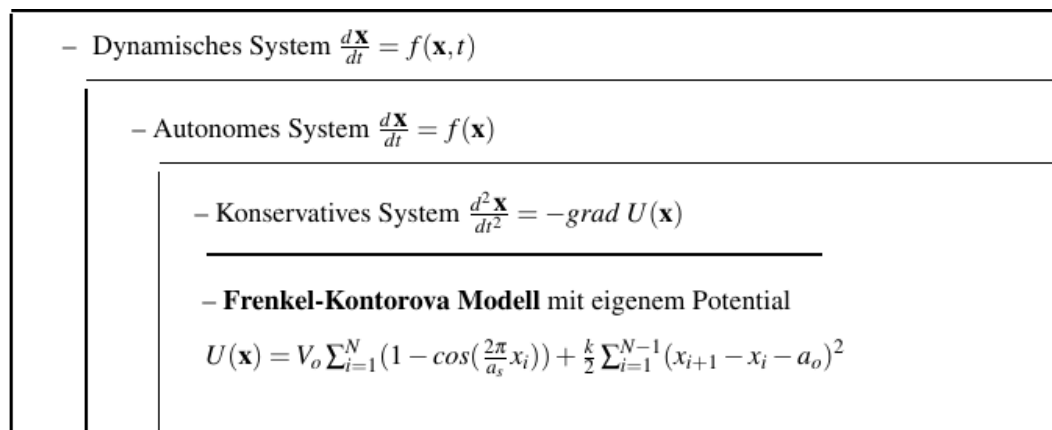
Diese Arbeit ist die leicht erweiterte ‚Papierform‘ eines Vortrages in der Leibniz-Sozietät zu Berlin im Februar 2023 (vgl. Quapp 2023). In dieser Zusammenfassung werden folgende Punkte behandelt:

- Die Grundbegriffe, in die das FK-Modell eingebettet ist.
- Das FK-Modell selbst wird vorgestellt, dabei sind wichtig: gleiche oder verschiedene Periodizität der beiden Potentiale.
- Minima als Grundzustände und hoch liegende Intermediäre sowie Übergänge über Sattelpunkte.
- Eigenschaften von angeregten Zuständen werden uns zum Begriff Soliton führen.
- Wichtige Anwendungen werden erwähnt – Beispiele vorgestellt.
- In einem zweiten Teil werden zwei Grenzprozesse diskutiert:
  - Einmal das FK-Modell und die schwingende Saite,
  - und der zweifelhafte Übergang zu einer ‘∞-langen’ Kette.
- Polemisiert wird dabei gegen die falsche Anwendung der Twist-Abbildung.

### Grundbegriffe

Die Theorie der dynamischen Systeme modelliert Bewegung oder Entwicklung, wie sich ein Zustand  $\mathbf{x}$  im Laufe der Zeit  $t$  verändert. Wenn der Prozess homogen bezüglich der Zeit ist, d.h. sein Verlauf hängt nur vom Anfangszustand ab, aber nicht von der Wahl des Anfangszeitpunkts, dann spricht man von einem autonomen System. Die Zeit  $t$  kann diskret (ganzzahlig) oder kontinuierlich sein. Der Raum der Zustände  $\mathbf{x}$  hat eine Dimension  $N$ , d.h.  $\mathbf{x}$  ist ein Vektor. Man schreibt  $\mathbf{x}=(x_1, x_2, \dots, x_N)^T$ . Wichtige Fragestellungen bei dynamischen Systemen betreffen ihr Langzeitverhalten (zum Beispiel Stabilität, Periodizität, Chaos und Ergodizität) und ihre Regelung.

Das FK-Modell reiht sich in folgende Systeme von Differentialgleichungen ein (Schema 1):



Schema 1: Das FK-Modell im Schema von Differentialgleichungen.

Hauptsächlich sollen in dieser Zusammenfassung stationäre Zustände des FK-Potentials betrachtet werden. Die dynamische Gleichung zweiter Ordnung wird beim Grenzübergang zur Sinus-Gordon Gleichung verwendet.

## 2 Das FK-Modell

Eingeführt wurde das Modell von Jakov Il'ič Frenkel' (1894–1952), Professor für Theoretische Physik an der Universität Leningrad und Tat'jana Abramovna Kontorova (1911–1976), die Assistentin bei Frenkel' war. Sie legte eine Dissertation zur Mechanik der plastischen Deformation von Kristallen vor (1938), aus der dieses Modell hervorgegangen ist. Weitere Arbeiten von ihr gibt es zu zwischenkristallinen Schichten, zu Katalysatoren, Festkörperphysik, Halbleitern und zu Untersuchungen zu Germanium. Die Originalarbeiten zum 'Frenkel-Kontorova-Modell' erschienen 1938 und 1939 (vgl. Kontorova/Frenkel 1938a; Kontorova/Frenkel 1938b; 1938c; Frenkel/Kontorova 1938; Frenkel/Kontorova 1939).

Jakov Il'ič Frenkel' wurde am 10.2.1894 Rostow am Don geboren. 1913 bis 1916 studierte er an der Universität St. Petersburg, danach war er dort wissenschaftlicher Mitarbeiter, später Professor. Von 1921–1952 gehörte er zum Physikalisch-Technisches Institut in Leningrad (Unterbrechungen: 1918–1921 Krim-Universität Simferopol, 1925–1926 Deutschland, 1930–1931 USA, 1941–1944 Kasan). Gestorben ist er am 23.1.1952 in Leningrad.

Frenkel' war ein universeller theoretischer Physiker, der auch für Experimente und Technik aufgeschlossen war. Sein Schwerpunkt war die kondensierte Materie – Festkörper, Kristalle, Metalle, Flüssigkeiten. Er war einer der Pioniere der Quantentheorie des festen und flüssigen Aggregatzustandes. 1924 schlug er eine erste Quantentheorie der Elektronenleitfähigkeit in Metallen vor, 1926 die Einführung der Löcher im Kristallgitter als Quasiteilchen und Beschreibung der ‚Frenkel-Defekte‘ in Kristallen. 1931 führte er die ‚Exzitations-Quanten‘ ein und gab ihnen 1936 den Namen Exzitonen, eines der ersten Quasipartikel. 1932 schlug er den Namen ‚Phonon‘ für das 1930 von I. E. Tamm eingeführte ‚Schall-Quantum‘ vor (vgl. Vasileiadis et al. 2021), eine quantisierte elastische Welle in Kristallen. 1936 und 1939 entwickelte er unabhängig von N. Bohr und J. A. Wheeler das Tröpfchenmodell des Atomkerns und eine darauf aufbauende Erklärung der Kernspaltung.

Er war national und international hoch anerkannt. 1929 wurde er zum korrespondierenden Mitglied der Akademie der Wissenschaften der Sowjetunion gewählt.

In der Stalinzeit überstand er knapp Kampagnen gegen die ‚Moderne Physik‘ (vgl. Frenkel 1996). Er musste sich jahrelang vor staatlichen und Parteigremien rechtfertigen. Insbesondere sollte er die Bücher zur Wellenmechanik (vgl. Frenkel 1929; Frenkel 1932; Frenkel 1934) ‚zurücknehmen‘, was er naturgemäß, wenn überhaupt, dann nur sehr halbherzig und mehrdeutig tat.

Frenkel' schrieb mehr als 250 Artikel und mehr als 30 Bücher, oft in vielen Auflagen. Ins Deutsche oder Englische übersetzte Bücher sind die folgenden: Frenkel 1928, 1929, 1932, 1950, 1946, 1957a, 1957b sowie Sekundärliteratur über ihn (vgl. Frenkel 1996). Die Biographie wurde vom Wissenschaftshistoriker Viktor Ya. Frenkel', seinem Sohn, vorgelegt.

Nach dem 2. Weltkrieg wurde die Beschäftigung mit dem FK-Modell in Deutschland durch Arbeiten von Kochendörfer und Seeger weitergeführt (vgl. 1950), in England von Frank und van der Merve (vgl. 1949a, 1949b), sowie auch von vielen weiteren Autoren (vgl. Braun/Kivshar 2004). Frenkel' selbst kam nicht wieder auf dieses Modell zurück.

## 2.1 Einführung des FK-Modells

Das FK-Modell beschreibt eine Kette von Partikeln, gemeinhin Atomen oder Molekülen, wie in Abbildung 1 (a), die

1. untereinander durch Federkräfte verbunden sind, und die
2. durch eine weitere Kraft angezogen werden, deren Potential durch eine Cosinus-Funktion beschrieben sei.

Die Federn werden als gleich angenommen, und die Anziehung in das Grundpotential kann in vielfältigen Modellen realisiert sein: Schwerkraft, wie im Pendelmodell, oder elektrostatische oder magnetische Kraft.

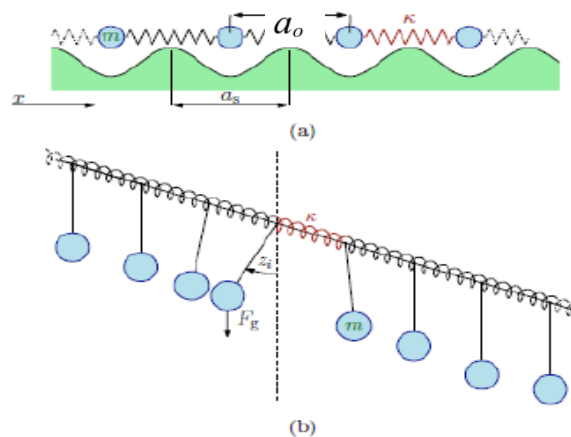


Abb. 1: Das Frenkel-Kontorova-Modell (vgl. Do et al. 2022).

Mechanische Pendel, wie in Abbildung 1 (b), die noch untereinander durch Federn gekoppelt sind, bilden ein spezielles FK-Modell, da die Pendel an der Aufhängung fixiert sind (vgl. Basu et al. 2008). Das allgemeine Modell ist verschieblich über dem Grundpotential.

Die Parameter des Modells sind:

1. Die ursprünglichen Abstände der Atome sind  $a_0$
2. Die ‚Federkonstante‘ ist  $k$
3. Die Periode des Cosinus ist  $a_s$

Das Potential für die lineare FK-Kette von Atomen  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)^T$  mit  $x_i < x_{i+1}$  lautet

$$U(\mathbf{x}) = V_0 \sum_{i=1}^N \left(1 - \cos\left(\frac{2\pi}{a_s} x_i\right)\right) + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (x_{i+1} - x_i - a_0)^2. \quad (1)$$

Die erste Summe beschreibt das Grundpotential; jedes  $x_i$  sitzt in irgendeiner Cosinus-Mulde. Die Kombination mit ‚1-cos‘ ist benutzt, um negative Werte zu vermeiden. Die zweite Summe beschreibt die einfachste Form einer nächste-Nachbar-Beziehung mit einem harmonischen Federansatz. Sowohl eine Verkürzung des Abstandes ( $x_{i+1} - x_i$ ) unter  $a_0$ , als auch eine Verlängerung dieser Distanz über  $a_0$  hinaus verursachen eine Kraft. Die Randpunkte  $x_1$  und  $x_N$  sind frei (im betrachteten Modell).

Vielfältige Verallgemeinerungen wurden schon diskutiert: Andere Funktionen für das Grundpotential (vgl. Milchev 1990; Quapp/Bofill 2022d), additiv höhere Potenzen in der Federformel, (vgl. Pelap et al. 2015; Mounouna et al. 2022), oder neben der bisherigen nächste-Nachbar-Formel noch die Einbeziehung weitere Nachbaratome (vgl. Mingaleev et al. 2000; De La Llave/Valdinoci 2007), die einige schwache Versionen von Ferromagnetismus erlauben, oder bei Verwendung von Coulombkräften (vgl. Quapp et al.

2020). Neben freien Randwerten von linear angeordneten FK-Ketten sind auch zyklische FK-Ketten möglich, die periodische Randwerte erzwingen (vgl. Quapp/Bofill 2021a).

## 2.2 Zwei Varianten für die Perioden der beiden Potentiale

- Fall der Abstände der Atome  $a_o = a_s$  (gleiche Periode)

Die Energie für das Minimum der FK-Kette ist Null, da alle Partikel in Ruhelage im Grundpotential sein können, und alle Federkräfte ebenfalls auf Null stehen (Abbildung 2).

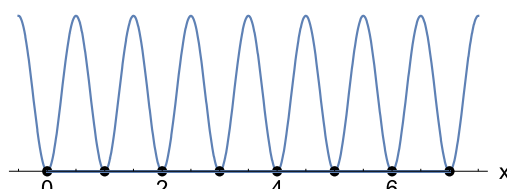


Abb. 2: FK-Modell mit  $N=8$  und  $a_o = a_s$ .

- Fall verschiedener Abstände der Atome  $a_o \neq a_s$  (ungleiche Periode)

Wenn die Perioden nicht zusammenpassen, dann wird die Energie für das globale Minimum der FK-Kette größer Null sein, da nicht mehr alle Partikel in Nullpunkt des Grundpotentials sein können. Auch eventuelle Federkräfte sind angespannt. In Abbildung 3 sind 8 Atome auf 10 Potentialmulden aufgeteilt. Dieser Grundzustand hat eine Energie größer Null.

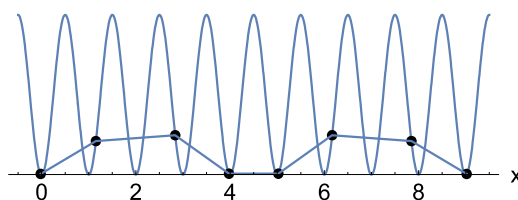


Abb. 3: Minimum des FK-Modells,  $N=8$ ,  $a_o = 1.25 * a_s$  und  $k = 10V_o$ .

## 2.3 Globale Minima, Sattelpunkte und Zwischen-Minima

Wir gehen zu einer kürzeren 5-atomigen Kette über. Für  $a_o = 2/3 a_s$  passt diese nicht in die Senken des Grundpotentials. Es ergeben sich die stationären Punkte, globales Minimum (Min), Sattelpunkt (SP) vom Index 1 ( $SP_1$ ) und Zwischenminimum (int Min), dargestellt in Abbildung 4. Die Berechnung nutzt gängige mathematische Optimierungsmethoden (vgl. Quapp/Bofill 2019b). Man beachte, dass man schon ein 5-dimensionales Problem vorliegen

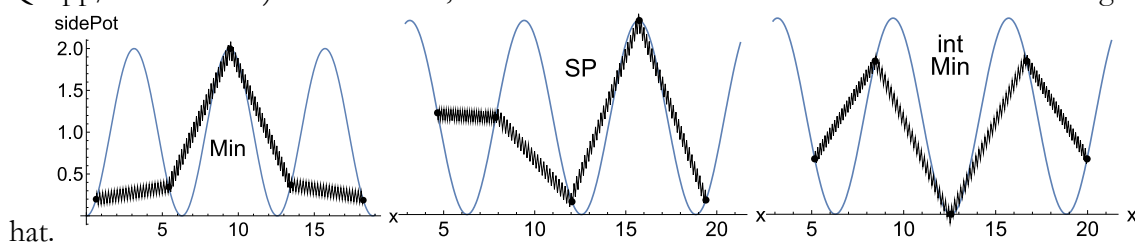


Abb. 4: Stationäre Punkte des FK-Modells, mit  $N=5$ ,  $a_o = 2/3 * a_s$ ,  $a_s = 2\pi$  und  $k = V_o$ .

Im globalen Minimum links in Abbildung 4 sind 5 Atome in 4 Senken eingebettet. Bei der Minimumstruktur sitzt ein Atom auf dem Gipfel des Grundpotentials. Jede Veränderung der Kette führt zu einer höheren Energie. Die Min-Struktur kann man so nach rechts verschieben, dass man bei einem  $SP_1$  herauskommt. Eine Rechnung dafür wird weiter unten beschrieben. Der  $SP_1$  hat eine viel höhere Energie als das globale Minimum, aber sein benachbartes intermediäres Minimum hat fast die gleiche Energie. Verschiebt man die Kette

noch weiter nach rechts (nicht dargestellt), kann man wieder an einem SP von Index 1 ankommen. Dieser ist spiegelsymmetrisch zu dem SP aus Abbildung 4. Eine nochmalige Rechtsverschiebung führt zu einem nächsten globalen Minimum, analog zum linken Bild in Abbildung 4, aber eine Potentialmulde des Grundpotentials weiter.

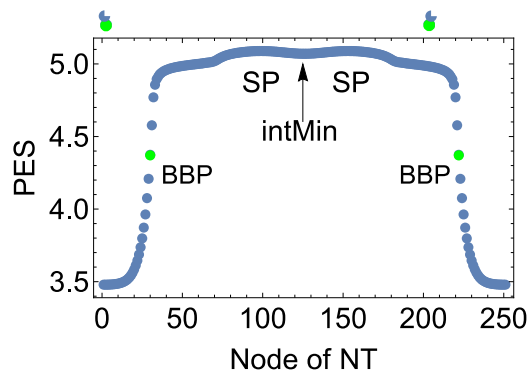


Abb. 5: Energieprofil zu Abbildung 4.

Abbildung 5 zeigt ein Energieprofil auf der 5-dimensionalen Potential-Energie-Fläche (PES) vom globalen Minimum, über  $SP_1$  und Int-Min und einen dazu symmetrischen  $SP_1$  zum nächsten globalen Minimum. ‚Oben‘ ergibt sich ein hochliegender, fast flacher ‚Gebirgsweg‘ für das FK-Modell mit  $N=5$ ,  $a_0=2/3 a_s$  und  $k = V_0$ . Es wurde dazu eine Kurve im Koordinatenraum der FK-Kette bestimmt (eine Newtontrajektorie, siehe unten), die die entsprechenden stationären Punkte verbindet, und darüber die potentielle Energie aus Formel (1) aufgetragen. Die (grünen) Punkte ‚BBP‘ werden ebenfalls weiter unten erklärt.

### 3 Solitonen

Die Beobachtung eines fast flachen ‚Gebirgsweges‘ führt bei längeren Ketten zur Erscheinung von Solitonen: Strukturen, die sich ähnlich wie ein Partikel durch das Grundpotential bewegen (Abbildungen 6 und 7). Dabei brauchen sie, einmal entstanden, fast keine weitere Energie, sind aber sehr stabil. Die Länge  $L$  des Solitons erstreckt sich über mehrere Mulden und Peaks des Grundpotentials, sie ist aber unabhängig von der Gesamtlänge der Kette. Sie hängt nur von den Parametern der FK-Kette ab, d.h. von den Perioden der Potentiale und von den Größen  $V_0$  und  $k$ , der Skalierung der Potentiale. Bei einer ‚Wanderung‘ der Struktur durch die Kette werden an der Front immer neue Atome angehoben, später über den nächsten Potentialberg des Grundpotentials bewegt, und noch später wieder in einer weitergerückten Potentialmulde des Grundpotentials abgelegt. Die Struktur des Solitons aber bleibt bestehen. Der Begriff ‚Soliton‘ wurde von Peyrard und Kruskal (vgl. 1984) vorgeschlagen. Er gab später einem gesamten Forschungsgebiet einen Namen.

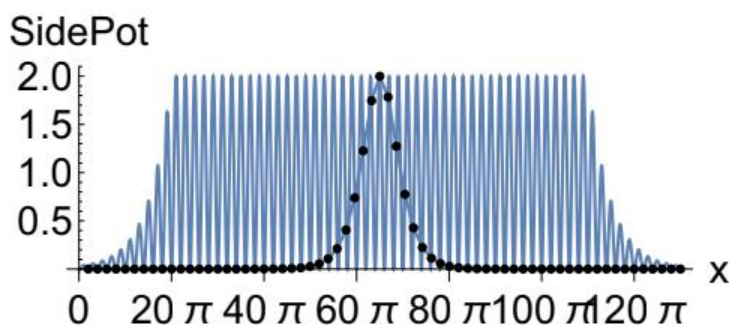


Abb. 6: Ein Soliton wandert durch das Potential einer langen Kette (vgl. Quapp et al. 2020).

### 3.1 Momentanaufnahmen eines Solitons

In Abbildung 7 haben wir eine 10-atomige Kette mit  $a_0 = a_s$  verwendet. Von links aus ist ein Stoß ausgeübt worden, der zum ersten SP<sub>1</sub> links führt, dem ersten Bild links oben. Dazu muss eine beträchtliche Energie eingesetzt werden. Danach kann die Struktur zu einem internen Minimum nach rechts relaxieren. Man beachte, dass insbesondere die Zwischenminima stationäre, also stabile Zustände der FK-Kette sind. Ist der erste SP<sub>1</sub> aber einmal erreicht, kann ein Soliton, die gestauchte Struktur also, durch die 10-atomige Kette wandern, bis sie am Ende ein Tal des Grundpotentials weiter wieder entspannen kann. Eine kleine Energiebarriere zwischen den Sattelpunkten und den Zwischenminima ist noch vorhanden. Sie heißt Peierls-Nabarro-Potential (vgl. Peyrard/Kruskal 1984).

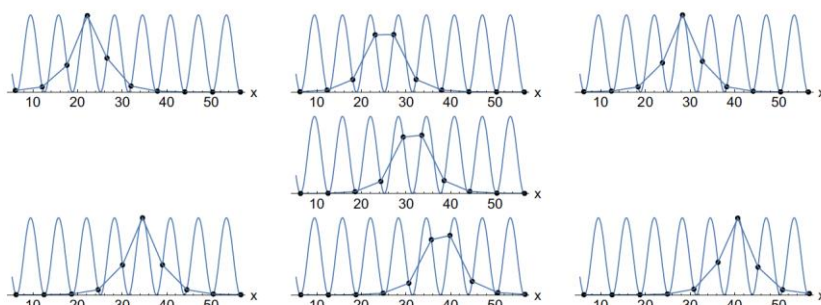


Abb. 7: Ein Soliton wandert durch das Potential einer 10-atomigen Kette mit  $a_0 = a_s$ .

### 3.2 Solitonenformel

Frenkel<sup>4</sup> und Kontorova erkannten 1938, dass das Modell die Möglichkeit von Solitonen enthält. Es gebe schon eine Versetzung (so wurde ein Soliton damals genannt). Für  $a_0 = a_s = a$  ist die Verschiebung  $q_n$  des n-ten Atoms  $x_n$

$$q_n(t) = \frac{2a}{\pi} \arctan \left[ e^{\pm \frac{2\pi}{L} (\pm vt - na)} \right].$$

$L$  = Länge der Versetzung (des Solitons),  
 $v$  = Geschwindigkeit, mit der sie wandert,  
 $\pm$  zeigt Richtung: Versetzung wandert nach rechts oder links.

Mit  $a = 1, L = 5, v = 1, n = 1$  ist das Bild für das Verhalten des ersten Atoms in Abbildung 8 gegeben.

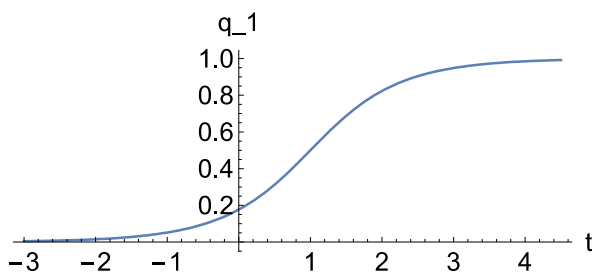


Abb. 8: Graph eines Solitons im Atom No.1.

$q_1$  von  $x_1$  wandert von seiner Potentialmulde aus von seinem Minimum  $x_1$  mit  $q_1 = 0$  zum nächsten im Abstand  $a = 1$ , also am Punkt  $x_1 + 1$  mit  $q_1 = 1$ , ein Tal weiter. Dabei überwindet es das Maximum des Grundpotentials in der ‚Mitte‘ des gezeichneten Kurvenzweiges, über

der Nummer 1 des ersten Atoms. Diese Energieverhältnisse sind in der Beschreibung seines Weges nicht erkennbar, aber man kann sie in Abbildung 7 nachvollziehen. Für weitere Atome  $x_i$  mit  $i > 1$  ist die Kurve entsprechend verschoben.

### 3.3 Erstes Fazit

- Ohne dass wir dynamische Gleichungen betrachtet haben, können wir durch die Betrachtung der stationären Zustände des FK-Potentials die Vorstellung eines Solitons entwickeln (vgl. Gou 1995; Heyerhoff 1997; Filippov 2010).
- Nach einer gedachten Anregung in einen hochgelegenen intermediären Zustand bildet die FK-Kette Solitonen, die man sich auch wandernd vorstellen kann. Die Bewegung wird aber durch die Peierls-Nabarro-Barriere gebremst.

## 4 Anregungen

Wir stellen uns einen weiteren Kraftvektor  $\mathbf{f}=F(f_1, \dots, f_N)^T$  der Länge  $F$  vor, wobei die  $N$  Komponenten  $f_1, \dots, f_N$  festgehalten seien. Die Kraft wirke pro Komponente auf je ein Atom der Kette. Die einfachste Form für eine derartige Kraft ist ein linearer Ansatz mit dem Skalarprodukt aus Kraftvektor  $\mathbf{f}$  und Vektor  $\mathbf{x}$  der Kette. Das ergibt ein neues ‚effektives‘ Potential

$$U_{eff}(\mathbf{x}) = U(\mathbf{x}) - \mathbf{f}^T \mathbf{x} \quad (2)$$

mit dem ursprünglichen FK-Potential  $U(\mathbf{x})$ . Dessen Minimum ist gegeben durch

$$\mathbf{0} = \nabla_{\mathbf{x}} U_{eff}(\mathbf{x}) = grad U(\mathbf{x}) - \mathbf{f} \quad (3)$$

Kurven, bei denen der Gradient immer in Richtung  $\mathbf{f}$  zeigt, bei wachsender Stärke  $F$  der Kraft, nennt man Newtontrajektorien (NT), mit den wichtigen einführenden Arbeiten (vgl. Quapp et al. 1998 a,b). NT wurden seit 25 Jahren in Leipzig untersucht. Sie wurden für die theoretische Chemie vorgeschlagen, sowohl als Methode zur SP-Suche, als auch als Modell für chemische Reaktionswege selbst. Eine spezielle Anwendung ist die Mechanochemie, wobei chemische Reaktionen durch eine äußere Kraft induziert werden (vgl. Quapp et al. 2017, 2018). NT wurden von uns auch auf das FK-Modell angewendet (vgl. Quapp/Bofill 2018). Zu jeder vorgegebenen, fixierten Richtung ( $f_1, \dots, f_N$ ) gibt es eine Newtontrajektorie. Die besondere Eigenschaft dieser Kurven ist, dass sie stationäre Punkte von einer Indextdifferenz von 1 verbinden (vgl. Hirsch/ Quapp 2004), zum Beispiel verbinden sie Minima mit Index 0 mit Sattelpunkten vom Index 1. In Abbildung 5 wurde bereits im globalen Minimum einer 5-Kette gestartet. Eine Newton-Trajektorie hat alle 5 niedrig liegenden stationären Punkte verbunden. Dargestellt ist dabei das Profil über der NT auf der Potential-Energie-Fläche (PES). Der Aufwand der Kraft  $F$  wächst dabei von 0 im Minimum bis zu einem ‚barrier breaking point‘ (BBP), einem Punkt bei dem auf dem effektiven Potential  $U_{eff}$  die Barriere verschwindet (vgl. Bofill et al. 2017). Danach fällt die Länge des Kraftvektors  $F$  wieder zu Null im SP. Danach geht das gleiche Spiel weiter beim Weg zum Zwischenminimum. Abseits dieses gezeigten Weges gibt es SP mit höherem Index und höherer Energie. Diese sind aber im Allgemeinen nicht von physikalischem Interesse.



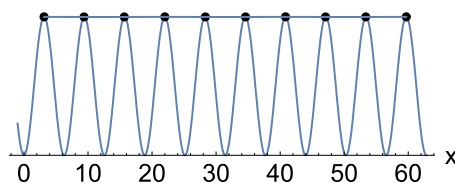


Abb. 9: Ein maximaler Sattelpunkt einer 10-atomigen Kette für  $a_0 = a_s$ .

Mit der vorhandenen Theorie der Newton Trajektorien können wir verfolgen, wie sich Anregungen durch die FK-Kette fortpflanzen, wenn ein Kraftvektor gegeben ist und seine Stärke stetig verändert wird.

Eine Anregung, die alle Atome gleichzeitig und gleichmäßig anschiebt, wie  $f=F(1, 1, \dots, 1)$ , ist vom Kraftaufwand her ungünstig, weil alle Atome gleichzeitig ihren Potentialberg hinauf geschoben werden, vergleiche Abbildung 9. Eine Solitonenstruktur dagegen braucht viel weniger Energie. Wenn die Kraft nur auf die linke Seite der Kette zielt und in die Kette hineinwirkt, wie  $f=F(1, 0, \dots, 0)$ , werden wir eine gestauchte Struktur erhalten, genannt Antikink. Im Gegenteil wird eine rechts angreifende Kraft, die aus der Kette herauszieht,  $f=F(0, \dots, 0, 1)$ , eine gestreckte Kette erzeugen, genannt Kink (Abbildung 10). Links in Abbildung 10 sind 5 Atome auf 4 Täler verteilt, rechts sind 5 Atome auf 6 Täler gestreckt (vgl. Quapp/Bofill 2019c). Sowohl Kink als auch Antikink sind Solitonen. Z.B. könnte sich die gestreckte Struktur nach rechts als Soliton bewegen, oder die gestauchte Struktur nach links, wenn die Kette viel länger als  $N=10$  wäre. Bewegen sich aber beide Strukturen aufeinander zu, dann heben sie sich auf.

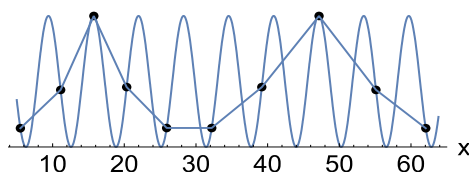


Abb. 10: Ein Antikink und ein Kink in einer 10-er Kette für  $a_0 = a_s$ .

## 5 Anwendungen des FK-Modells

### a. Versetzungen in Kristallen

Das Problem der Versetzungen im Gitter von Kristallen und ihrer möglichen ‚Wanderungen‘ war der Ausgangspunkt für dieses Modell. Kontorova und Frenkel‘ hatten 1938 den Versuch unternommen, Versetzungen zu behandeln (vgl. Kontorova/Frenkel 1938, 1939). Dieses Studium wurde fortgesetzt von Frank und van der Merwe (vgl. 1949 a, b), sowie Kochendörfer und Seeger (vgl. 1950). Die Dynamik von Leerstellen in einer polymeren Kristallkette wurde von Zubova behandelt (vgl. 2001).

### b. Gleitprozesse zwischen Oberflächen

Braun und Kivshar (vgl. 2004, Kapitel 5; 1998), behandeln ausführlich diese Anwendung des FK-Modells. Ein Kink gleitet dabei auf dem Grundpotential welches geformt wird durch die Kristallfläche oder die nächsten Metallatome. Das Substrat dient daneben auch dem Energieaustausch. Es spielt die Rolle eines Thermostaten. Gangloff et al. (vgl. 2015; 2020) behandeln ebenfalls Kinks für die Untersuchung von Nanofriction. Sie verwenden dazu eine zusätzliche erzwungene Bewegung. Experimentell beobachten sie diese Vorgänge auf atomarer Ebene. Quapp und Bofill (vgl. 2019 a,c) schlagen das FK-Modell ebenfalls zur Betrachtung

von Gleitprozessen vor. Unter Verwendung von NT berechnen sie für eine Kette mittlerer Länge die Sattelpunkte für einen Gleitprozess.

### c. Verschiebung eines Wignerkrystals

In den Arbeiten der Experimentatoren um Jui Yin Lin (vgl. 2018; 2019) wurde ein System von Elektronen auf einer Oberfläche von suprakalten Heliumatomen beobachtet. Man hatte dazu einen sehr schmalen Streifen ausgeätzt, in dem die Heliumatome ruhten, und darauf sozusagen eine eindimensionale Kette von Elektronen platziert. Diese drücken jeweils Mulden in die Oberfläche, und sie stoßen sich selbst mit Coulombkraft ab. Fixiert man noch die Ränder der Kette, so kann man mit gutem Willen die Kette der Elektronen als Frenkel-Kontorova-Modell auffassen. Im Experiment hatte man die Kette durch eine Kraft verschoben, und dabei beobachtet, dass man annähernd eine gleiche Kraft für sehr verschieden lange Ketten benötigt. Wir schlagen vor, dieses Experiment durch Annahme der Bildung eines Solitons zu verstehen (vgl. Quapp et al. 2020).

### d. Wellen in Feldern von Josephson Junctions

Ein Josephson Junction ist ein quantenmechanisches Schaltelement welches aus zwei supraleitenden Elektroden aufgebaut ist, die durch eine isolierende Barriere getrennt sind. Die Phasendifferenz zwischen den Schichten bestimmt das Verhalten dieser Elemente. Mehrere derartige Elemente kann man zu Ketten zusammenschalten, und sogar einen Kreis daraus bilden, in dem die Randwerte dann periodisch werden. Ustinov betrachtet Phasendifferenzen in Josephson-Junction Arrays als Solitonen (vgl. Ustinov 1998; Mazo/Ustinov 2014). Quapp und Bofill führen die Betrachtung des FK-Modells für Ketten von Josephson Junctions weiter (vgl. 2021c). Von besonderem Interesse sind dabei Shapiro-Sprünge in diesen Feldern (vgl. Shapiro 1963). Sie repräsentieren einen dissipativ getriebenen Quanteneffekt. Larsen et al. beobachteten den Effekt in graphenbasierten Josephson Junctions (vgl. 2020)

Quapp und Bofill (vgl. 2021 a,b) berechneten Lyapunov-Exponenten für die Langevin-Gleichung der entsprechenden FK-Kette. Es ergab sich die skurrile Situation von gegenläufigen Lyapunov-Exponenten je nach der Art der Randwerte der FK-Kette.

### e. Fortpflanzung einer Austenit-Martensit Phasengrenze

Austenit ist die kubisch-flächenzentrierte Modifikation (Phase) des Eisens. Die austenitische Phase kommt zwischen den Temperaturen 1392°C und 911°C als  $\gamma$ -Eisen vor. Martensit ist ein metastabiles Gefüge in Metallen, Legierungen und auch Nichtmetallen, das diffusionslos und athermisch durch eine kooperative Scherbewegung aus dem Ausgangsgefüge entsteht (vgl. Otsuka et al. 2011). Dabei muss das Material von der Temperatur einer Hochtemperaturphase (bei Stahl: Austenit) unter die Gleichgewichtstemperatur zu einer Niedertemperaturphase (bei Stahl:  $\alpha$ -Phase, Ferrit) abgekühlt werden. Insbesondere sind hier Legierungen mit Formgedächtnis von Interesse, wie Nickel-Titan Legierungen. Letztere Stoffe zeigen diese interessierenden Eigenschaften schon bei Umgebungstemperatur (vgl. Xing et al. 2005; Ko et al. 2017; Plummer et al. 2022). Quapp und Bofill betrachteten dazu ein bezüglich des Grundpotentials verallgemeinertes FK-Problem. Die Phasengrenze wurde auf eine Schicht reduziert, und eine Art Soliton für den Phasenübergang berechnet (vgl. Quapp/Bofill 2022d). Mit einer Langevin-Lösung wurde dieser Übergang unter einer geringen externen Kraft simuliert.

## f. Wellen in DNA-Molekülen und Proteinen

Wenn sich Bereiche der inneren Brücken im DNA-Molekül auf einem kurzen Stück des Stranges öffnen, so kann diese Struktur wie eine Welle durch das Molekül wandern (vgl. Englander et al. 1980; Yomosa 1983). Den Vorgang kann man versuchen durch ein FK-Modell zu beschreiben (vgl. Kulic/Schiessel 2003). Auch das Wandern von Schleifen in gewissen Proteinen kann man versuchen, mit einem FK-Modell zu erklären (vgl. Sieradzan et al. 2014; Clopes et al. 2021).

## 6 Grenzprozesse

### g. Grenzübergang zum Kontinuum

Wir wollen noch zwei Grenzprozesse für das FK-Modell untersuchen. Zum einen den Grenzübergang vom Diskreten des FK-Modells zur kontinuierlichen Saite, von der Kette von Oszillatoren zu einer schwingenden Saite. Diese bewegt sich gemäß der Sinus-Gordon-Gleichung, einer bekannten Solitongleichung (vgl. Barone et al. 1971; Scott et al. 1973; Mazo/Ustinov 2014; Malomed 2022)

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \sin \phi ,$$

Zum Kontinuum-Limit: Eine Kette bestehe aus N Atomen. Um den Gradienten für eine dynamische Betrachtung nach Schema 1 zu erhalten, muss man die Energieformel nach allen N Variablen  $x_i$  ableiten. Das Potential der FK-Kette war vorn gegeben

$$U(\mathbf{x}) = V_o \sum_{i=1}^N (1 - \cos(\frac{2\pi}{a_s} x_i)) + \frac{k}{2} \sum_{i=1}^{N-1} (x_{i+1} - x_i - a_o)^2 .$$

Für ein einzelnes Teilchen  $x_i$  haben wir den Potentialbeitrag

$$V_o (1 - \cos(\frac{2\pi}{a_s} x_i)) + \frac{k}{2} (x_i - x_{i-1} - a_o)^2 + \frac{k}{2} (x_{i+1} - x_i - a_o)^2 .$$

Da jedes innere Teilchen einen Vorgänger und einen Nachfolger hat, kommt es im Teil des Federpotentials zweimal vor. Wir erhalten als Kraft, welche auf das  $i$ -te Atom wirkt

$$\frac{\partial U(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \tilde{V}_o \sin(\frac{2\pi}{a_s} x_i) - k (x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) . \quad (4)$$

Der erste Teil der Formel ist die Ableitung der Cosinus-Summanden, mit  $\tilde{V}_o = V_o \frac{2\pi}{a_s}$ , während der zweite Teil entsteht, da immer Kombinationen von zwei Atomen in der Federformel stehen. Den Gradienten setzen wir in eine Newtonsche Bewegungsgleichung von Schema 1 ein. Mit Gleichung (4) erhält man die diskrete Sinus-Gordon Gleichung, die auch als Synonym für das FK-Modell verwendet wird (vgl. Mingaleev et al. 2000). Nun kann man die Anzahl der Atome auf einem Stück der Kette fester Länge erhöhen und schließlich zu einem Kontinuum übergehen. Aus dem zweifachen Differenzenteil des Gradienten des Potentials in Gleichung (4) wird dann eine zweifache Ableitung nach der Ortskoordinate  $\varphi$ . Wir betrachten dazu den Limes

$$N \rightarrow \infty \text{ und } x_i \rightarrow \phi(x), \text{ mit } x_{i-1} \rightarrow \phi(x - a_0), x_{i+1} \rightarrow \phi(x + a_0),$$

und unter  $a_0 \rightarrow 0$  muss man den Grenzwert für die ‚Federkonstante‘ fordern

$$k := 1/a_0^2 \rightarrow \infty.$$

Es ergibt sich mit einer zweifachen Differenzenformel

$$k(x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) = \frac{1}{a_0} \left( \frac{1}{a_0}(x_{i+1} - x_i) - \frac{1}{a_0}(x_i - x_{i-1}) \right) \rightarrow \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}.$$

Wenn man die Newtonsche Bewegungsgleichung ansetzt

$$\frac{d^2 \phi}{dt^2} = -\text{grad}(U)$$

so erhält man mit dem FK-Potential die Sinus-Gordon-Gleichung

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \sin \phi,$$

die Gleichung einer schwingenden Saite. (Die Konstante  $V_0$  ist weggelassen, und es ist  $a_s = 2\pi$  gesetzt.). Unter dem Grenzprozess verschwindet auch die ehemalige Peierls-Nabarro-Barriere. Eine Ein-Solitonlösung dieser Gleichung ist wieder von der Art, wie sie schon Frenkel und Kontorova gefunden hatten, das Knicksoliton (vgl. Abbildung 11)

$$\phi = \phi(x, t) = 4 \arctan \left( \exp \frac{x - x_0 - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \right), \quad |v| < 1.$$

$\phi(x, t)$  kann man sich vorstellen als den Winkel eines bei  $x_0$  befestigten Pendels. Nachdem die Welle durch den Punkt  $x_0$  gelaufen ist, steht das Pendel um  $2\pi$  weiter gedreht auf der gleichen Stelle.

Frenkel‘ und Kontorova kamen mit einem anderen Ansatz zu diesem Resultat.

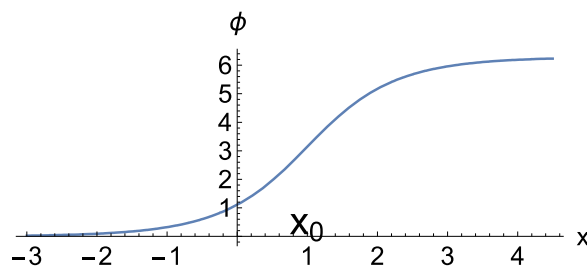


Abb. 11: Wellen Soliton der Sinus-Gordon-Gleichung mit  $x_0 = 1$ .

Weitere wichtige Gleichungen im zentralen Trio der Solitengleichungen sind die Korteweg-de-Vries-Gleichung (vgl. He/Meng 2016)

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = 6 \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3},$$

eine partielle Differentialgleichung dritter Ordnung. Sie beschreibt Solitonen, die in Wasserkanälen erstmals 1834 von John Scott Russell beobachtet wurden. Ebenso bedeutend ist auch die nichtlineare Schrödingergleichung (vgl. Pelap et al. 2011)

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \pm |\phi|^2 \phi = 0.$$

Beide Gleichungen sind mathematisch vielfältig untersucht. Beide erlauben Solitonenlösungen in Glockenform (vgl. Zabusky 1965; Zakharov/Shabat 1972).

## 7 Ein weiterer Grenzübergang

### h. Man verlängert die Kettenlänge bis unendlich

In den Arbeiten 1938 zum FK-Modell hatten Kontorova und Frenkel<sup>4</sup>  $a_o = a_s$  verwendet, also gleiche Perioden. Vorn haben wir gesehen, dass ein Soliton nur kurz ist. Um sich nicht mit Randwerten der Kette abgeben zu müssen, hatten Kontorova und Frenkel<sup>4</sup> eine unendlich lange Kette betrachtet (vgl. 1938 a). Für den Grundzustand der FK-Kette ist die Energie bei  $a_o = a_s$  Null, unabhängig davon wie lang die Kette ist.

#### Aber in der Realität ist $a_o = a_s$ selten!

Wir hatten in Abschnitt 2.2 gesehen, dass bei nicht gleichen  $a_o, a_s$  i.a. nicht alle Atome am Grund der Potentialmulde sitzen können. Folglich haben diese ausgelenkten Atome eine potentielle Energie, und da auch die Federn zwischen ihnen nicht immer in Nullauslenkung sind, muss auch hier Energie aufgewendet werden. Dies betrifft bei einer hypothetisch unendlich langen Kette folglich unendlich viele Atome, also hätte eine derartige Kette unendliche Energie, eine physikalische Unmöglichkeit.

#### Unendliche Ketten mit verschiedener Periodizität zu betrachten ist folglich nicht sinnvoll!

Was bei gleicher Periodizität bei Frenkel<sup>4</sup> und Kontorova nur eine Vereinfachung der Betrachtung war, wird im allgemeinen Fall bei verschiedener, nicht zusammenpassender Periodizität bei vielen Anwendern zu einem unsinnigen Fehler.

Warum betrachtet man dann überhaupt unendlich lange Ketten? Wir wollen den Grund erläutern.

Wir suchen Gleichgewichtszustände des Potentials. Mit Gleichung (4) ergibt das für Gradient gleich Null ein gekoppeltes System von Gleichungen

$$\frac{\partial U(\mathbf{x})}{\partial x_i} = \tilde{V}_o \sin\left(\frac{2\pi}{a_s} x_i\right) - k(x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) = 0 \quad (5)$$

für alle  $i$  in der Kette, nicht für jeweils die beiden Randatome. Die Gleichgewichtsformel enthält somit für Atome innerhalb der Kette nicht mehr den ursprünglichen Abstand  $a_o$ . Dieser steht aber in den beiden Randgleichungen für  $x_1, x_2$  und  $x_{N-1}, x_N$ . Das System ist ein gekoppeltes. Man kann nicht einfach einzelne Gleichungen auswerten, ohne auf die anderen Rücksicht zu nehmen. Das ist eine mathematische Trivialität.

### i. Die Faszination der ‚Twist‘-Transformation

Setzt man für ein Paar aufeinander folgender Teilchen

$$P_i = (x_i, x_{i-1})$$

so erhält man für die  $N$  gekoppelten Gleichungen ‚im Inneren‘ der Kette eine Transformation  $T$ , die sich von Gleichung zu Gleichung wiederholt. Mit Gleichung (5) wird

$$(x_{i+1}, x_i) = P_{i+1} = T P_i = (\tilde{V}_o \sin(\frac{2\pi}{a_s} x_i) - k(x_{i-1} - 2x_i), x_i) .$$

Da die Sinusfunktion periodisch ist, kann man noch alle Werte  $x_i$  modulo  $a_s$  betrachten, und man erhält für  $u_i = x_i \bmod(a_s)$  eine 2-dimensionale ‚Twist-Transformation‘, die sich immer wieder wiederholt. Man erhält etwa die Abbildung 12 der Resultate einer ‚Twist Map‘.

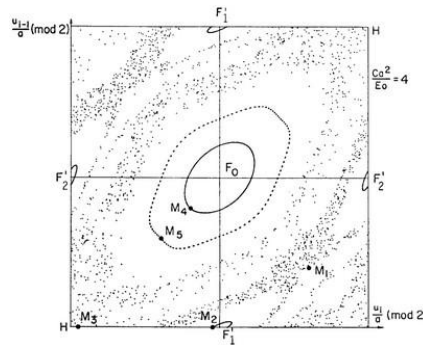


Abb. 12: Die Punkte sind wiederholte Abbildungen mit der Twist Map; die  $M_i$  sind willkürliche gewählte Startpunkte (vgl. Aubry 1978).

Da diese Transformation auch gebietserhaltend ist, hat man seit langem immer wieder auf sie zurückgegriffen, um Aussagen zum FK-Modell zu formulieren. Aber fast alle Aussagen dazu werden leider falsch, wenn man eine endliche Kette betrachtet (vgl. Quapp/Bofill 2022a).

### Wo liegt der Denkfehler?

Beim Anfang der Kette. Man kann nicht wissen, welche Gleichgewichtslage sich für die beiden ‚ersten‘ Atome einstellt, wenn man ein Minimum berechnet. Der vermeintliche Ausweg vieler Forscher war, den ‚Anfang‘ nach  $-\infty$  zu verlegen. Dort kann aber niemand mit der Rechnung beginnen. Also hat man irgendwo angefangen und angenommen, dass sich mit diesem Anfang später eine optimale Struktur ergibt. Wunschdenken!

Ein Beispiel für eine fehlerhafte Betrachtung ist ein ‚Theorem‘ von Baesens und MacKay (vgl. 1998), in dem die Existenz von Grenzzyklen in endlichen Ketten behauptet wird. Dies würde bedeuten, dass es eine Relation der Art gibt (bei z.B.  $3 a_o = 2 a_s$ )

$$u_{i+3} = u_i + 2 a_s .$$

Bei einer Kette von endlicher Länge (vgl. Quapp/Bofill 2022 a) gilt aber immer

$$u_{i+3} = u_i + 2 a_s + \epsilon_i$$

mit einem von Teilchen zu Teilchen sich änderndem Wert von  $\epsilon_i$ . Bei  $N = 500$  haben wir das kleinste  $\epsilon_i$  mit  $\epsilon_{244} \sim 2 \cdot 10^{-11}$  gefunden (vgl. Quapp/Bofill 2022a). Die freien Randwerte am Anfang und am Ende der Kette zerstören einen festen Zyklus.

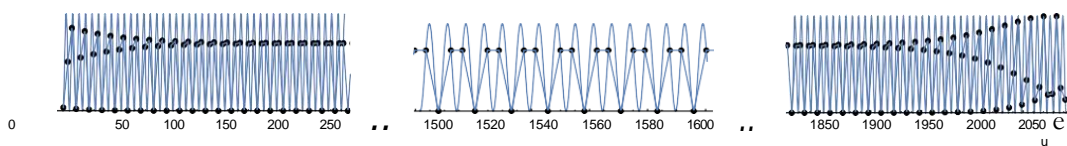


Abb. 13: Ein linkes Stück, ein Mittelstück und ein rechtes Stück einer Kette mit 500 Atomen.

Am linken Rand der Kette ist der Einfluss der freien Randwerte deutlich zu erkennen. In der Mitte hat sich ein quasi-Zyklus eingestellt. Natürlich sind die  $\epsilon$ -Differenzen kleiner als  $10^{-2}$  in der graphischen Darstellung nicht aufzulösen. Würde sich hier aber ein echter Grenzzyklus ergeben, dann könnten am rechten Rand nicht wieder Randwerte auftreten, die aus dem Zyklus ausbrechen. Dies haben wir mit der Twist Map nachgerechnet. Die Struktur von Abbildung 13 wurde optimiert, und mit den so erhaltenen ‚richtigen‘ Werten  $x_1$  und  $x_2$  für eine Minimumstruktur wurde die Twist Map gestartet. Es ergab sich in der Tat ein analoges Bild zu Abbildung 13. Auch die Twist Map findet bei richtigem Anfang den rechten ‚Ausgang‘ wieder.

## 8 Ausblick

Wir kritisieren seit Jahren derartig falsche Theorien, bisher allerdings mit mäßigem Erfolg (vgl. Quapp/Bofill 2019b; 2022 a, b, c). Der Entwurf eines entsprechenden Kommentars (vgl. Quapp/Bofill 2022c) wurde mit einer fadenscheinigen Begründung von Physical Review A nicht angenommen.

Die Quellen zur Twist Map beim FK-Modell sind bisher mehr als 1000-mal zitiert worden; soweit wir wissen nur mit kleinen Ergänzungen, nie wirklich negativ. Wir konnten noch nicht erkennen, dass betreffende Autoren nun unseren Standpunkt einnehmen.

Max Planck zufolge setzen sich neue Ideen in der Forschung nicht dadurch durch, dass die Anhänger der alten Vorstellungen überzeugt werden. Es ist vielmehr so, dass die Vertreter der alten Theorie ausscheiden müssen, um dem Neuen Platz zu machen.

Hier ist es allerdings kurioserweise umgedreht: Es genügen die sozusagen uralten Methoden zur Bestimmung stationärer Punkte, um sich auf den komplizierten Potential-Energie-Flächen des FK-Modells zurechtzufinden, ergänzt eventuell durch Anwendung der Newtontrajektorien. Der ‚falsche‘ Umweg über die Twist Map ist nicht nötig.

## Danksagung

Ein Dank geht an dieser Stelle an Rainer Schimming für zahlreiche Hinweise zum Vortrag und zu dieser Arbeit, an Gerhard Pfaff für umfangreiche redaktionelle Unterstützung und an Ekkehard Höxtermann für aufmunternde Kommentare sowie an das Spanish Ministerio de Economía y Competitividad, Project No. PID2019-109518GB-I00 und das Spanish Structures of Excellence Maria de Maeztu program, Grant MDM-2017-0767. Wolfgang Quapp dankt außerdem der Universität Leipzig für die gegebenen Arbeitsmöglichkeiten.

## Bibliographie

- Aubry, Serge (1978): *New Concept of Transitions by Breaking of Analyticity in a Crystallographic Model*, in: *Solitons and Condensed Matter Physics, Solid State Sciences 8*. Berlin: Springer.
- Baesens, C. / MacKey, Robert S. (1998): „Gradient dynamics of tilted Frenkel-Kontorova models“. *Nonlinearity* 11, 949–964.
- Barone, A. / Esposito, F. / Magee, C. / Scott, A. (1971): „Theory and applications of the sine-Gordon equation“. *Rivista del Nuovo Cimento* 1, 227–267.
- Basu, Thakur R. / English, L. Q. / Sievers, A. J. (2008): „Driven intrinsic localized modes in a coupled pendulum array“. *Journal of Physics D: Appl. Phys.* 41, 015503.

- Bofill, Josep Maria / Ribas-Arino, Jordi / Garcia, S. P. / Quapp, Wolfgang (2017): „An algorithm to locate optimal bond breaking points on a potential energy surface“. *Journal of Chemical Physics* 147, 152710.
- Braun, Oleg M. / Kivshar, Yury S. (1998): „Nonlinear dynamics of the Frenkel-Kontorova model“. *Physics Reports* 306, 1–108.
- Braun, Oleg M. / Kivshar, Yury S. (2004): *The Frenkel-Kontorova model, concepts, methods, and applications*. Berlin: Springer.
- Clopes, Judit / Shin, Jaeoh / Jahnel, Marcus, Grill, Stephen W. / Zaburdaev, Vasil (2021): „Thermal fluctuations assist mechanical signal propagation in coiled-coil proteins“. *Physical Review E* 104, 054403.
- De La Llave, Rafael / Valdinoci, Enrico (2007): „Ground states and critical points for generalized Frenkel-Kontorova models in  $Z^d$ “. *Nonlinearity* 20, 2409–2424.
- Do, L., / Pucejdl, K. / Hurak, Z. (2022). „Experimental platform for boundary control of mechanical Frenkel-Kontorova model“. *IEEE 61st Conference on Decision and Control (CDC)*, 7618–7623.
- Englander, S. W. / Kallenbach, N. R. / Heeger, A. J. / Krumhansl, J. A. / Litwint, S. (1980): „Nature of the open state in long polynucleotide double helices: Possibility of soliton excitations“. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA* 77, 7222–7226.
- Filippov, A. T. (2010): *The Versatile Soliton, Kap.6: Frenkel's Soliton*. Boston: Birkhäuser, Springer.
- Frank, F. C. / van der Merwe, J. H. (1949a): „One-dimensional dislocations. I. Static theory“. *Proceedings of the Royal Society of London. Ser. A* 198, 205–216.
- Frank, F. C. / van der Merwe, J. H. (1949b): „One-dimensional dislocations. II. Misfitting monolayers and oriented overgrowth“. *Proceedings of the Royal Society of London. Ser. A* 198, 216–225.
- Frenkel, Jakob (1926,1928): *Lehrbuch der Elektrodynamik I, II*. Berlin: Julius Springer.
- Frenkel, Jakob (1929): *Einführung in die Wellenmechanik*. Berlin: Julius Springer.
- Frenkel, Jakob (1932): *Wave Mechanics: Elementary Theory*. Oxford: Clarendon Press.
- Frenkel, Jakob (1934; 1950): *Wave Mechanics - Advanced General Theory*. Oxford: Clarendon Press; Dover Publications, Inc.
- Frenkel, Jakob (1946): *Kinetic Theory of Liquids*. Oxford: Clarendon Press.
- Frenkel, Jakob (1957a): *Statistische Physik*. Berlin: Akademie Verlag.
- Frenkel, Jakob I. (1957b): *Prinzipien der Theorie der Atomkerne*. Berlin: Akademie Verlag.
- Frenkel, Viktor J. (1996): *Yakov Ilich Frenkel. His Work, Life and Letters*. Basel: Birkhäuser.
- Frenkel, Jakob I. / Kontorova, Tatjana A. (1938): „To the theory of plastic deformations and twinings“. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* 13, 1.
- Frenkel, Jakob I. / Kontorova, Tatjana A. (1939): „To the theory of plastic deformations and twinings“. *Fizicheski Zhurnal (Moscow)* 1, 137.
- Gangloff, Dorian A. / Bylinskii, Alexei / Counts, Ian / Jhe, Wonho / Vuletic, Vladan (2015): „Velocity tuning of friction with two trapped atoms“. *Nature Physics* 11, 915 – 919.
- Gangloff, Dorian A. / Bylinskii, Alexei / Vladan Vuletic, Vladan (2020): „Kinks and nanofriction: Structural phases in few-atom chains“. *Physical Review Research* 2, 013380.
- Guo, Boling (1995): *Soliton Theory and Modern Physics*, in *Soliton Theory and Its Applications*, Chapter 1, pp. 1–68. Springer, Zhejiang Sci.
- He, Bin / Meng, Qing (2016): „Three kinds of periodic wave solutions and their limit forms for a modified KdV-type equation“. *Nonlinear Dynamics* 86, 811–822.
- Heyerhoff, Markus (1997): *Die frühe Geschichte der Solitentheorie*, Dissertation. Universität Greifswald.



- Hirsch, Michael / Quapp, Wolfgang (2004): „Reaction Channels of the Potential Energy Surface: Application of Newton Trajectories“. *Journal Molecular Structure, THEOCHEM* 683 (1-3), 1–13.
- Ko, Won-Seok / Maisel, Sascha B. / Grabowski, Blazej / Jeon, Jong B. / Neugebauer Jorg (2017): „Atomic scale processes of phase transformations in nanocrystalline NiTi shape-memory alloys“. *Acta Materialia* 123, 90–101.
- Kochendörfer, A. / Seeger A. (1950): „Theorie der Versetzungen in eindimensionalen Atomreihen. I. Periodisch angeordnete Versetzungen“. *Zeitschrift für Physik* 127, 533–550.
- Kontorova, Tatjana A. / Frenkel, Jakov. I. (1938a): „Zur Theorie der plastischen Deformationen und Versetzungen I“ (russisch). *Zhurnal Eksp. Teor. Fis.* 8, 89–95.
- Kontorova, Tatjana A. / Frenkel, Jakov. I. (1938b): „Zur Theorie der plastischen Deformationen und Versetzungen II“ (russisch). *Zhurnal Eksp. Teor. Fis.* 8, 1340–1348.
- Kontorova, Tatjana A. / Frenkel, Jakov. I. (1938c): „Zur Theorie der plastischen Deformationen und Versetzungen III“ (russisch). *Zhurnal Eksp. Teor. Fis.* 8, 1349–1359.
- Kulic, I. M. / Schiessel H. (2003): „Chromatin dynamics: Nucleosomes go mobile through twist defects“. *Physical Review Letter* 91, 148103.
- Larson, Trevyn F. Q. / Zhao, Lingfei / Arnault, Ethan G. / Wei, Ming-Tso / Seredinski, Andrew / Li, Henming / Watanabe, Kenji / Taniguchi, Takashi / Amet, Francois / Finkelstein, Gleb (2020): „Zero crossing steps and anomalous Shapiro maps in graphene Josephson junctions“. *Nano Letters* 20, 6998-7003.
- Lin, Jui Yin / Smorodin, A. V. / Badrutdinov, A. O. / Konstantinov, D. (2018): „Sliding of an electron crystal of finite size on the surface of superfluid 4He confined in a microchannel“. *Physical Review B* 98, 085412.
- Lin, Jui Yin / Smorodin, A. V. / Badrutdinov, A. O. / Konstantinov, D. (2019): „Transport properties of a quasi-1d Wigner solid on liquid helium confined in a microchannel with periodic potential“. *Journal Low Temperatur Physics* 195, 289–299.
- Malomed, B. A. (2022): Soliton models: „Traditional and novel, one- and multidimensional“. *Low Temperatur Physics* 48, 856.
- Mazo, Juan J. / Ustinov, Alexey V. (2014): *The sine-Gordon Equation in Josephson-Junction Arrays*, Chapter 10, pp. 155–175. Springer International Publishing Switzerland.
- Milchev, Andrey (1990): „Solitary waves in a Frenkel-Kontorova model with non-convex interactions“. *Physica D* 41, 262–274.
- Mingaleev, Serge F. / Gaididei, Yuri B. / Majernikova, Eva / Shpyrko, Serge (2000): „Kinks in the discrete sine-Gordon model with Kac-Baker long-range interactions“. *Physical Review E* 61, 4455–5561.
- Mounouna, Felix G. / Wamba, Etienne / Nguetcho, Aurelien S. T./ Bhat, Ishfaq A. / Bilbault, Jean M. (2022): „Modulational stability brought by cubic-quartic interactions of the nearest-neighbor in FK model subjected in a parametrized on-site potential“. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation* 105, 106008.
- Otsuka, Kazuhiro / Saxena, Avadh / Deng, Junkai / Ren, Xiaobing (2011): „Mechanism of the shape memory effect in martensitic alloys: an assessment“. *Philosophical Magazine* 91, 4514–4535.
- Pelap, F. B. / Kamga, J. H. / Yamgoue, S. B. / Ngounou, S. M. / Ndecfo1, J. E. (2015): „Dynamics and properties of waves in a modified noguchi electrical transmission line“. *Physical Review E* 91, 022925.
- Pelap, F. B., Tatsinkou, I. / Fomethé, A. (2011): „Nonlinear excitations in a continuous bi-inductance electrical line“. *Physica Scripta* 83, 045009.
- Peyrard, Michael / Kruskal, M. D. (1984): „Kink dynamics in the highly discrete sine-Gordon system“. *Physica D* 14, 88–102.

- Plummer, Gabriel / Mendeleev, Mikhail I. / Lawson, John W. (2022): „Molecular dynamics simulations of austenite-martensite interface migration in NiTi alloy“. *Physical Review Mat.* 6, 123601.
- Quapp, Wolfgang (2023): Vortrag: „Das Frenkel-Kontorova Modell, Eine unendliche Geschichte“. [www.math.uni-leipzig.de/MI/quapp/LS23FKmodelFebr.pdf](http://www.math.uni-leipzig.de/MI/quapp/LS23FKmodelFebr.pdf), Leibniz-Sozietät, Berlin.
- Quapp, Wolfgang / Bofill, Josep Maria (2019a): „A model for a driven Frenkel-Kontorova chain“. *European Physics Journal B* 92, 95–117.
- Quapp, Wolfgang / Bofill, Josep Maria (2019b): „Newton trajectories for the tilted Frenkel-Kontorova model“. *Molecular Physics* 117, 1541–1558.
- Quapp, Wolfgang / Bofill, Josep Maria (2019c): „Sliding paths for series of Frenkel-Kontorovamodels - a contribution to the concept of 1d-superlubricity“. *European Physics Journal B* 92, 193.
- Quapp, Wolfgang / Maria Bofill, Josep Maria (2021a): „Description of Shapiro steps on the potential energy surface of a Frenkel-Kontorova model Part I: chain in a box“. *European Physics Journal B* 94, 66.
- Quapp, Wolfgang / Bofill, Josep Maria (2021b): „Description of Shapiro steps on the potential energy surface of a Frenkel-Kontorova model Part II: free boundaries“. *European Physics Journal B* 94, 64.
- Quapp, Wolfgang / Bofill, Josep Maria (2021c): „Description of zero field steps on the potential energy surface of a Frenkel-Kontorova model for annular Josephson junction arrays“. *European Physics Journal B* 94, 105.
- Quapp, Wolfgang / Josep Maria Bofill, Josep Maria (2022a): „An analysis of some properties and of the use of the twist map for the finite Frenkel-Kontorova model“. *Electronics* 11, 3295.
- Quapp, Wolfgang / Josep Maria Bofill, Josep Maria (2022b): „Comment on ‘Out-of-equilibrium Frenkel-Kontorova model’“ (A. Imparato, 2021, J. Stat. Mech. 013214). *Journal of Statistical Mechanics* 2022, 013204.
- Quapp, Wolfgang / Bofill, Josep Maria (2022c): „Comment on realizing the Frenkel-Kontorova model with Rydberg-dressed atoms, by J. M. Muñoz et al, Physical Review A 102, 043308 (2020)“. [Physical Review A rejected] veröffentlicht als arXiv2210.070000, 1–5.
- Quapp, Wolfgang / Bofill, Josep Maria (2022d): „A generalized Frenkel-Kontorova model for a propagating Austenite-Martensite phase boundary - revisited numerically“. *European Physics Journal B* 95, 87.
- Quapp, Wolfgang / Bofill, Josep Maria / Ribas-Arino, Jordi (2017): „Analysis of the acting forces in a theory of catalysis and mechanochemistry“. *The Journal of Physical Chemistry A* 121, 2820–2838.
- Quapp, Wolfgang / Bofill, Josep Maria / Ribas-Arino, Jordi (2018): „Towards a theory of mechanochemistry, simple models from the very beginnings“. *International Journal of Quantum Chemistry* 118, e257755.
- Quapp, Wolfgang / Hirsch, Michael / Heidrich, Dietmar (1998): „Bifurcation of reaction pathways: the set of valley ridge inflection points of a simple three-dimensional potential energy surface“. *Theoretical Chemistry Accounts* 100 (5/6), 285–299.
- Quapp, Wolfgang / Hirsch, Michael / Imig, Olaf / Heidrich, Dietmar (1998): „Searching for saddle points of potential energy surfaces by following a reduced gradient“. *J. Comput. Chem.* 19, 1087–1100.

- Quapp, Wolfgang/ Lin, Jui Yin / Bofill, Josep Maria (2020): „The movement of a one-dimensional Wigner solid explained by a modified Frenkel-Kontorova model“. *European Physics Journal B* 93, 227.
- Scott, A. C. / Chu, F. Y. F. / McLaughlin, D. W. (1973): „The soliton: A new concept in applied science“. *Proceedings IEEE* 61, 1443–1483.
- Shapiro, S. (1963): „Josephson currents in superconducting tunneling: The effect of microwaves and other observations“. *Physical Review Lett.* 11, 80.
- Sieradzan, Adam K. / Niemi, Antti / Peng, Xubiao (2014): „Peierls-nabarro barrier and protein loop propagation“. *Physical Review E* 90, 062717.
- Ustinov, Alexey V. (1998): „Solitons in Josephson-junction arrays“. *Physica D* 123, 315–329.
- Vasileiadis, T. / Jeena Varghese, V. B. / Gomis-Bresco, J. / Urrios, D. N. / Graczykowski, B. (2021): „Progress and perspectives on phononic crystals“. *J. Appl. Phys.* 129, 160901.
- Xing, H. / Khantachawana, A. / Kim, H. Y. / Miyazaki, S. (2005): „Effect of Ni-content on shape memory behavior of Ti-rich Ti-Ni melt-spun ribbons“. *Material ScienceForum* 475-479, 1925–1928.
- Yomosa, S. (1983): „Soliton excitations in deoxyribonucleic acid (DNA) double helices“. *Physical Review A* 27, 2120–2125.
- Zabusky, N. J. / Kruskal, M. D. (1965): „Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states“. *Physical Review Lett.* 15, 240.
- Zakharov, V. E. / Shabat, A. B. (1972): „Exakte Theorie der zweidimensionalen Selbstfokussierung und eindimensionalen Selbstmodulation von Wellen in nichtlinearen Medien“. *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 34, 62.
- Zubova, E. A. (2001): „On the applicability of the Frenkel-Kontorova model to describing the dynamics of vacancies in a polymeric crystal chain“. *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 93, 895–902.

E-Mail-Adresse des Verfassers: quapp@uni-leipzig.de