



Das Frenkel-Kontorova Modell – Eine unendliche Geschichte –

Wolfgang Quapp (MLS),^{*,†} Josep Maria Bofill[‡]

[†]*Mathematisches Institut, Universität Leipzig, PF 100920, D-04009 Leipzig,*

[‡]*Departament de Química Orgánica, Universitat de Barcelona und*

Institut de Química Teórica i Computacional, Martí i Franqués, 1, 08028 Barcelona Spain

E-mail: quapp@uni-leipzig.de

Veröffentlicht: 27. Februar 2023

Zusammenfassung

Das Frenkel-Kontorova (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, 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 Solitonengleichung. 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.

Abstract

The Frenkel-Kontorova (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. Here mainly stationary states of the simplest model shall be discussed, 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.

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 2023.¹

*Korrespondierender Autor

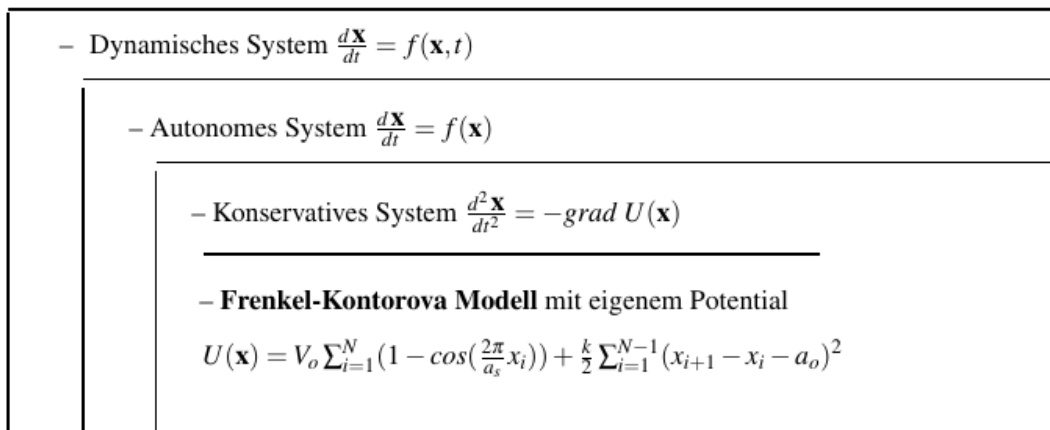
In dieser Zusammenfassung werden folgende Punkte behandelt:

- 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 2 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.

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



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 Yakov Il'itch FRENKEL (1894 - 1952), Prof. für Theoretische Physik an der Universität Leningrad, und

Tatjana 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 1938/1939.²⁻⁶

Yakov Il'itch FRENKEL wurde am 10.2.1894 Rostov-am-Don geboren.

1913-1916 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,⁷ eine quantisierte elastische Wellen 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'.⁸ Er mußte sich jahrelang vor staatlichen und Parteigremien rechtfertigen. Insbesondere sollte er die Bücher zur Wellenmechanik⁹⁻¹¹ '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 sind⁹⁻¹⁵ sowie Sekundärliteratur über ihn.⁸ 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,¹⁶ in England von Frank und van der Merve,^{17,18} als auch von vielen weiteren Autoren.¹⁹ 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, die

1. untereinander durch Federkräfte verbunden sind, und die
2. durch eine weitere Kraft angezogen werden, deren Potential durch eine Cosinusfunktion 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.

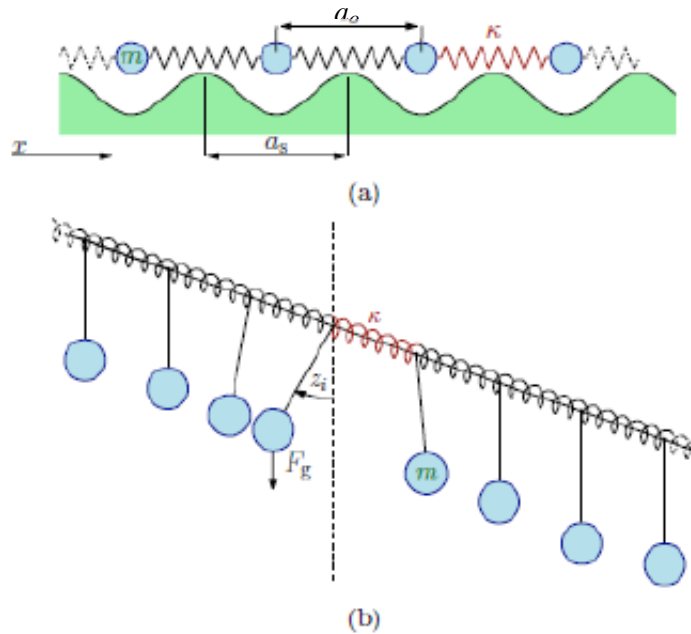


Figure 1: Das Frenkel-Kontorova Modell (nach Loi Do et al.²⁰)

Mechanische Pendel, die noch untereinander durch Federn gekoppelt sind, bilden ein spezielles FK Modell, da die Pendel an der Aufhängung fixiert sind.²¹ Das allgemeine Modell ist verschieblich über dem Grundpotential.

Die Parameter des Modells sind:

- 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 von Atomen $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)^T$ mit $x_i < x_{i+1}$ lautet

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

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_o , als auch eine Verlängerung dieser Distanz über a_o 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,^{22,23} additiv höhere Potenzen in der Federformel,^{24,25} oder neben der bisherigen nächste-Nachbar-Formel noch die Einbeziehung weitere Nachbaratome,^{26,27} die einige schwache Versionen von Ferromagnetismus erlauben, oder bei Verwendung von Coulombkräften.²⁸ Neben freien Randwerten von linear angeordneten FK Ketten sind auch zyklische FK Ketten möglich, die periodische Randwerte erzwingen.⁵³

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.

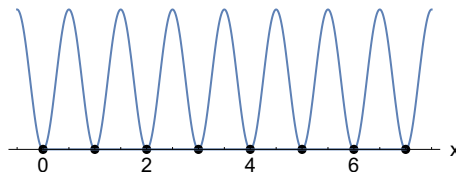


Figure 2: FK Modell mit $N=8$ und $a_o = a_s$

- 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. Im Bild 3 sind 8 Atome auf 10 Potentialmulden aufgeteilt. Dieser Grundzustand hat eine Energie größer Null.

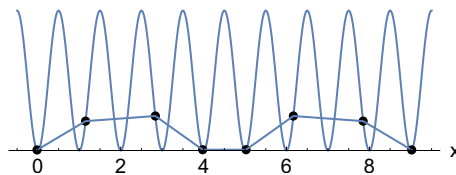


Figure 3: Minimum des FK Modells, $N=8$, $a_o = 1.25 * a_s$ und $k = 10V_o$

2.3 Globale Minima, Sattelpunkte und Zwischen-Minima

Wir gehen zu einer kürzeren 5-atomige 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 Abb. 4. Die Berechnung nutzt gängige mathematische Optimisationsmethoden.²⁹ Man beachte, dass man schon ein 5-dimensionales Problem vorliegen hat.

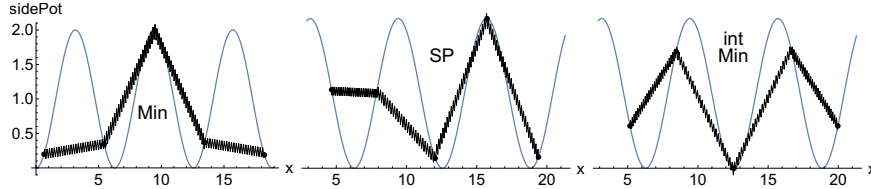


Figure 4: Stationäre Punkte des FK Modells, $N=5$, $a_o = 2/3 * a_s$, $a_s = 2\pi$, $k = V_o$

Im globalen Minimum links in Abb. 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 Abb. 4. Eine nochmalige Rechtsverschiebung führt zu einem nächsten globalen Minimum, analog zum linken Bild in Abb. 4, aber eine Potentialmulde des Grundpotentials weiter.

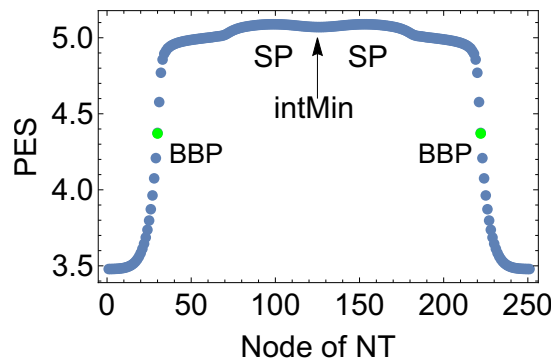


Figure 5: Energieprofil zu Abb. 4

Abb. 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 flachen ‘Gebirgsweg’ für das FK Modell mit $N=5$, $a_o = 2/3 * a_s$ und $k = V_o$. 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, vergleiche Abb. 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 vorgeschlagen.³⁰ Er gab später einem gesamten Forschungsgebiet einen Namen.

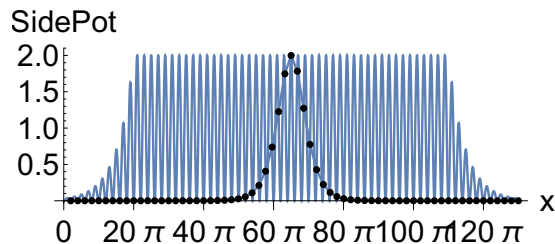


Figure 6: Ein Soliton wandert durch das Potential einer langen Kette.²⁸

3.1 Momentanaufnahmen eines Solitons

In Abb. 7 haben wir eine 10-atomige Kette mit $a_o = a_s$ verwendet. Von links aus ist ein Stoß ausgeübt worden, der zum ersten SP₁ 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 SP₁ 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**.³⁰

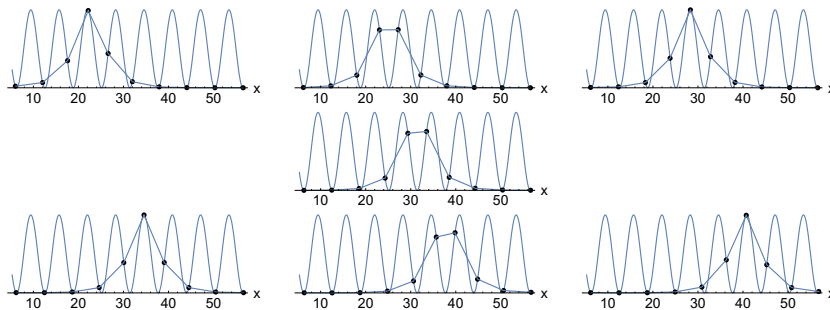


Figure 7: Ein Soliton wandert durch das Potential einer 10-atomigen Kette mit $a_o = a_s$.

3.2 Solitonenformel

Frenkel und Kontorova erkannten 1938, dass das Modell die Möglichkeit von Solitonen enthält. Es gebe schon eine Versetzung (so wurde ein Soliton damals genannt). Für $a_o = a_s = a$ 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 für das Verhalten des ersten Atoms in Abb. 8 gegeben.

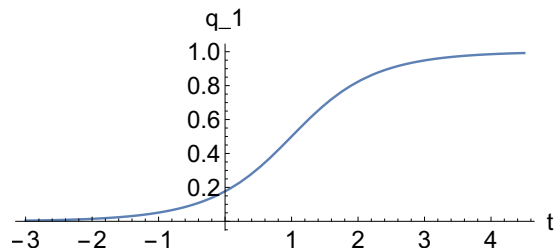


Figure 8: Graph eines Solitons im Atom No.1.

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 Abb. 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.³¹⁻³³
- 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), vergleiche die wichtigen einführenden Arbeiten.^{34,35} Die 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, bei der chemische Reaktionen durch eine äußere Kraft induziert werden.^{36,37} Die NT wurden von uns auch auf das FK Modell angewendet.²⁹

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 Indexdifferenz von 1 verbinden,³⁸ d.h. zum Beispiel verbinden sie Minima mit Index 0 mit Sattelpunkten vom Index 1. In Abb. 5 vorn wurde 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.³⁹ 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 i.a. nicht von physikalischem Interesse.

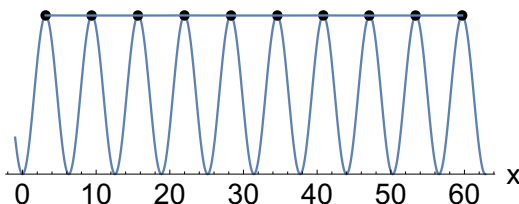


Figure 9: Ein maximaler Sattelpunkt in einer 10-atomigen Kette für $a_0 = a_s$.

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 $\mathbf{f}=F(1, 1, \dots, 1)$, ist vom Kraftaufwand her ungünstig, weil alle Atome gleichzeitig ihren Potentialberg hinauf geschoben werden, vergleiche Abb. 9. Eine Solitonenstruktur dagegen braucht viel weniger Energie.

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, vergleiche Abb. 10. Links in Abb. 10 sind 5 Atome auf 4 Täler verteilt, rechts sind 5 Atome auf 6 Täler gestreckt.⁴⁰ 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.

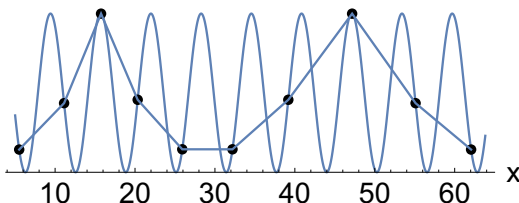


Figure 10: Ein Antikink und ein Kink in einer 10-er Kette für $a_0 = a_s$.

5 Anwendungen des FK Modells

5.1 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.²⁻⁶

Dieses Studium wurde fortgesetzt von Frank und van der Merve,^{17,18} sowie Kochendörfer und Seeger.¹⁶ Die Dynamik von Leerstellen in einer polymeren Kristalkette wurde von E. A. Zubova behandelt.⁴¹

5.2 Gleitprozesse zwischen Oberflächen

Braun und Kivshar^{19,42} Kapitel 5, 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 Termostaten.

Gangloff et al. behandeln ebenfalls Kinks für die Untersuchung von Nanofriction.^{43,44} Sie verwenden dazu eine zusätzliche erzwungene Bewegung. Experimentell beobachten sie diese Vorgänge auf atomarer Ebene.

Quapp und Bofill schlagen das FK Modell ebenfalls zur Betrachtung von Gleitprozessen vor.^{40,45} Unter Verwendung von NT berechnen sie für eine Kette mittlerer Länge die Sattelpunkte für einen Gleitprozess.

5.3 Verschiebung eines Wignerkristals

In den Arbeiten der Experimentatoren um Jui Yin Lin^{46,47} wurde ein System von Elektronen auf einer Oberfläche von suprakalten Heliumatomen beobachtet. Man hatte dazu einen sehr schmalen Streifen ausgeätzt, in dem die Heliumatomen 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 schlugen vor, dieses Experiment durch Annahme der Bildung eines Solitons zu verstehen.²⁸

5.4 Wellen in Feldern von Josephson Junctions

Ein Josephson Junction ist ein quantummechanisches 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.^{48,49}

Quapp und Bofill führen die Betrachtung des FK Modells für Josephson Junction Arrays weiter.⁵⁰ Von besonderem Interesse sind dabei Shapiro-Sprünge in Feldern von Josephson Junctions.⁵¹ Sie repräsentieren einen dissipativ getriebenen Quanteneffekt. Larsen et al. beobachteten den Effekt in graphen-basierten Josephson Junctions.⁵²

Quapp und Bofill berechneten Lyapunov-Exponenten^{53,54} für die Langevingleichung der entsprechenden FK Kette. Es ergab sich die skurrile Situation von gegenläufigen Lyapunov-Exponenten je nach der Art der Randwerte der FK Kette.

5.5 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 γ -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.⁵⁵ Dabei muss das Material von der Temperatur einer Hochtemperaturphase (bei Stahl: Austenit) unter die Gleichgewichtstemperatur zu einer Niedertemperaturphase (bei Stahl: α -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.⁵⁶⁻⁵⁸

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.²³ Mit einer Langevinlösung wurde dieser Übergang unter einer externen Kraft simuliert.

5.6 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.^{59,60} Den Vorgang kann man versuchen durch ein FK Modell zu beschreiben.⁶¹

Auch das Wandern von Schleifen in gewissen Proteinen kann man versuchen, mit einem FK Modell zu erklären.^{62,63}

6 Grenzprozesse

6.1 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^{49,64-66}

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

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

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

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

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

Der erste Teil der Formel ist die Ableitung der Cosinus-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. Den Gradient setzen wir in eine Newtonsche Bewegungsgleichung von Schema 1 ein. Mit Gl. (4) erhält man die diskrete Sinus-Gordon Gleichung, die auch als Synonym für das FK Modell verwendet wird.²⁶

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 ϕ .

Wir betrachten den Limes $N \rightarrow \infty$ und $x_i \rightarrow \phi(x)$, mit $x_{i-1} \rightarrow \phi(x - a_o)$, $x_{i+1} \rightarrow \phi(x + a_o)$, und unter $a_o \rightarrow 0$ muss man den Grenzwert für die 'Federkonstante' fordern $k := 1/a_o^2 \rightarrow \infty$. Es ergibt sich mit einer zweifachen Differenzenformel

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

Wenn man die Newtonsche Bewegungsgleichung ansetzt

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

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_o ist weggelassen, und $a_s = 2\pi$ gesetzt.) Unter dem Grenzprozess verschwindet auch die ehemalige Peierls-Nabarro-Barriere. Eine Ein-Solitonenlösung dieser Gleichung ist wieder von der Art, wie sie schon Frenkel und Kontorova gefunden hatten, das Knicksoliton (vergleiche Abb. 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 2π weiter gedreht auf der gleichen Stelle.

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

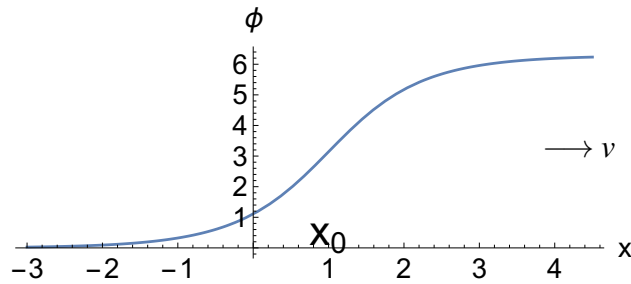


Figure 11: Wellen Soliton der Sinus-Gordon-Gleichung mit $x_0 = 1$.

Weitere wichtige Gleichungen im zentralen Trio der Solitongleichungen sind die **Korteweg-de Vries- Gleichung**⁶⁷

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

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

Sowie die **nichtlineare Schrödingergleichung**⁶⁸

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

Beide Gleichungen sind mathematisch vielfältig untersucht. Beide erlauben Solitonenlösungen in Glockenform.^{69,70}

7 Ein weiterer Grenzübergang

7.1 Man verlängert die Kettenlänge bis unendlich

In den Arbeiten 1938 zum FK Modell hatten Kontorova und Frenkel $a_o = a_s$ verwendet, also gleiche Perioden. Hier oben haben wir gesehen, dass ein Soliton nur kurz ist. Um sich nicht mit Randwerten der Kette abgeben zu müssen, hatten Kontorova und Frenkel eine unendlich lange Kette betrachtet.² 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 vorn in Abschnitt 2.2 gesehen, daß bei $a_o \neq a_s$ 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 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.

7.2 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

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

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

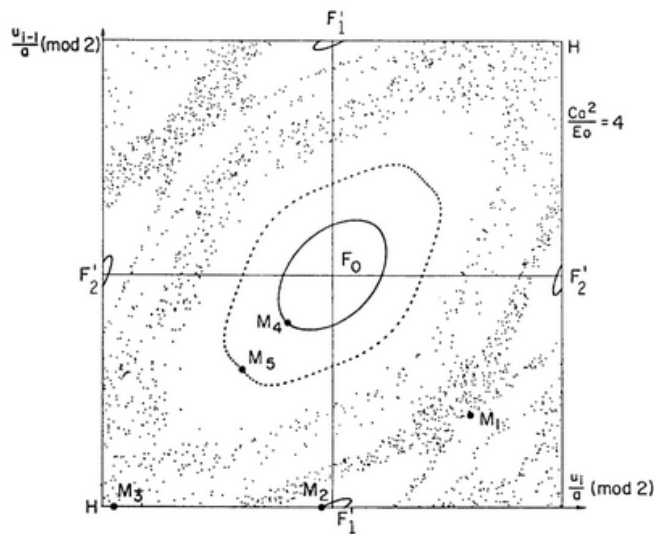


Figure 12: Die Punkte sind wiederholte Abbildungen mit der Twist Map; die M_i sind willkürliche Startpunkte (nach S. Aubry⁷¹)

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.⁷²

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.

Ein Beispiel für eine fehlerhafte Betrachtung ist ein ‘Theorem’ von Baesens und MacKay,⁷³ in dem die Existenz von Grenzyklen in endlichen Kette behauptet wird. Dies würde bedeuten, dass es eine Relation der Art gibt (bei z.B. $3a_o = 2a_s$)

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

Bei einer Kette von endlicher Länge gilt aber immer⁷²

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

mit einem von Teilchen zu Teilchen sich änderndem Wert von ε_i . Bei $N = 500$ haben wir das kleinste ε_i mit $\varepsilon_{244} \approx 2 \times 10^{-11}$ gefunden.⁷² Die freien Randwerte am Anfang und am Ende der Kette zerstören einen festen Zyklus.

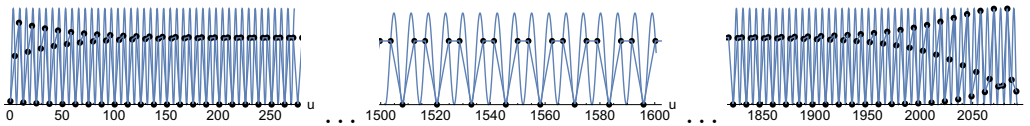


Figure 13: Ein linkes Stück, ein Mittelstück und ein rechtes Stück einer Kette mit 500 Atomen.

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 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. Die Struktur von Abb. 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 Abb. 13. Auch die Twist-Map findet bei richtigem Anfang den rechten ‘Ausgang’ wieder.

7.3 Ausblick

Wir kritisieren seit Jahren derartig falsche Theorien, bisher allerdings mit mäßigem Erfolg.^{29,72,74,75} Der Entwurf eines entsprechenden Kommentars⁷⁵ wurde mit einer fadenscheinigen Begründung von *Phys. Rev. A* nicht angenommen.

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. 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

An Rainer Schimming für zahlreiche Hinweise zum Vortrag und zu dieser Arbeit, für Gerhard Pfaff und Ekkerhard Höxtermann für Hilfen und aufmunternde Kommentare, 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. WQ dankt der Universität Leipzig für Arbeitsmöglichkeiten.

Literatur

- (1) Quapp, W. *Das Frenkel-Kontorova Modell, Eine unendliche Geschichte*; Leibniz-Sozietät der Wissenschaften zu Berlin e.V.: www.math.uni-leipzig.de/MI/quapp/LS23FKmodelFebr.pdf, 2023; pp 1–40.
- (2) Kontorova, T. A.; Frenkel, Y. I. Zur Theorie der plastischen Deformationen und Versetzungen I (russisch). *Zh. Eksp. Teor. Fis.* **1938**, 8, 89–95.
- (3) Kontorova, T. A.; Frenkel, Y. I. Zur Theorie der plastischen Deformationen und Versetzungen II (russisch). *Zh. Eksp. Teor. Fis.* **1938**, 8, 1340–1348.
- (4) Kontorova, T. A.; Frenkel, Y. I. Zur Theorie der plastischen Deformationen und Versetzungen III (russisch). *Zh. Eksp. Teor. Fis.* **1938**, 8, 1349–1359.
- (5) Frenkel, Y. I.; Kontorova, T. A. To the theory of plastic deformations and twinings. *Phys. Z. Sowjetunion* **1938**, 13, 1.
- (6) Frenkel, Y. I.; Kontorova, T. A. To the theory of plastic deformations and twinings. *Fiz. Zh. (Moscow)* **1939**, 1, 137.
- (7) Vasileiadis, T.; Jeena Varghese, V. B.; Gomis-Bresco, J.; Urrios, D. N.; Graczykowski, B. Progress and perspectives on phononic crystals. *J. Appl. Phys.* **2021**, 129, 160901.
- (8) Frenkel, V. J. *Yakov Ilich Frenkel. His Work, Life and Letters*; Birkhäuser: Basel, 1996.
- (9) Frenkel, J. *Einführung in die Wellenmechanik*; Julius Springer: Berlin, 1929.
- (10) Frenkel, J. *Wave Mechanics: Elementary Theory*; Clarendon Press: Oxford, 1932.
- (11) Frenkel, J. *Wave Mechanics - Advanced General Theory*; Clarendon Press; Dover Publications, Inc: Oxford, 1934; 1950.
- (12) Frenkel, J. *Lehrbuch der Elektrodynamik I, II*; Julius Springer: Berlin, 1926, 1928.
- (13) Frenkel, J. *Kinetic Theory of Liquids*; Clarendon Press: Oxford, 1946.

- (14) Frenkel, J. I. *Prinzipien der Theorie der Atomkerne*; Akademie Verlag: Berlin, 1957.
- (15) Frenkel, J. *Statistische Physik*; Akademie Verlag: Berlin, 1957.
- (16) Kochendörfer, A.; Seeger, A. Theorie der Versetzungen in eindimensionalen Atomreihen. I. Periodisch angeordnete Versetzungen. *Zeitschr. Phys.* **1950**, *127*, 533–550.
- (17) Frank, F. C.; van der Merwe, J. H. One-Dimensional Dislocations. I. Static Theory. *Proc. Royal Soc. London. Ser. A* **1949**, *198*, 205–216.
- (18) Frank, F. C.; van der Merwe, J. H. One-Dimensional Dislocations. II. Misfitting monolayers and oriented overgrowth. *Proc. Royal Soc. London. Ser. A* **1949**, *198*, 216–225.
- (19) Braun, O. M.; Kivshar, Y. S. The Frenkel-Kontorova Model, Concepts, Methods, and Applications. **2004**,
- (20) Do, L.; Pucejdl, K.; Hurak, Z. Experimental Platform for Boundary Control of Mechanical Frenkel-Kontorova Model. *IEEE 61st Conference on Decision and Control (CDC)* **2022**, 7618–7623.
- (21) Basu Thakur, R.; English, L. Q.; Sievers, A. J. Driven intrinsic localized modes in a coupled pendulum array. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **2008**, *41*, 015503.
- (22) Milchev, A. Solitary waves in a Frenkel-Kontorova model with non-convex interactions. *Physica D* **1990**, *41*, 262–274.
- (23) Quapp, W.; Bofill, J. M. A generalized Frenkel-Kontorova model for a propagating Austenite-Martensite phase boundary - revisited numerically. *Eur. Phys. J. B* **2022**, *95*, 87.
- (24) Pelap, F. B.; Kamga, J. H.; Yamgoue, S. B.; Ngounou, S. M.; Ndecfo1, J. E. Dynamics and properties of waves in a modified Noguchi electrical transmission line. *Phys. Rev. E* **2015**, *91*, 022925.
- (25) Mounouna, F. G.; Wamba, E.; Nguetcho, A. S. T.; Bhat, I. A.; Bilbault, J. M. Modulational stability brought by cubic-quartic interactions of the nearest-neighbor in FK model subjected in a parametrized on-site potential. *Comm. Nonlin. Sci. Numer. Sim.* **2022**, *105*, 106008.
- (26) Mingaleev, S. F.; Gaididei, Y. B.; Majernikova, E.; Shpyrko, S. Kinks in the discrete sine-Gordon model with Kac-Baker long-range interactions. *Phys. Rev. E* **2000**, *61*, 4455–5561.
- (27) De La Llave, R.; Valdinoci, E. Ground states and critical points for generalized Frenkel-Kontorova models in \mathbf{Z}^d . *Nonlinearity* **2007**, *20*, 2409–2424.
- (28) Quapp, W.; Lin, J.-Y.; Bofill, J. M. The movement of a one-dimensional Wigner solid explained by a modified Frenkel-Kontorova model. *Eur. Phys. J. B* **2020**, *93*, 227.
- (29) Quapp, W.; Bofill, J. M. Newton Trajectories for the tilted Frenkel-Kontorova model. *Molec. Phys.* **2019**, *117*, 1541–1558.
- (30) Peyrard, M.; Kruskal, M. D. Kink dynamics in the highly discrete sine-Gordon system. *Physica D* **1984**, *14*, 88–102.

- (31) Guo, B.; Soliton Theory and Modern Physics, In *Soliton Theory and Its Applications*; Gu, C., Ed.; Springer, Zhejiang Sci., 1995; Chapter 1, pp 1–68.
- (32) Heyerhoff, M. *Die frühe Geschichte der Solitonen theorie, Dissertation*; Universität Greifswald, 1997.
- (33) Filippov, A. T. *The Versatile Soliton, Kap.6: Frenkel's Soliton*; Birkhäuser, Springer: Boston, 2010.
- (34) Quapp, W.; Hirsch, M.; Imig, O.; Heidrich, D. Searching for Saddle Points of Potential Energy Surfaces by Following a Reduced Gradient. *J. Comput. Chem.* **1998**, *19*, 1087–1100.
- (35) Quapp, W.; Hirsch, M.; Heidrich, D. Bifurcation of Reaction Pathways: the Set of Valley Ridge Inflection Points of a Simple Three-dimensional Potential Energy Surface. *Theor. Chem. Acc.* **1998**, *100*, 285–299.
- (36) Quapp, W.; Bofill, J. M.; Ribas-Ariño, J. Analysis of the Acting Forces in a Theory of Catalysis and Mechanochemistry. *J. Phys. Chem. A* **2017**, *121*, 2820–2838.
- (37) Quapp, W.; Bofill, J. M.; Ribas-Ariño, J. Towards a Theory of Mechanochemistry, Simple Models from the Very Beginnings. *Int. J. Quant. Chem.* **2018**, *118*, e25775.
- (38) Hirsch, M.; Quapp, W. Reaction Channels of the Potential Energy Surface: Application of Newton Trajectories. *J. Molec. Struct., THEOCHEM* **2004**, *683*, 1–13.
- (39) Bofill, J. M.; Ribas-Ariño, J.; García, S. P.; Quapp, W. An Algorithm to Locate Optimal Bond Breaking Points on a Potential Energy Surface. *J. Chem. Phys.* **2017**, *147*, 152710.
- (40) Quapp, W.; Bofill, J. M. Sliding Paths for Series of Frenkel-Kontorova Models - A Contribution to the Concept of 1D-superlubricity. *European Phys. J. B* **2019**, *92*, 193.
- (41) Zubova, E. A. On the Applicability of the Frenkel-Kontorova model to Describing the Dynamics of Vacancies in a Polymeric Crystal Chain. *J. Exp. Theoret. Phys.* **2001**, *93*, 895–902.
- (42) Braun, O. M.; Kivshar, Y. S. Nonlinear dynamics of the Frenkel-Kontorova model. *Phys. Rep.* **1998**, *306*, 1–108.
- (43) Gangloff, D.; Bylinskii, A.; Counts, I.; Jhe, W.; Vuletić, V. Velocity tuning of friction with two trapped atoms. *Nat. Phys.* **2015**, *11*, 915 – 919.
- (44) Gangloff, D. A.; Bylinskii, A.; Vuletić, V. Kinks and Nanofriction: Structural Phases in Few-Atom Chains. *Phys. Rev. Res.* **2020**, *2*, 013380.
- (45) Quapp, W.; Bofill, J. M. A Model for a Driven Frenkel-Kontorova Chain. *European Phys. J. B* **2019**, *92*, 95–117.
- (46) Lin, J.-Y.; Smorodin, A. V.; Badrutdinov, A. O.; Konstantinov, D. Sliding of an electron crystal of finite size on the surface of superfluid ^4He confined in a microchannel. *Phys. Rev. B* **2018**, *98*, 085412.
- (47) Lin, J.-Y.; Smorodin, A. V.; Badrutdinov, A. O.; Konstantinov, D. Transport Properties of a Quasi-1D Wigner Solid on Liquid Helium Confined in a Microchannel with Periodic Potential. *J. Low Temp. Phys.* **2019**, *195*, 289 – 299.

- (48) Ustinov, A. V. Solitons in Josephson-junction arrays. *Physica D* **1998**, *123*, 315–329.
- (49) Mazo, J. J.; Ustinov, A. V. In *The sine-Gordon Model and its Applications, Nonlinear Systems and Complexity*; Cuevas-Maraver et al., J., Ed.; Springer International Publishing Switzerland, 2014; Chapter 10, pp 155–175.
- (50) Quapp, W.; Bofill, J. M. Description of zero field steps on the potential energy surface of a Frenkel-Kontorova model for annular Josephson junction arrays. *Eur. Phys. J. B* **2021**, *94*, 105.
- (51) Shapiro, S. Josephson currents in superconducting tunneling: The effect of microwaves and other observations. *Phys. Rev. Lett.* **1963**, *11*, 80.
- (52) Larson, T. F. Q.; Zhao, L.; Arnault, E. G.; Wei, M.-T.; Seredinski, A.; Li, H.; Watanabe, K.; Taniguchi, T.; Amet, F.; Finkelstein, G. Zero Crossing Steps and Anomalous Shapiro Maps in Graphene Josephson Junctions. *Nano Lett.* **2020**, *20*, 6998–7003.
- (53) Quapp, W.; Bofill, J. M. Description of Shapiro steps on the potential energy surface of a Frenkel-Kontorova model Part I: chain in a box. *Eur. Phys. J. B* **2021**, *94*, 66.
- (54) Quapp, W.; Bofill, J. M. Description of Shapiro steps on the potential energy surface of a Frenkel-Kontorova model Part II: free boundaries. *Eur. Phys. J. B* **2021**, *94*, 64.
- (55) Otsuka, K.; Saxena, A.; Deng, J.; Ren, X. Mechanism of the shape memory effect in martensitic alloys: an assessment. *Phil. Mag.* **2011**, *91*, 4514–4535.
- (56) Xing, H.; Khantachawana, A.; Kim, H. Y.; Miyazaki, S. Effect of Ni-Content on Shape Memory Behavior of Ti-rich Ti-Ni Melt-spun Ribbons. *Mat. Sci. Forum* **2005**, *475-479*, 1925–1928.
- (57) Ko, W.-S.; Maisel, S. B.; Grabowski, B.; Jeon, J. B.; Neugebauer, J. Atomic scale processes of phase transformations in nanocrystalline NiTi shape-memory alloys. *Acta Materialia* **2017**, *123*, 90–101.
- (58) Plummer, G.; Mendeleev, M. I.; Lawson, J. W. Molecular dynamics simulations of austenite-martensite interface migration in NiTi alloy. *Phys. Rev. Mat.* **2022**, *6*, 123601.
- (59) Englander, S. W.; Kallenbach, N. R.; Heeger, A. J.; Krumhansl, J. A.; Litwint, S. Nature of the open state in long polynucleotide double helices: Possibility of soliton excitations. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **1980**, *77*, 7222–7226.
- (60) Yomosa, S. Soliton excitations in deoxyribonucleic acid (DNA) double helices. *Phys. Rev. A* **1983**, *27*, 2120–2125.
- (61) Kulic, I. M.; Schiessel, H. Chromatin dynamics: Nucleosomes go mobile through twist defects. *Phys. Rev. Lett.* **2003**, *91*, 148103.
- (62) Sieradzan, A. K.; Niemi, A.; Peng, X. Peierls-Nabarro Barrier and Protein Loop Propagation. *Phys. Rev. E* **2014**, *90*, 062717.
- (63) Clopes, J.; Shin, J.; Jahnel, M.; Grill, S. W.; Zaburdaev, V. Thermal fluctuations assist mechanical signal propagation in coiled-coil proteins. *Phys. Rev. E* **2021**, *104*, 054403.

- (64) Barone, A.; Esposito, F.; Magee, C.; Scott, A. Theory and applications of the sine-Gordon equation. *Riv. Nuo. Cim.* **1971**, *1*, 227–267.
- (65) Scott, A. C.; Chu, F. Y. F.; McLaughlin, D. W. The Soliton: A New Concept in Applied Science. *Proc. IEEE* **1973**, *61*, 1443–1483.
- (66) Malomed, B. A. Soliton models: Traditional and novel, one- and multidimensional. *Low. Temp. Phys.* **2022**, *48*, 856.
- (67) He, B.; Meng, Q. Three kinds of periodic wave solutions and their limit forms for a modified KdV-type equation. *Nonlin. Dyn.* **2016**, *86*, 811–822.
- (68) Pelap, F. B.; Tatsinkou, I.; Fomethé, A. Nonlinear excitations in a continuous bi-inductance electrical line. *Phys. Scr.* **2011**, *83*, 045009.
- (69) N. J. Zabusky, M. D. K. Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. *Phys. Rev. Lett.* **1965**, *15*, 240.
- (70) Zakharov, V. E.; Shabat, A. B. Exakte Theorie der zweidimensionalen Selbstfokussierung und eindimensionalen Selbstmodulation von Wellen in nichtlinearen Medien. *J. Exp. Theoret. Phys.* **1972**, *34*, 62.
- (71) Aubry, S. In *Solitons and Condensed Matter Physics*; Bishop, A. R., Schneider, T., Eds.; Solid State Sciences 8; Springer: Berlin, 1978; p 264.
- (72) Quapp, W.; Bofill, J. M. An analysis of some properties and of the use of the twist map for the finite Frenkel-Kontorova model. *Electronics* **2022**, *11*, 3295.
- (73) Baesens, C.; MacKay, R. S. Gradient dynamics of tilted Frenkel-Kontorova models. *Nonlinearity* **1998**, *11*, 949–964.
- (74) Quapp, W.; Bofill, J. M. Comment on ‘Out-of-equilibrium Frenkel-Kontorova model’ (A. Imparato, 2021, J. Stat. Mech. 013214). *J. Stat. Mech.* **2022**, 013204.
- (75) Quapp, W.; Bofill, J. M. Comment on realizing the Frenkel-Kontorova model with Rydberg-dressed atoms, by J.M. Muñoz et al, Phys. Rev. A 102, 043308 (2020). *Phys. Rev. A* **2022**, *rejected*, veröffentlicht als arXiv2210.07000, 1–5.