

Das Frenkel-Kontorova Modell – Eine unendliche Geschichte –

Wolfgang Quapp Universität Leipzig

quapp@math.uni-leipzig.de www.math.uni-leipzig.de/~quapp/refs_wq.html

Klassensitzung der Leibniz Societät zu Berlin am 9.2.2023

Unter Mitwirkung von R.SCHIMMING (Potsdam)
und J.M.BOFILL (Barcelona)

Dank an: Spanish Ministerio de Economía y Competitividad, Project No.
PID2019-109518GB-I00, Spanish Structures of Excellence Maria de Maeztu
program, Grant MDM-2017-0767

Übersicht:

Grundbegriffe

Das FK Modell

Minima als Grundzustände, Übergänge über Sattelpunkte

Gleiche und verschiedene Periodizität

Eigenschaften von angeregten Zuständen: **Solitonen**

Wichtige Anwendungen – Beispiele, Bewegung

FK Modell und die schwingende Saite

∞ Kette, falsche Anwendung der Twist-Abbildung

Grundbegriffe

– Dynamisches System $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(\mathbf{x}, t)$

– Autonomes System $\frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(\mathbf{x})$

– Konservatives System $\frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = -grad U(\mathbf{x})$

– **Frenkel-Kontorova Modell**

mit eigenem Potential

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

Hier und heute sollen hauptsächlich stationäre Zustände des FK Potentials betrachtet werden.

Eingeführt wurde des Modell von
Yakov Il'itch FRENKEL (1894 - 1952)
Prof. für Theoretische Physik
Universität Leningrad



und Tatjana Abramovna KONTOROVA (1911 - 1976) Assistentin bei
Frenkel, Dissertation: Mechanik der plastischen Deformation von
Kristallen (1938), Arbeiten zu zwischenkristallinen Schichten,
Katalysatoren, Festkörperphysik, Halbleitern, Untersuchungen zu
Germanium.

Yakov Il'itch FRENKEL

* 10.2.1894 Rostov-am-Don

1913-1916 Studium Universität St. Petersburg, danach dort
wissenschaftlicher Mitarbeiter, später Professor

1921-1952 Physikalisch-Technisches Institut in Leningrad

Unterbrechungen: 1918-1921 Krim-Universität Simferopol

1925-1926 Deutschland

1930-1931 USA

1941-1944 Kasan

+ 23.1.1952 Leningrad

Universeller theoretischer Physiker, für Experiment und Technik
aufgeschlossen, Schwerpunkt kondensierte Materie – Festkörper,
Kristalle, Metalle, Flüssigkeiten

Hoch anerkannt national und international, überstand knapp
Kampagnen gegen 'Moderne Physik'

FRENKEL schrieb mehr als 250 Artikel und mehr als 30 Bücher, oft in vielen Auflagen

Übersetzte Bücher:

Lehrbuch der Elektrodynamik I, II, 1926, 1928

Einführung in die Wellenmechanik, 1929 (Gemeint ist Quantentheorie)

Wave Mechanics I, II, 1932, 1934

Statistical Physics, 1933

Kinetic Theory of Liquids, 1946

Prinzipien der Theorie der Atomkerne, 1957

Buch über ihn:

Yakov Ilitch Frenkel, His work, life and letters. Birkhäuser, 1996

Vom Wissenschaftshistoriker Viktor Ya. Frenkel, seinem Sohn.

Originalliteratur zum 'Frenkel-Kontorova-Modell'

– T. A. Kontorova, Ya. I. Frenkel, К теории пластических деформаций и двойникования, Ж. Эксп. Теор. Физ., Teil I, 1938, 8, 89-95, Teil II : 1340-1348, Teil III : 1349-1359 (russisch)

– Ya. I. Frenkel, T. A. Kontorova, On the theory of plastic deformations and twinings, Phys. Z. USSR, 1938, 13, 1-10 und Fiz. Zh. (Moscow), 1939, 1, 137-149

Nach dem 2. Weltkrieg in Deutschland durch Arbeiten von Kochendörfer und Seeger (Zeitschr. Phys. 127 (1950) 533) weitergeführt, in England von Frank und van der Merwe (Roy. Soc. A 198 (1949) 203-216), und vielen weiteren Autoren.

Das FK Modell beschreibt eine Kette von Partikeln die

1. untereinander durch Federkräfte verbunden sind, und die
2. durch ein weiteres Potential angezogen werden, das durch eine Cosinusfunktion beschrieben sei.

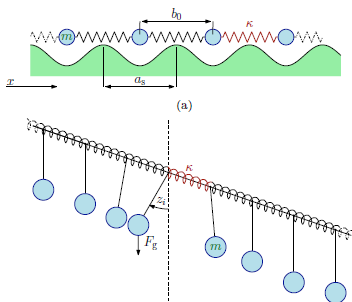


Abbildung nach Loi Do et al. ^(b) Pendel, die noch untereinander durch Federn gekoppelt sind, bilden ein spezielles FK Modell.

- Die ursprünglichen Abstände der Atome sind a_o
- Die 'Federkonstante' ist k
- Die Periode des Cosinus ist a_s

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

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

Die Randpunkte x_1 und x_N sind frei (im betrachteten Modell).

Vielfältige Verallgemeinerungen wurden schon diskutiert: Andere Funktionen für das Grundpotential, additiv höhere Potenzen in der Federformel, oder neben der bisherigen Nächster-Nachbar-Formel noch die Einbeziehung weitere Nachbaratome.

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

Die Energie für das Minimum der FK Kette ist Null.

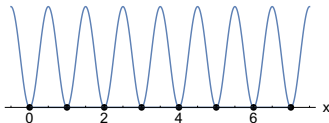


ABBILDUNG: FK Modell mit $N=8$ und $a_o = a_s$

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

Die Energie für das Minimum ist größer Null.

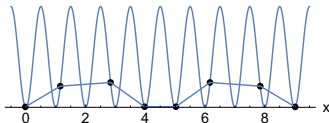


ABBILDUNG: Minimum des FK Modells, $N=8$, $a_o = 1.25 * a_s$ und $k = 10V_o$

Minima, Sattelpunkte und Zwischen-Minima

Für eine 5-atomige Kette mit $a_0 = 2/3 a_s$, die ebenfalls nicht in die Senken des Grundpotentials passt, ergeben sich die stationären Punkte

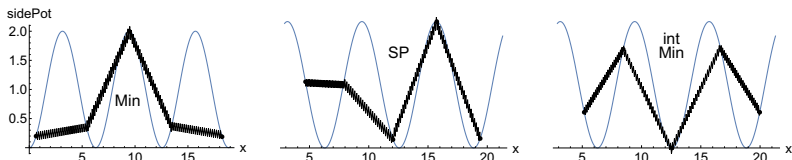
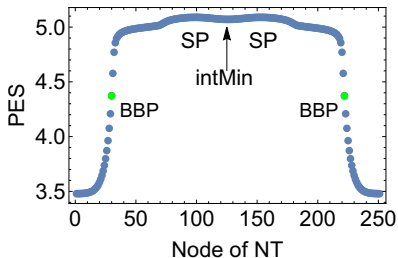


ABBILDUNG: Stationäre Punkte des FK Modells, $N=5$, $a_0 = 2/3 * a_s$ und $k = V_0$

5 Atome sind in 4 Senken eingebettet. Im Minimum sitzt ein Atom auf dem Gipfel des Grundpotentials. Der SP_1 hat eine viel höhere Energie als das globale Minimum, aber sein benachbartes intermediäres Minimum hat fast die gleiche Energie.

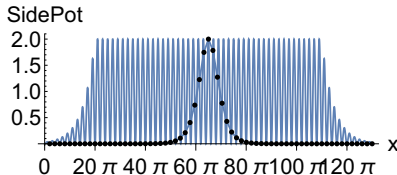


Energieprofil auf der 5-dimensionalen Potential-Energie-Fläche (PES) vom globalen Minimum, über SP_1 und Int-Min und einen dazu symmetrischen SP_1 zum nächsten globalen Minimum zeigt einen hochliegenden, fast flachen 'Gebirgsweg'.

(FK Modell, $N=5$, $a_0 = 2/3 * a_s$, $k = V_0$.)

SOLITONEN

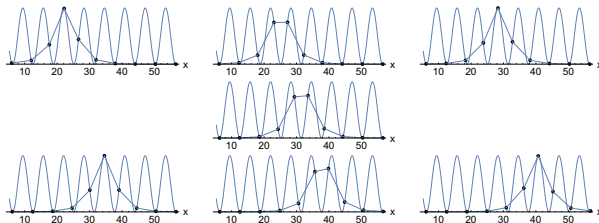
Die Beobachtung eines fast flachen 'Gebirgsweges' führt bei längeren Ketten zur Erscheinung von Solitonen: Strukturen, die sich ähnlich wie ein Partikel durch das Grundpotential bewegen. Dabei brauchen sie, einmal entstanden, fast keine weitere Energie, sind aber sehr stabil. Die Länge L des Solitons erstreckt sich über mehrere Mulden und Peaks des Grundpotentials, sie ist aber unabhängig von der Gesamtlänge der Kette.



Quapp, J.Y. Lin, Boffill (2020) The movement of a one-dimensional Wigner solid explained by a modified Frenkel-Kontorova model, *Europ.Phys.J.B* 93 (2020) 227'

Schnappschüsse eines Solitons:

Von links aus ist ein Stoß ausgeübt worden, der zum ersten SP links führt. Von da aus kann die gestauchte Struktur durch die 10-atomige Kette wandern, bis sie am Ende wieder entspannen kann.



Die kleine Energiebarriere zwischen Sattelpunkten und Zwischenminima heißt **Peierls-Nabarro**-Potential.

M. Peyrard, M.D. Kruskal, Kink dynamics in the highly discrete sine-Gordon system
Physica D 14, 88-102 (1984)

Solitonenformel

Frenkel und Kontorova erkannten 1938, dass das Modell die Möglichkeit von Solitonen enthält. Es gebe schon eine Versetzung, und für $a_o = a_s = a$ ist die Verschiebung q_n des n-ten Atoms x_n

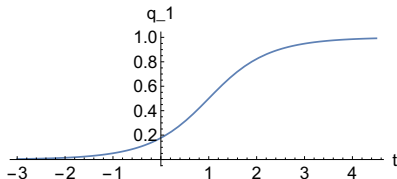
$$q_n(t) = \frac{2a}{\pi} \arctan \left[e^{\pm \frac{2\pi}{L} (\pm vt - na)} \right].$$

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



q_1 von x_1 wandert durch das Potential von seinem Minimum x_1 zum nächsten im Abstand $a = 1$, also $x_1 + 1$, ein Tal weiter.

Erste Zusammenfassung

Ohne dass wir dynamische Gleichungen betrachtet haben, können wir durch die Betrachtung der stationären Zustände des FK Potentials die Vorstellung eines Solitons entwickeln.

Nach einer gedachten Anregung in einen hochgelegenen intermediären Zustand bildet die FK Kette Solitonen, die man sich auch wandernd vorstellen kann.

Anregungen

Wir stellen uns einen weiteren Kraftvektor $\mathbf{f}=F(f_1, \dots, f_N)$ der Länge F vor, der pro Komponente auf je ein Atom der Kette wirkt. Das ergibt ein neues 'effektives' Potential

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

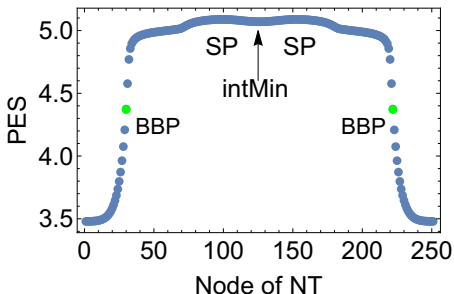
Dessen Minimum wird

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

mit dem Gradient des ursprünglichen Potentials des FK Modells. Kurven bei denen der Gradient immer in Richtung \mathbf{f} zeigt, nennt man Newtontrajektorien (NT), vergleiche

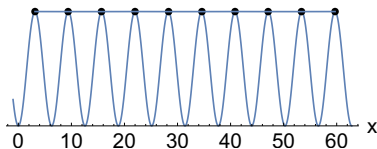
- Quapp, Hirsch, Imig, Heidrich: Searching for Saddle Points of Potential Energy Surfaces by Following a Reduced Gradient, *J.Comput.Chem.* 19 (1998) 1087-1100;
- Quapp, Bofill: Newton trajectories for the tilted Frenkel-Kontorova model, *Molec.Phys.* 117 (2019) 1541.

Zu jeder vorgegebenen Richtung (f_1, \dots, f_N) gibt es eine Newton-Trajektorie. Die besondere Eigenschaft dieser Kurven ist, dass sie stationäre Punkte von einer Indextdifferenz von 1 verbinden, d.h. zum Beispiel Minima mit Sattelpunkten vom Index 1.



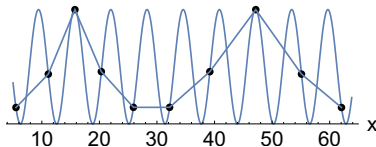
Im globalen Minimum einer 5-Kette wurde gestartet. Eine Newton-Trajektorie hat alle 5 stationären Punkte verbunden. Dargestellt ist das Profil auf der PES. Der Aufwand der Kraft F wächst dabei von 0 im Minimum bis zu einem 'barrier breaking point' (BBP), einem Punkt bei dem auf dem effektiven Potential U_{eff} die Barriere verschwindet.

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 $\mathbf{f}=F(1, 1, \dots, 1)$, ist vom Kraftaufwand her ungünstig, weil alle Atome gleichzeitig ihren Potentialberg hinaufgeschoben werden. Eine Solitonenstruktur dagegen braucht viel weniger Energie.



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

Wenn Die Kraft nur auf die linke Seite der Kette zieht und in die Kette hinein wirkt, wie $\mathbf{f}=F(1, 0, \dots, 0)$, werden wir eine gestauchte Struktur erhalten, genannt Antikink. Im Gegenteil wird eine rechts angreifende Kraft, die aus der Kette herauszieht, $\mathbf{f}=F(0, \dots, 0, 1)$, eine gestreckte Kette erzeugen, genannt Kink.



Ein Antikink und ein Kink gemeinsam in einer 10-er Kette für $a_0 = a_s$. Links sind 5 Atome auf 4 Täler verteilt, rechts auf 6 Täler.

– Quapp, Bofill: Sliding Paths for Series of Frenkel-Kontorova Models – A Contribution to the Concept of 1D-superlubricity, *Europ. Phys. J. B* 92 (2019) 193

Anwendungen des FK Modells

Versetzungen in Kristallen

- Kontorova, Frenkel 1938
- Kochendörfer, Seeger, Zeitschr.Phys.127 (1950) 533

Gleitprozesse zwischen Oberflächen

- Braun, Kivshar, Phys.Rep.306 (1998) 1
- Gangloff et al. Nat.Phys.11 (2015) 915
- Quapp, Bofill, Eur.J.Phys.B 92 (2019) 193

Verschiebung eines Wignerkristals

- J.Y.Lin et al. Phys.Rev B 98 (2018) 085412
- Quapp, Lin, Bofill, Eur.J.Phys.B 93 (2020) 227

Zum Beispiel wurde in der Arbeit der Experimentatoren um Jui Yin Lin in Phys.Rev B 98 (2018) 085412 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 stoßen sich selbst mit Coulombkraft ab. Mit gutem Willen kann man 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 schlugen vor, dieses Experiment durch Annahme der Bildung eines Solitons zu verstehen.

Anwendungen des FK Modells

Wellenbewegungen in Feldern von Josephson Junctions

- Ustinov, Physica D 123 (1998) 315
- Quapp, Bofill, Eur.Phys.J.B 94 (2021) 105

Shapiro-Sprünge in Feldern von Josephson Junctions

- Shapirov, Phys.Rev.Lett. 11 (1963) 80
- Quapp, Bofill, Eur.J.Phys.B 94 (2021) 64 und 66

Fortpflanzung einer Austenit-Martensit Phasengrenze

- Quapp, Bofill: Eur. Phys. J. B 95, 2022, 87

Wellen in DNA Molekülen und Proteinen

- Yomosa, Phys.Rev. 27 (1983) 2120
- Englander et al. PNAS USA 77 (1980) 7222
- Sieradzan et al. Phys.Rev.E 90 (2014), 062717 Peierls-Nabarro Barrier and Protein Loop Propagation

Das Unendliche - Teil 1: Grenzübergang zum Kontinuum

Wir wollen noch zwei verschiedene 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 Solitonengleichung

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

- A.C. Scott, F.Y.F. Chu, D.W. McLaughlin, The Soliton: A New Concept in Applied Science, *Proc. IEEE*, 61 (1973) 1443-1483
- J. Cuevas-Maraver, P. Kevrekidis, F. Williams, F. (eds) The sine-Gordon Model and its Applications. *Nonlinear Systems and Complexity*' 10, 2014, Springer
- Boris A. Malomed, Soliton models: Traditional and novel, one- and multidimensional, *Low Temp. Phys.* 48, 856 (2022)

Wir wollen den Grenzprozess nun beschreiben: Eine Kette bestehe aus N Atomen. Um den Gradienten für eine dynamische Betrachtung zu erhalten, muss man die Energieformel nach allen N Variablen x_i ableiten. Das Potential der FK Kette war vorn gegeben

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

Für einzelne Teilchen x_i haben wir den Potentialbeitrag

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

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

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

Der erste Teil der Formel ist die Ableitung der Cos-Summanden, mit $\tilde{V}_o = V_o 2\pi / a_s$, während der zweite Teil entsteht, da immer Kombinationen von zwei Atomen in der Federformel stehen.

Nun kann man die Anzahl der Atome auf einem Stück Material erhöhen und zu einer unendlich dichten Kette übergehen. Aus dem zweifachen Differenzenteil des Gradienten des Potentials wird dann eine zweifache Ableitung nach der Ortskoordinate ϕ .

Wir betrachten den Limes $N \rightarrow \infty$ und $x_i \rightarrow \phi(x)$, 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

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

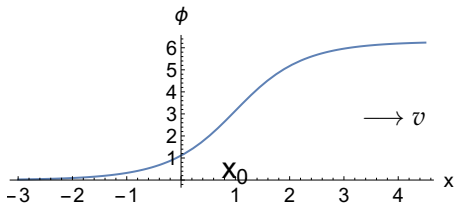
so erhält man mit dem FK-Potential die Sinus-Gordon-Gleichung

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

die Gleichung einer schwingenden Saite. (Die Konstante V_0 ist weggelassen, und $a_s = 2\pi$ gesetzt.) Unter dem Grenzprozess verschwindet auch die ehemalige Peierls-Nabarro-Barriere.

Eine Lösung dieser Gleichung ist wieder von der Art, wie sie schon Frenkel und Kontorova gefunden hatten, das Knicksoliton

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



Wellen-Soliton der Sinus-Gordon-Gleichung mit $x_0 = 1$. $\phi(x, t)$ kann man sich vorstellen als den Winkel eines Pendels bei x_0 . Nachdem die Welle durch ist, steht das Pendel um 2π weiter gedreht auf der gleichen Stelle.

Frenkel und Kontorova kamen mit einer anderen Methode zu diesem Resultat.

Weitere wichtige Solitongleichungen sind die **Korteweg-de Vries- Gleichung**

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

eine partielle Differentialgleichung dritter Ordnung. Sie beschreibt Solitonen, die in Wasserkanälen erstmals 1834 von John Scott Russell beobachtet wurden.

Sowie die **nichtlineare Schrödingergleichung**

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

Beide Gleichungen sind mathematisch vielfältig untersucht. Beide erlauben Solitonenlösungen in Glockenform.

- N. J. Zabusky, M. D. Kruskal, Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states, *Phys. Rev. Lett.* 15 (1965), S. 240;
- V.E.Zakharov, A.B.Shabat, Exakte Theorie der zweidimensionalen Selbstfokussierung und eindimensionalen Selbstmodulation von Wellen in nichtlinearen Medien, *J. Exp. Theoret. Phys.*, 34 (1972) 62.

Das Unendliche - Teil 2: Man verlängert die Kettenlänge bis ∞

In den Arbeiten 1938 zum FK Modell hatten Kontorova und Frenkel $a_0 = a_s$ verwendet, also gleiche Perioden. Vorne hatten wir gesehen, dass ein Soliton immer nur eine kleine Länge hat. Um sich nicht mit Randwerten der Kette zu plagen, hatten Kontorova und Frenkel eine unendlich lange Kette betrachtet.

Aber in der Realität ist $a_0 = a_s$ selten.

Wir hatten vorn gesehen, daß dann nie 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 sinnlos.

Was bei gleicher Periodizität bei Frenkel und Kontorova nur eine Vereinfachung der Betrachtung war, wird im allgemeinen Fall bei verschiedener Periodizität bei vielen Anwendern zu einem unsinnigen Fehler.

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

Wir suchen Gleichgewichtszustände des Potentials. Das ergibt für Gradient gleich Null ein gekoppeltes System von Gleichungen

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

für alle i in der Kette, nicht für 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.

Die Faszination der **'Twist'-Transformation** .

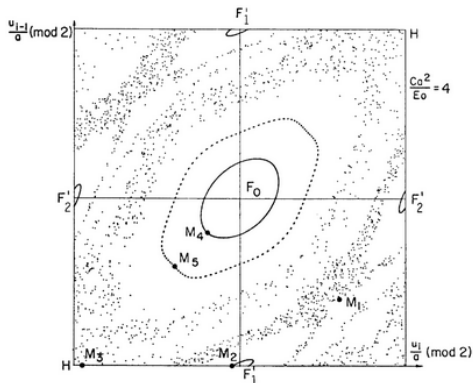
Setzt man für ein Paar aufeinander folgender Teilchen

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

so erhält man für die N gekoppelten Gleichungen 'im Inneren' der Kette eine Transformation T, die sich von Gleichung zu Gleichung wiederholt.

$$(x_{i+1}, x_i) = P_{i+1} = T P_i = (\tilde{V}_0 \sin(\frac{2\pi}{a_s} x_i) - k(x_{i-1} - 2x_i), x_i)$$

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.



Die Punkte sind wiederholte Abbildungen mit der Twist Map; die M_i sind willkürliche Startpunkte (S. Aubry, in *Solitons and Condensed Matter Physics*, A.R.Bishop, T. Schneider, eds. *Solid State Sciences* 8, Springer Berlin, 1978, 264).

Man hat seit 45 Jahren immer wieder auf diese Transformation zurückgegriffen, um Aussagen zum FK Modell zu formulieren. Aber fast alle Aussagen dazu sind physikalisch falsch, wenn man eine endliche Kette betrachtet: Quapp/ Bofill, *Electronics* 11 (2022) 3295.

Wo liegt der Denkfehler?

Beim Anfang. 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. – Ein frommer Wunsch.

Ein Beispiel für eine fehlerhafte Betrachtung ist ein 'Theorem' von Baesens und MacKay, *Nonlinearity*, 11 (1998) 949, in dem die Existenz von Grenzyklen in endlichen Kette behauptet wird. Dies würde bedeuten, dass es eine Relation der Art gibt (bei z.B.

$$3 a_0 = 2 a_s)$$

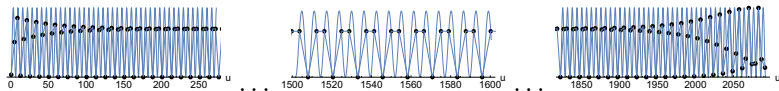
$$u_{i+3} = u_i + 2 a_s .$$

Bei einer Kette von endlicher Länge gilt aber immer

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

mit einem von Teilchen zu Teilchen sich änderndem Wert von ϵ_i . Bei $N = 500$ haben wir das kleinste ϵ_i mit $\epsilon_{244} \approx 2 \times 10^{-11}$ gefunden. Quapp/ Bofill *Electronics* 11 (2022) 3295.

Die freien Randwerte am Anfang und am Ende der Kette zerstören einen festen Zyklus.



Ein linkes Stück, ein Mittelstück und ein rechtes Stück einer 500-atomigen Kette. Am Rand ist der Einfluss der freien Randwerte deutlich zu erkennen. In der Mitte hat sich ein quasi-Zyklus eingestellt. Natürlich sind die ϵ -Differenzen kleiner als 10^{-2} in der graphischen Darstellung nicht aufzulösen. Würde sich hier aber ein echter Grenzyklus ergeben, dann könnten am rechten Rand nicht wieder Randwerte auftreten, die aus dem Zyklus ausbrechen. Dies haben wir mit der Twist-Map nachgerechnet.

Ausblick

Wir diskutieren seit 4 Jahren derartig falsche Theorien, bisher allerdings mit mäßigem Erfolg im wissenschaftlichen Streit der Meinungen:

- Quapp/ Bofill Newton trajectories for the tilted Frenkel-Kontorova model, *Molec. Phys.* 117 (2019) 1541
- Quapp/ Bofill Comment on “Out-of-equilibrium Frenkel-Kontorova model” by A.Imparato, 2021, *J.Stat.Mech.* 013214, *J. Statistical Mech.* (2022) 013204
- Quapp/ Bofill Comment on “Realizing the Frenkel-Kontorova model with Rydberg-dressed atoms” by J.M. Muñoz et al, *Phys. Rev. A* 102 (2020) 043308, *von Phys. Rev. A nicht angenommen*
- Quapp/ Bofill An analysis of some properties and of the use of the twist map for the finite Frenkel-Kontorova model, *Electronics* 11 (2022) 3295.

Die Quellen zur Twist-Map beim FK Modell sind bisher mehr als 1000 mal zitiert worden; so weit wir wissen nur mit kleinen Ergänzungen, nie wirklich negativ. Alle Autoren dieser Arbeiten zu überzeugen, daß sie falsch lagen scheint eine Herkules-Aufgabe zu sein.

Literatur zu FK



Markus Heyerhoff (1997) Die frühe Geschichte der Solitonentheorie
Dissertation, Greifswald (Betreuer Prof.R.Schimming)



A.T. Filippov, The Versatile Soliton (insbesondere Kap.6: Frenkels Soliton)
Birkhäuser, 2010



W. Quapp, J. M. Bofill (2019a) Newton trajectories for the tilted
Frenkel-Kontorova model
Molec. Phys. 117 (2019) 1541



W. Quapp, J. M. Bofill (2019b) Sliding Paths for Series of Frenkel-Kontorova
Models – A Contribution to the Concept of 1D-superlubricity
European Phys.J.B 92 (2019) 193



W. Quapp, J.Y. Lin, J. M. Bofill (2020) The movement of a one-dimensional
Wigner solid explained by a modified Frenkel-Kontorova model
European Phys.J.B 93 (2020) 227



W. Quapp, J. M. Bofill (2022a) Comment on “Out-of-equilibrium Frenkel-Kontorova model” by A.Imparato, 2021, J.Stat.Mech. 013214
J. Statistical Mech. (2022) 013204



W. Quapp, J. M. Bofill (2022b) Comment on “Realizing the Frenkel-Kontorova model with Rydberg-dressed atoms” by J.M. Muñoz et al, Phys. Rev. A 102 (2020) 043308 *von Phys. Rev. A nicht angenommen.*



W. Quapp, J. M. Bofill (2022x) LETTER: On putative incommensurate states of a finite Frenkel-Kontorova chain
arXiv2210.07000 – This Letter was in a former version written as a Comment for Phys.Rev.A. It was not accepted by the Journal using a biased review.



W. Quapp, J. M. Bofill (2022c) An analysis of some properties and of the use of the twist map for the finite Frenkel-Kontorova model
Electronics 11 (2022) 3295