

**TERMODYNAMIKA MODELU
FALICOVA – KIMBALLA
SYMULACJE MONTE CARLO**

Katarzyna Czajka, Maciej M. Maśka

Zakład Fizyki Teoretycznej, Instytut Fizyki

Uniwersytet Śląski



Kazimierz 2005

PLAN

- Model Falicova-Kimballa
- Symulacje Monte Carlo
 - Klasyczny algorytm Metropolis
 - Algorytm Metropolis dla modelu FK
 - Funkcja korelacyjna
 - Ciepło właściwe i podatność CDW
- Wyniki dla modelu FK na sieci kwadratowej
 - $\rho = 0.5$
 - * Identyfikacja przejścia I-go rodzaju
 - * Funkcja korelacyjna, ciepło właściwe
 - * Rozkłady jonów i elektronów
 - * Wyznaczanie gęstości stanów
 - * Oddziaływanie NNN
 - $\rho \neq 0.5$
 - * silne oddziaływanie
 - * słabe oddziaływanie
- Inne wyniki
- Podsumowanie

MODEL FALICOVA–KIMBALLA

- wędrowne fermiony
- zlokalizowane (klasyczne) cząstki — „jony”
- oddziaływanie jedynie pomiędzy cząstkami wędrownymi i zlokalizowanymi

MODEL FALICOVA–KIMBALLA

Hamiltonian:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j + U \sum_i n_i w_i$$

c_i^\dagger (c_i) – operatory kreacji (anihilacji) elektronu,

$n_i = c_i^\dagger c_i$ – liczba obsadzeń i -tego węzła,

t_{ij} – całka przeskoku pomiędzy węzłami i oraz j

U – oddziaływanie kulombowskie na węźle,

$w_i = \{1, 0\}$ w zależności, czy w i -tym węźle znajduje się masywna cząstka

MODEL FALICOVA–KIMBALLA

Hamiltonian:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j + U \sum_i n_i w_i$$

c_i^\dagger (c_i) – operatory kreacji (anihilacji) elektronu,

$n_i = c_i^\dagger c_i$ – liczba obsadzeń i -tego węzła,

t_{ij} – całka przeskoku pomiędzy węzłami i oraz j

U – oddziaływanie kulombowskie na węzle,

$w_i = \{1, 0\}$ w zależności, czy w i -tym węzle znajduje się masywna cząstka

Konfiguracja masywnych cząstek minimalizuje:

- w $T = 0$ – energię stanu podstawowego
- w $T > 0$ – energię swobodną układu



EFEKTY WIELOCIAŁOWE

PRZYKŁADY ZASTOSOWAŃ

- Przejście półprzewodnik–metal w związkach ziem rzadkich (m.in. SmB_6)

[Falicov, Kimball, PRL 22, 997 (1969)]

PRZYKŁADY ZASTOSOWAŃ

- Przejście półprzewodnik–metal w związkach ziem rzadkich (m.in. SmB_6)
[Falicov, Kimball, PRL 22, 997 (1969)]
- Bezspinowa wersja jako przybliżenie modelu Hubbarda
[Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A 276, 238 (1963)]

PRZYKŁADY ZASTOSOWAŃ

- Bezspinowa wersja jako przybliżenie modelu Hubbarda
[Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A 276, 238 (1963)]
- Przejście półprzewodnik–metal w związkach ziem rzadkich (m.in. SmB_6)
[Falicov, Kimball, PRL 22, 997 (1969)]

PRZYKŁADY ZASTOSOWAŃ

- Bezspinowa wersja jako przybliżenie modelu Hubbarda
[Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A 276, 238 (1963)]
- Przejście półprzewodnik–metal w związkach ziem rzadkich (m.in. SmB₆)
[Falicov, Kimball, PRL 22, 997 (1969)]
- Przejście fazowe $\alpha - \gamma$ w cerze (Ce)
[Ramirez, Falicov, PRB 3, 2425 (1971)]
- Statyczna podatność dla spontanicznej polaryzacji
[Subrshmsnym, Barma J.Phys.C 21, L19 (1988)]
- Uporządkowanie CDW [van Dongen, Vollhardt, PRL 65, 1663 (1990)]
- Optyczna przewodność [Moeller, Ruckenstein, PRB 46, 7427 (1992)]
- Rozwinięcie funkcji spektralnej f
[Brandt, Urbanek, Z. Phys. B: Condens. Matter 89, 297 (1992)]
- Podatność ładunkowa [Freerics, Miller, PRB 62, 10022 (2000)]
- Zjawisko Ramana [Freerics, Davereaux, Condens. Matter Phys. 4, 149 (2001)]
- Wiele, wiele innych...

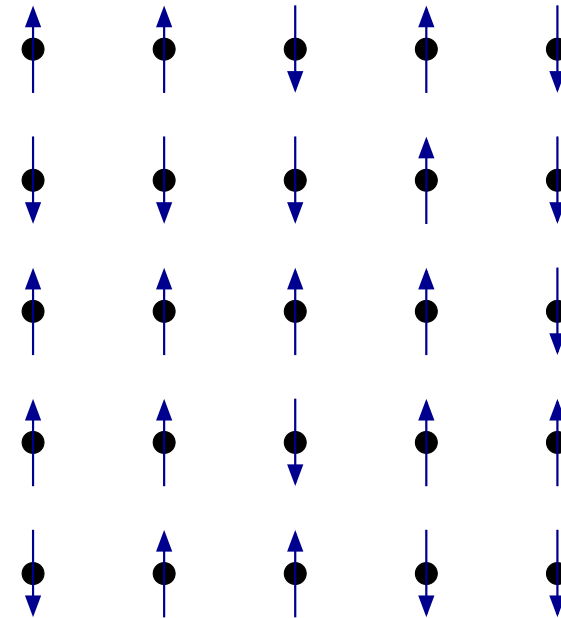
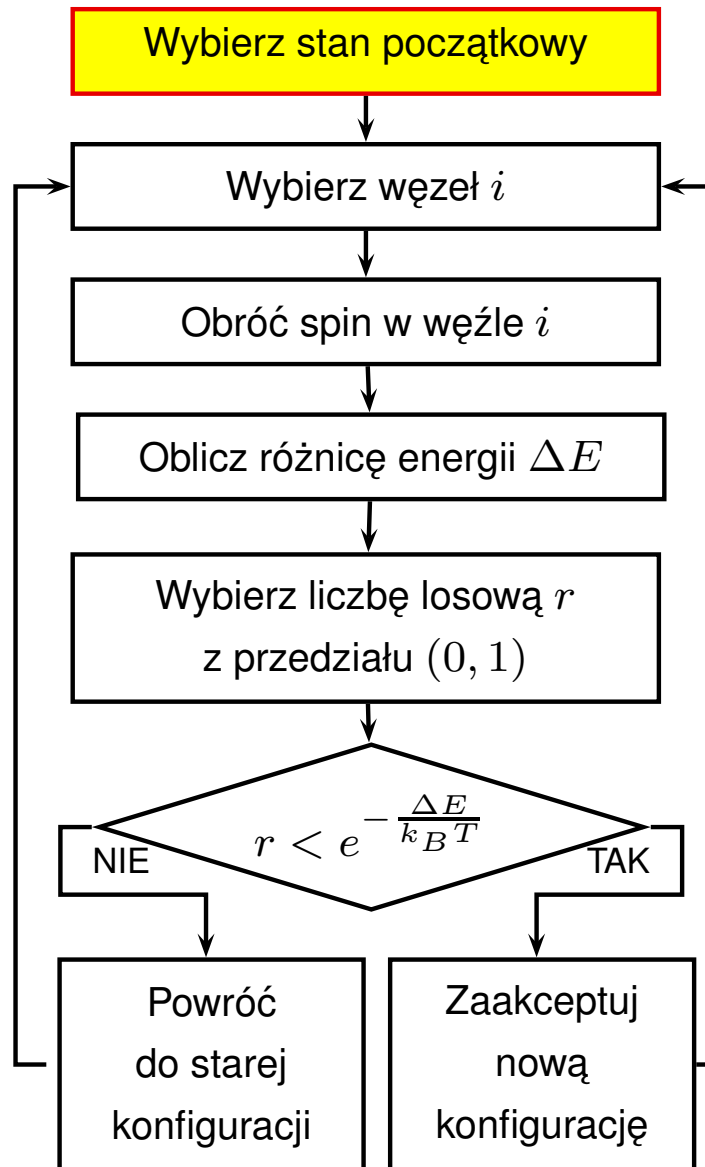
DOKŁADNE WYNIKI

- Dla $U \rightarrow \infty$ model FK można mapować na model Isinga
- Dokładne rozwiązanie w przestrzeni nieskończenie wymiarowej
- Dla symetrycznego przypadku, gdy koncentracja jonów i elektronów wynosi 0.5 w stanie podstawowym jony tworzą konfigurację szachownicy, dla każdej wartości oddziaływania kulombowskiego
- Periodyczne uporządkowanie oraz separacja fazowa, dla szczególnych wartości koncentracji jonów i elektronów

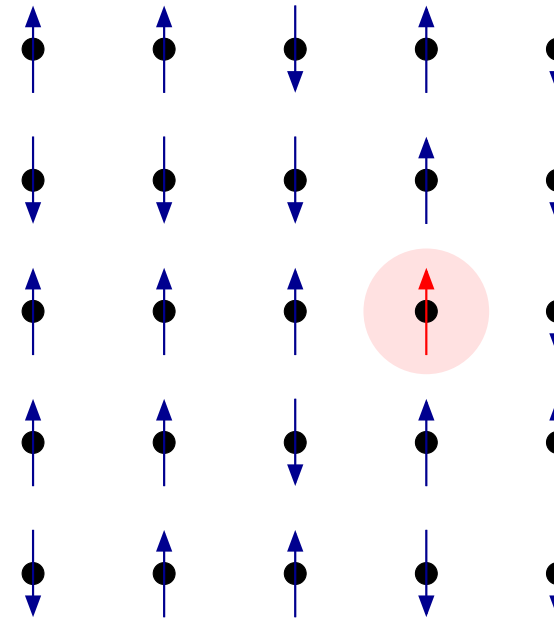
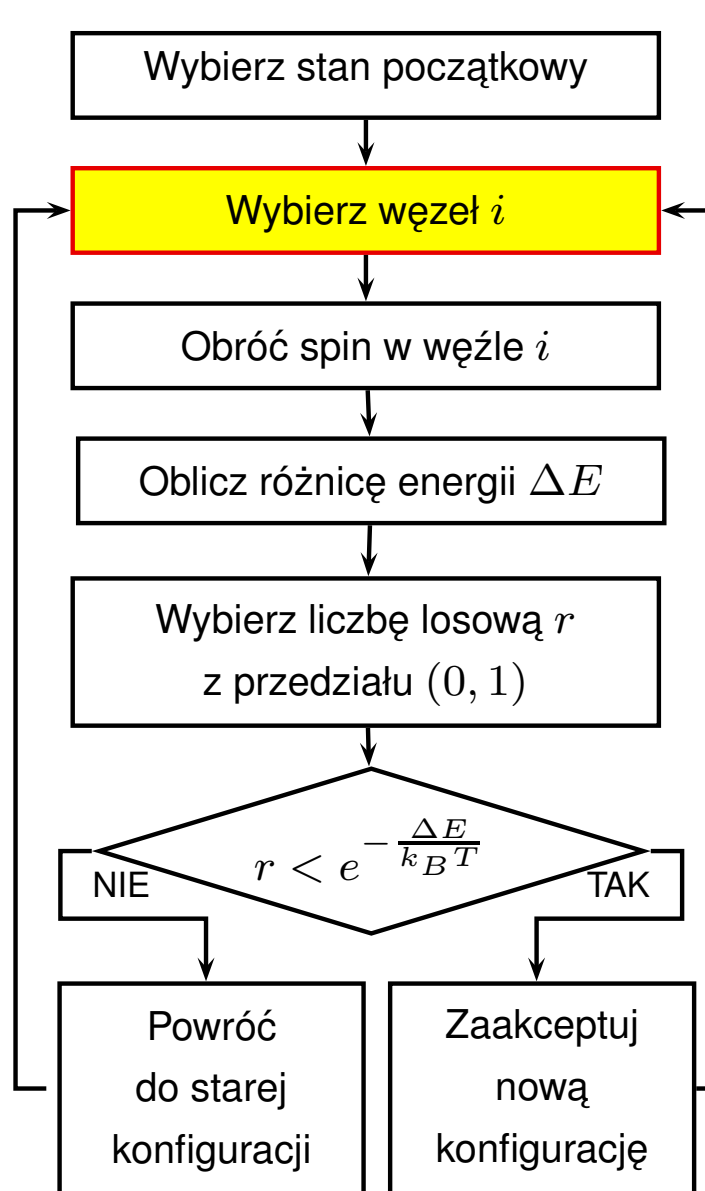
METODY ANALIZY MODELU

- MFT [Falicov, Kimball PRL 22,997 (1969), Ramirez PRB 2,3383 (1970)]
- CPA [Plischke, PRL 28, 361 (1972)]
- DMFT [Schiller PRB 60, 15660 (1999), Shvaika PRB 67, 075101 (2003)]
(dokładne rozwiązanie w $d \rightarrow \infty$)
- DCA [Hettler, Mukherjee, Jarrel PRB 61, 12739 (2000)]
- Monte Carlo

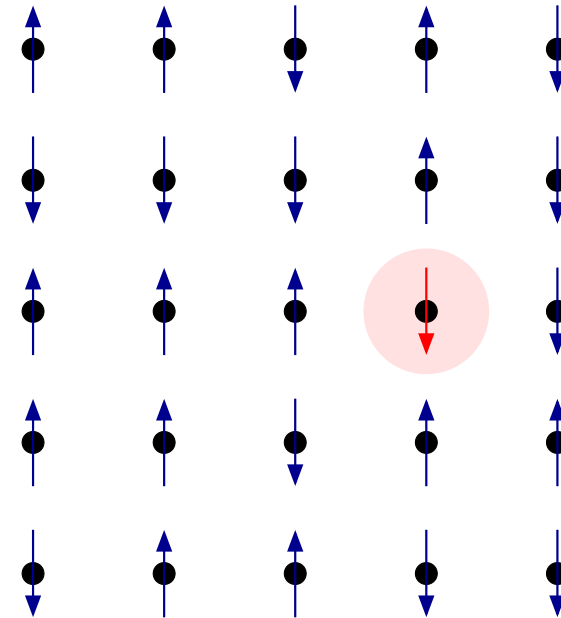
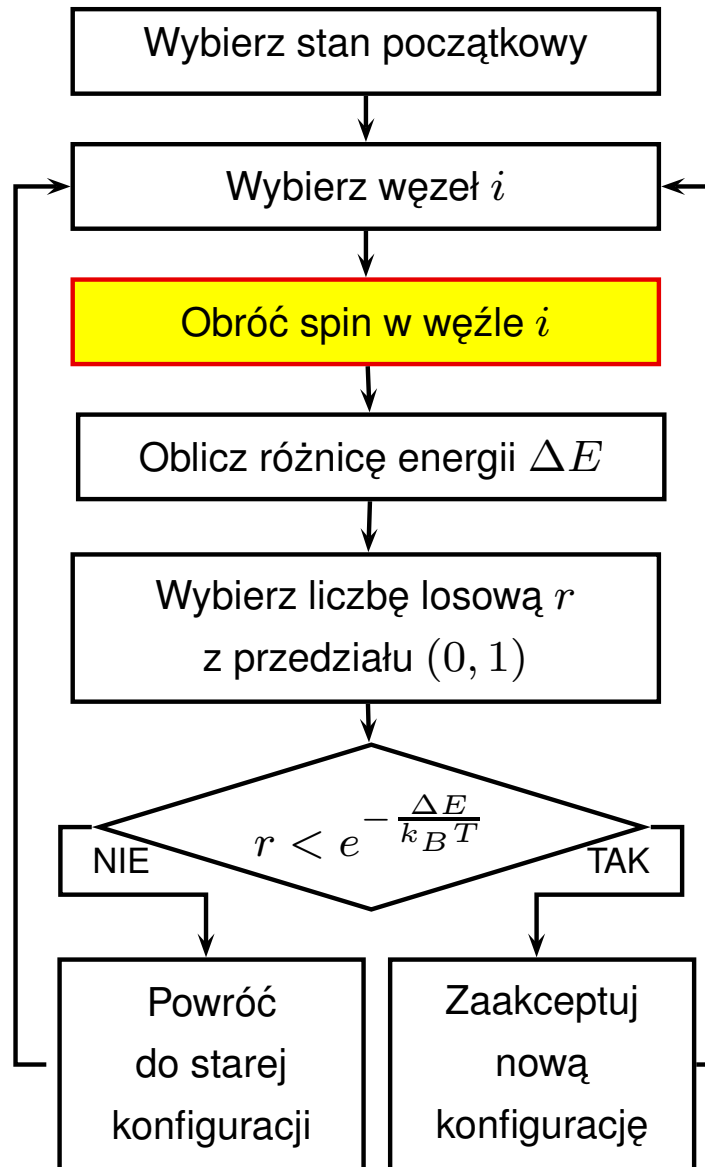
KLASYCZNY ALGORYTM METROPOLISA



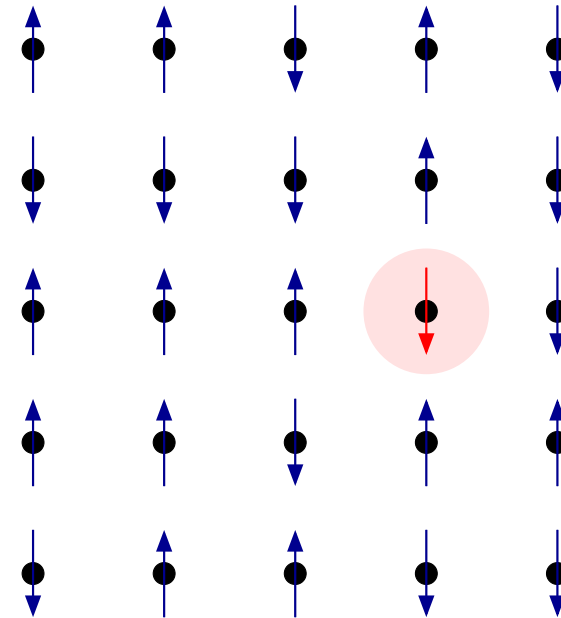
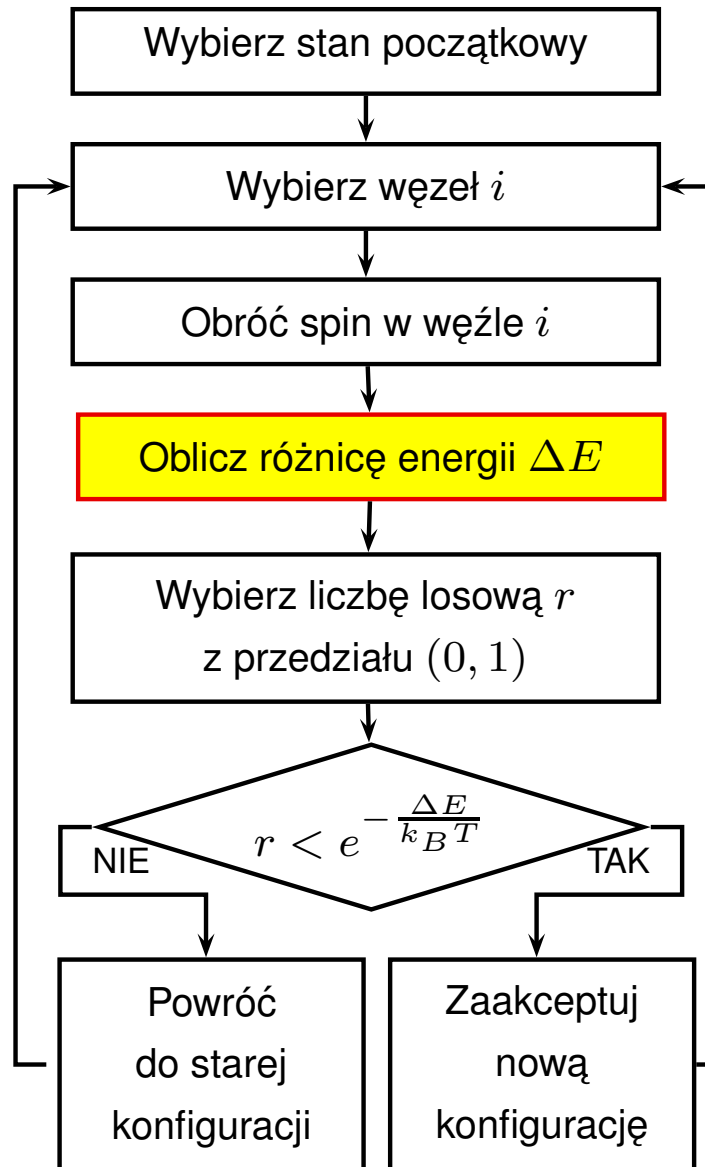
KLASYCZNY ALGORYTM METROPOLISA



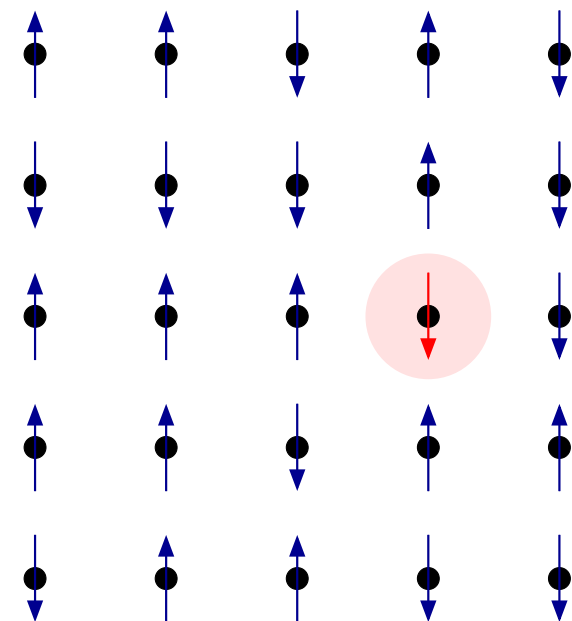
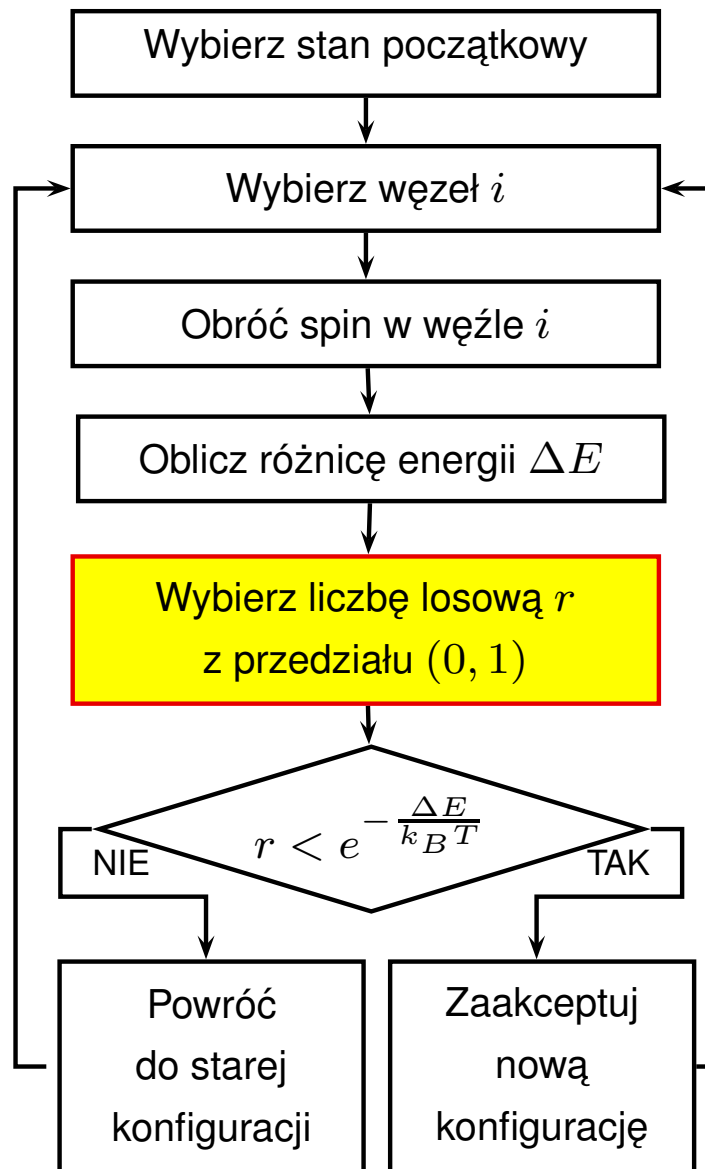
KLASYCZNY ALGORYTM METROPOLISA



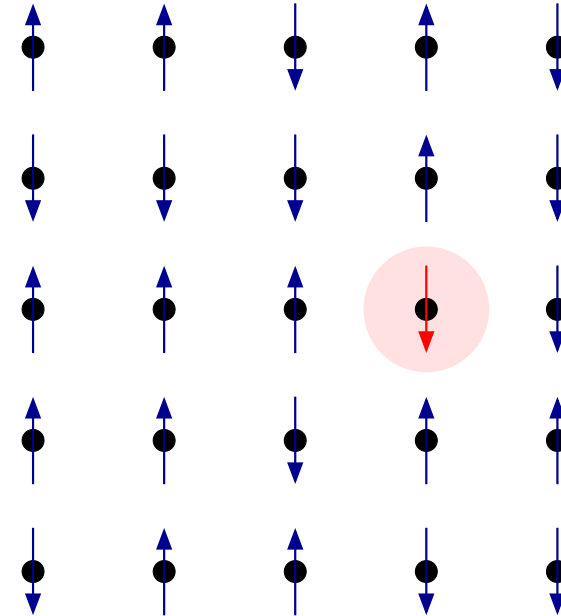
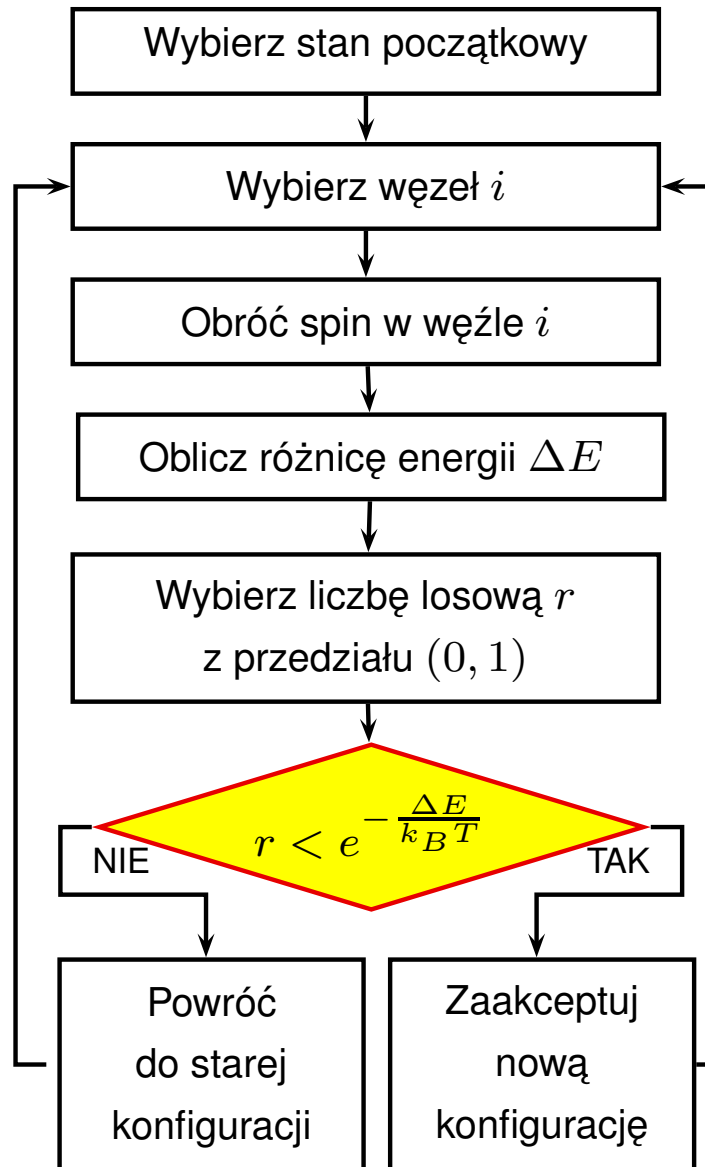
KLASYCZNY ALGORYTM METROPOLISA



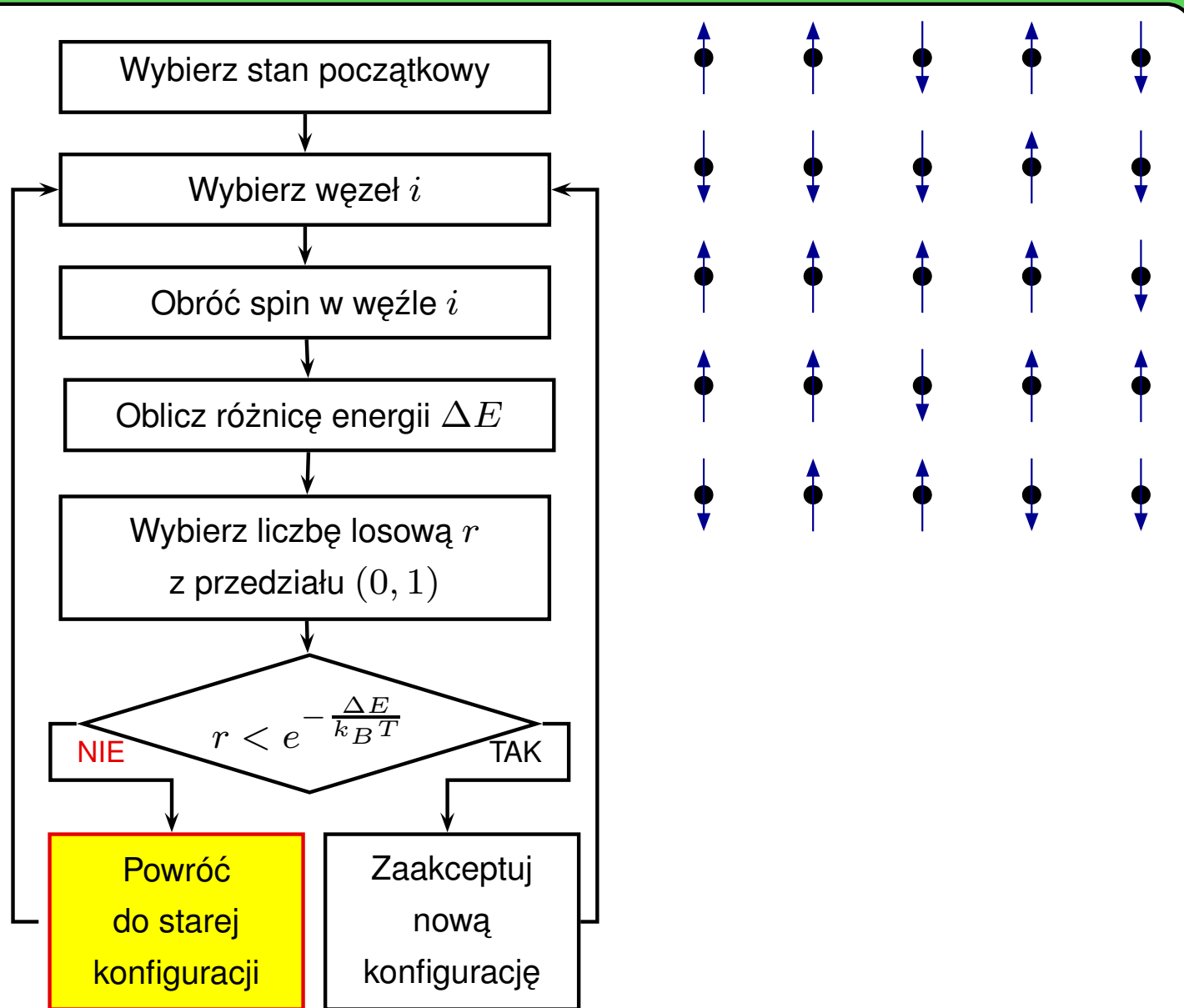
KLASYCZNY ALGORYTM METROPOLISA



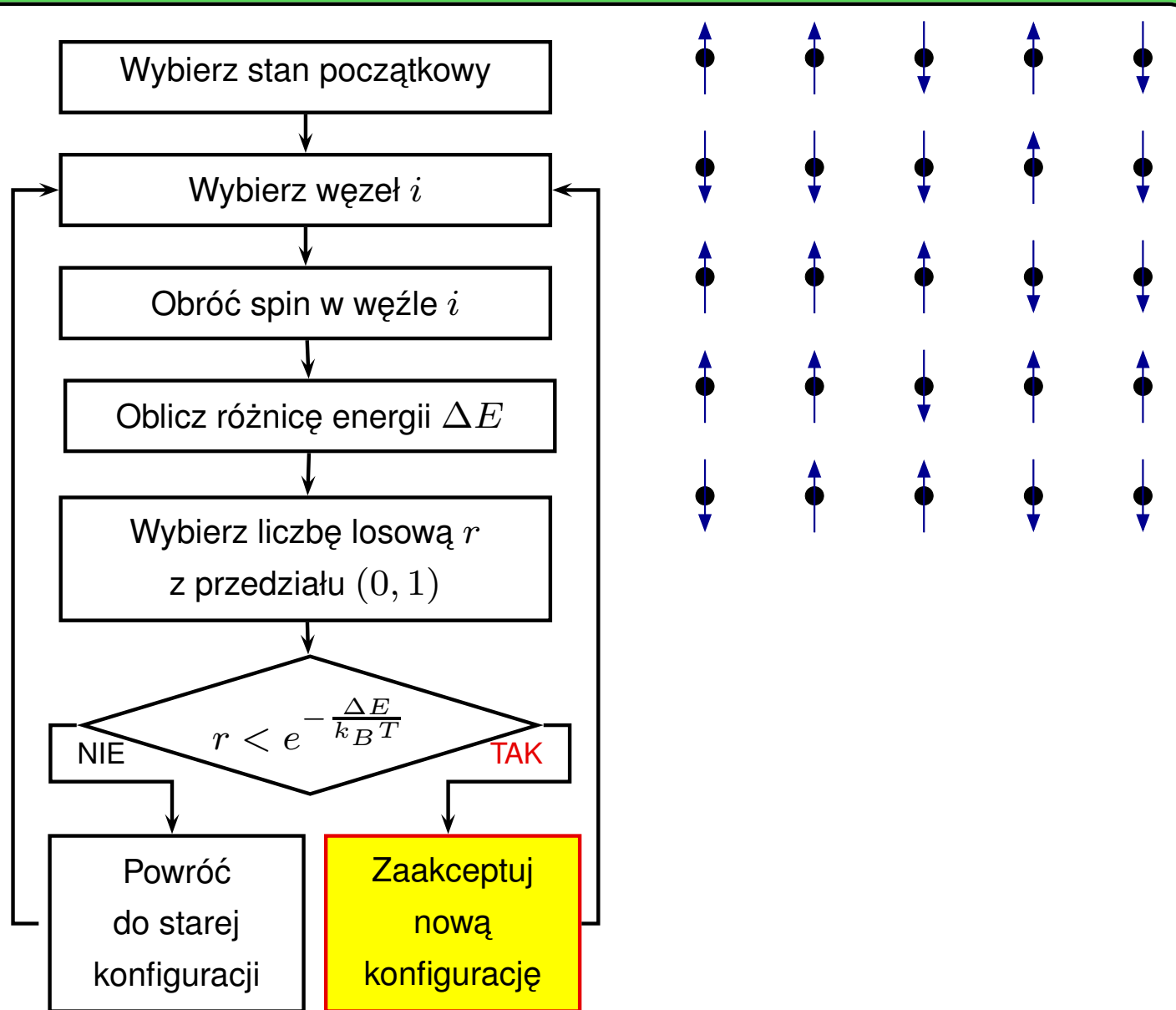
KLASYCZNY ALGORYTM METROPOLISA



KLASYCZNY ALGORYTM METROPOLISA



KLASYCZNY ALGORYTM METROPOLISA



METODA SYMULACJI^a

Punktem wyjścia jest **suma statystyczna**:

$$Z = \sum_C \text{Tr}_e e^{-\beta(H(C) - \mu N)}$$

$H(C)$ – Hamiltonian FK dla ustalonej jonowej konfiguracji C

\sum_C – sumowanie po jonowych konfiguracjach

Tr_e – ślad po fermionowych stopniach swobody

$$\beta = (k_B T)^{-1}$$

N – operator całkowitej liczby elektronów

Dla konfiguracji jonów C hamiltonian $H(C)$ jest diagonalizowany numerycznie. Sumę statyczną można wtedy zapisać jako:

$$Z = \sum_C \prod_n (1 + e^{-\beta(E_n(C) - \mu)}),$$

gdzie $E_n(C)$ jest n -tą wartością własną hamiltonianu $H(C)$

^aM.Maśka, K.Czajka cond-mat/0504533

METODA SYMULACJI cd.

Wprowadzając **energie swobodną**

$$F_e(C) = -\frac{1}{\beta} \sum_n \log(1 + e^{-\beta(E_n(C) - \mu)})$$

suma statystyczna przyjmuje postać

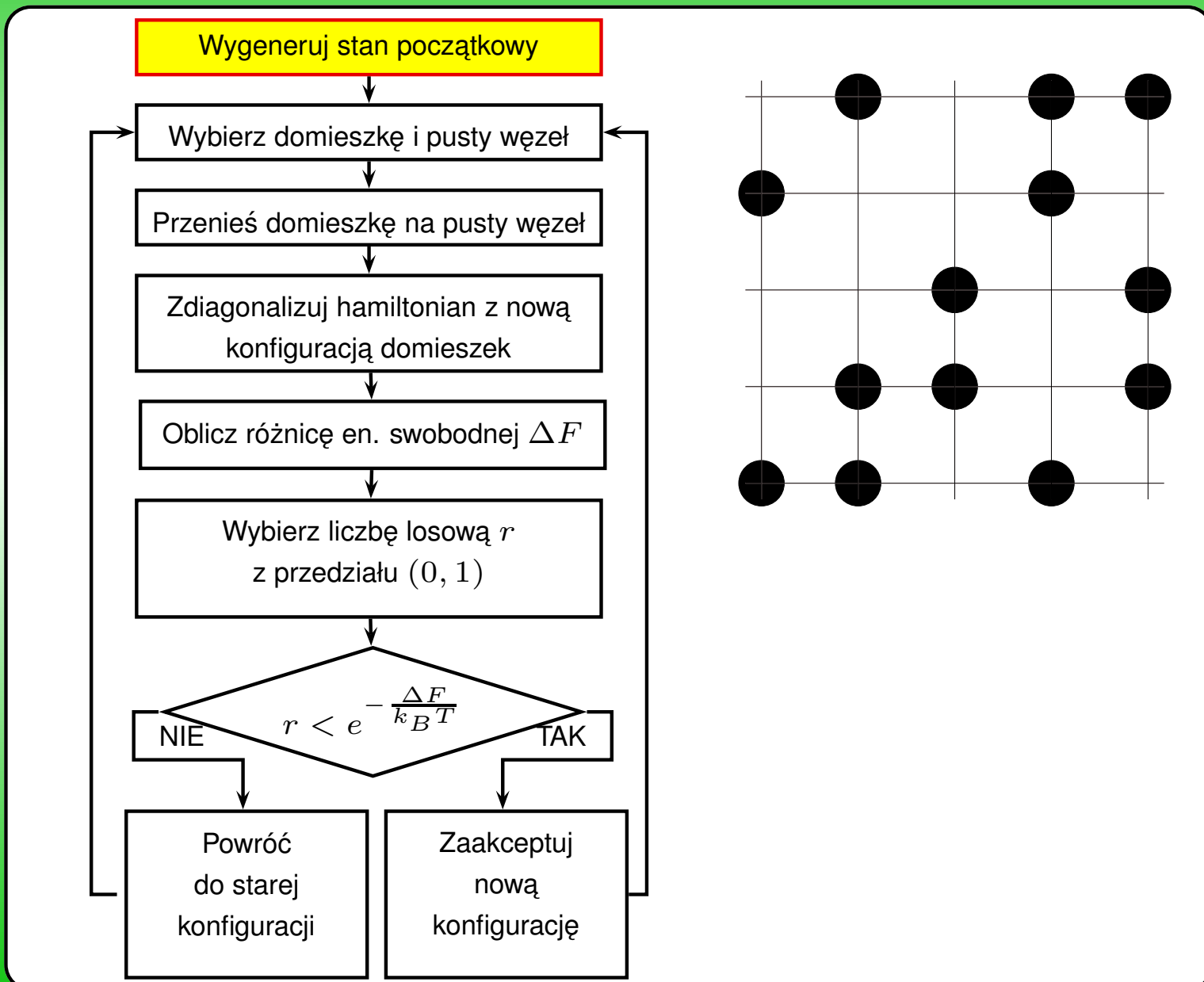
$$Z = \sum_C e^{-\beta F_e(C)}$$

Wagi statystyczne można obliczyć ze wzoru:

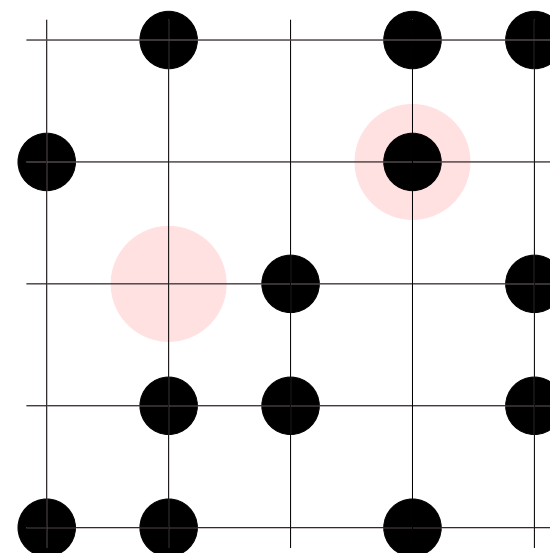
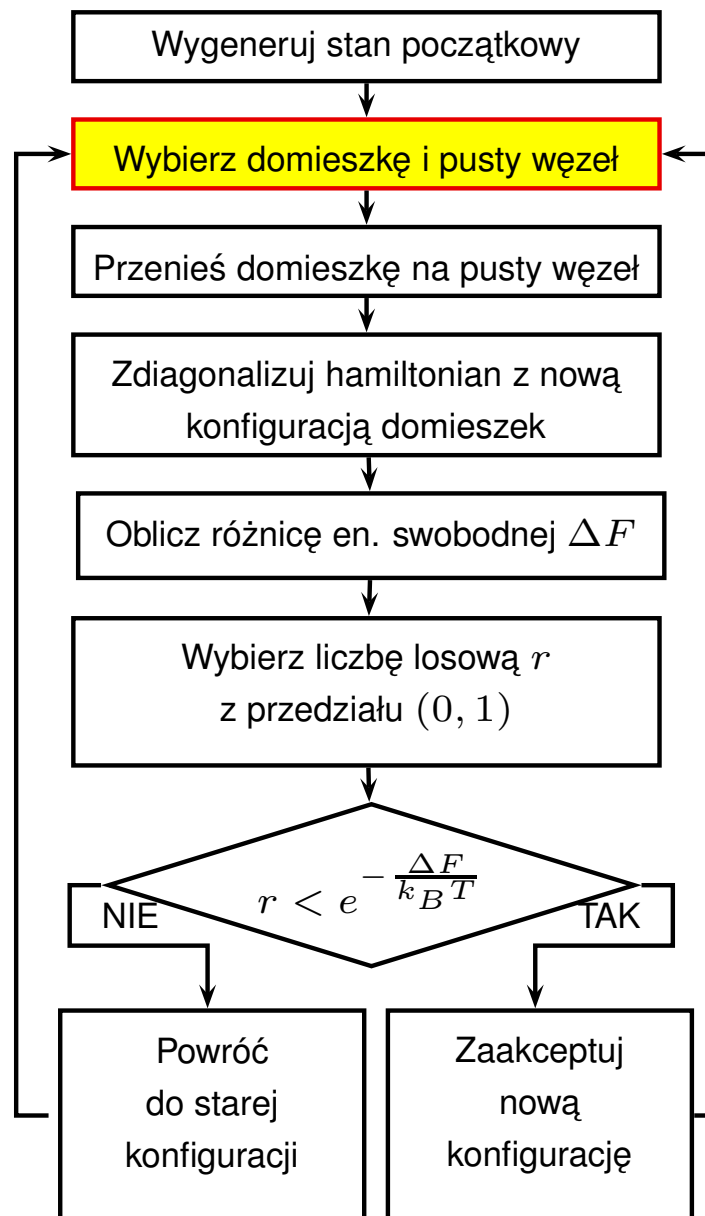
$$w(C) = \frac{1}{Z} e^{-\beta F_e(C)}$$

**MOŻNA STOSOWAĆ KLASYCZNY SCHEMAT METROPOLISA,
ZASTĘPUJĄC ENERGIĘ WEWNĘTRZNA PRZEZ
ENERGIĘ SWOBODNĄ ELEKTRONÓW**

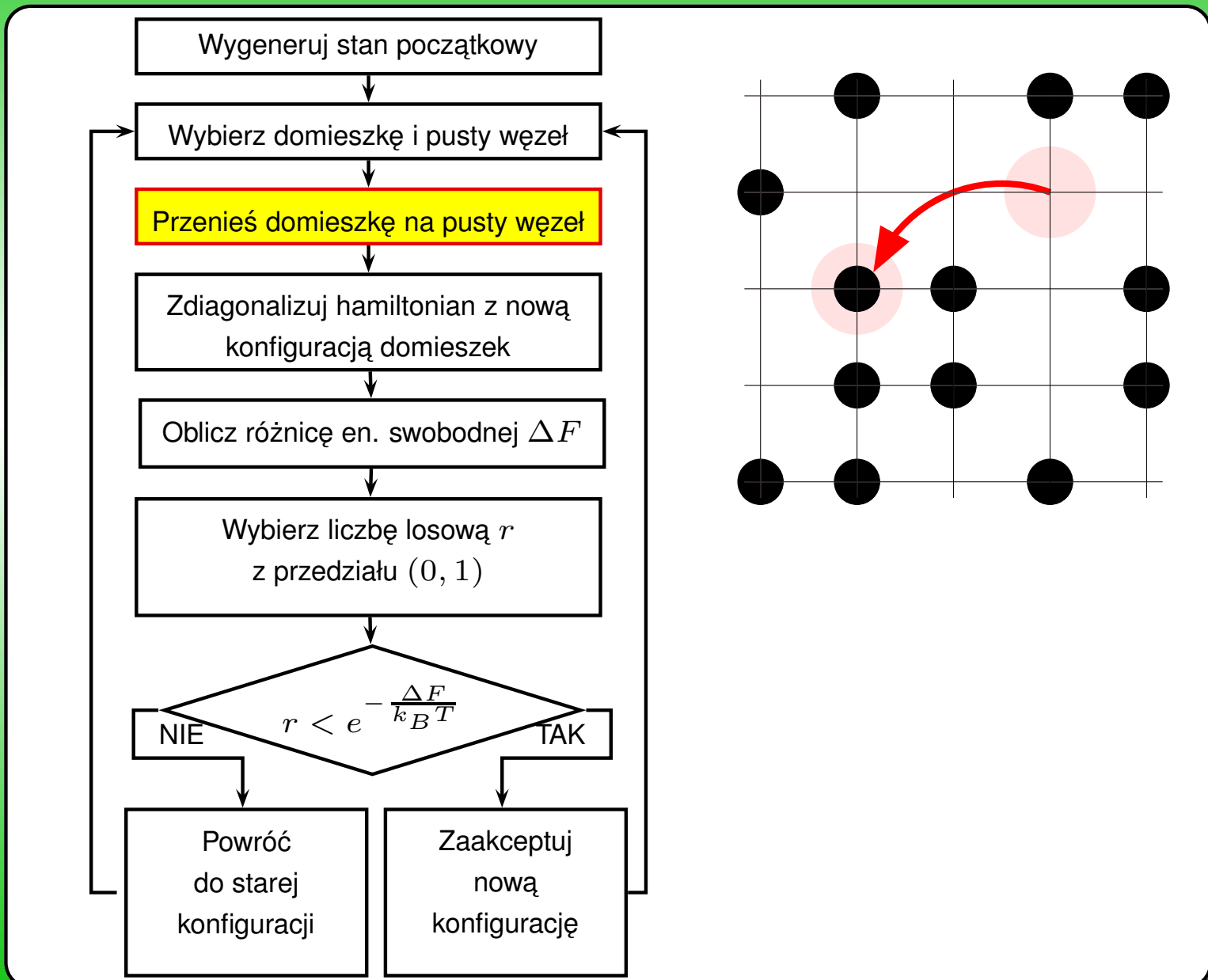
ALGORYTM METROPOLISA DLA MODELU FK



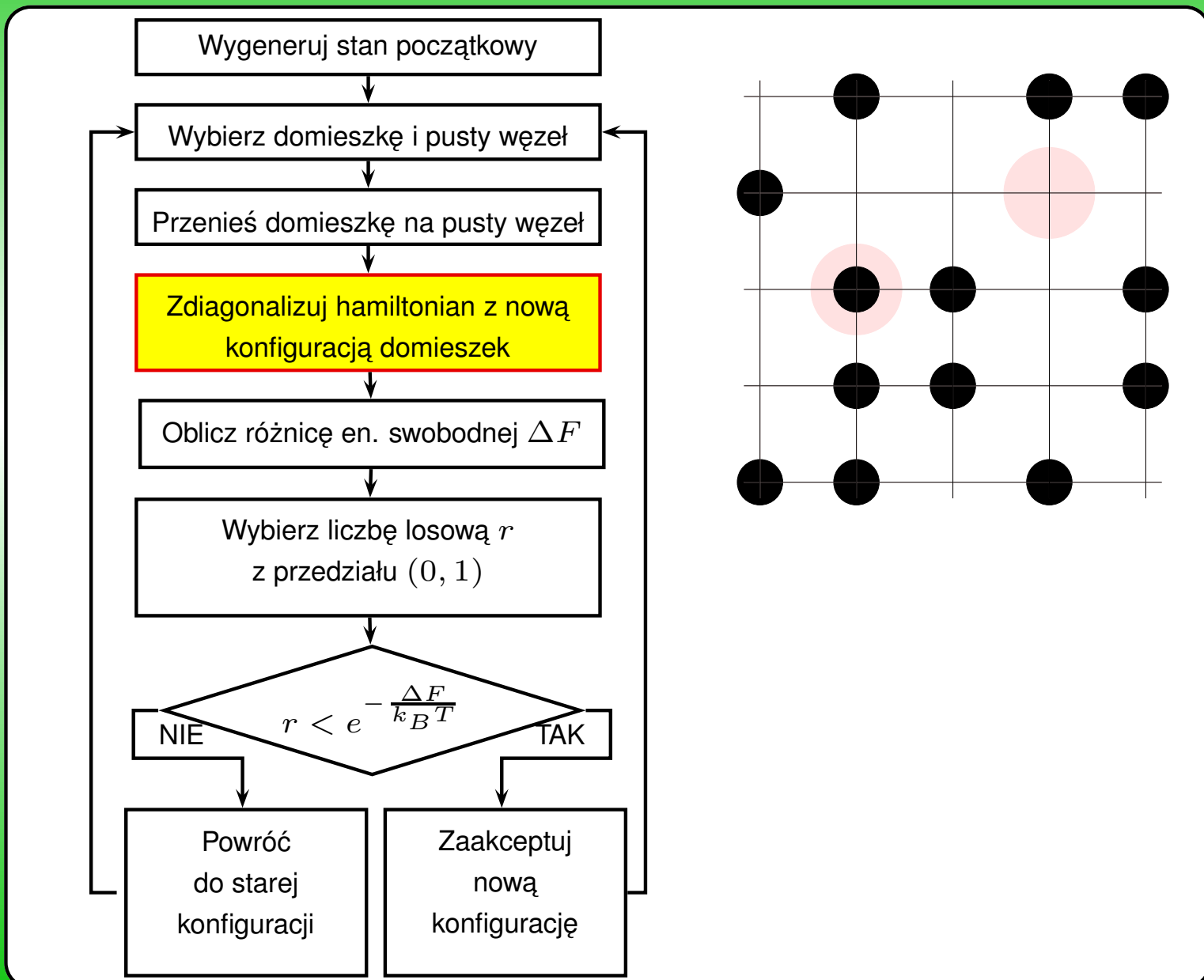
ALGORYTM METROPOLISA DLA MODELU FK



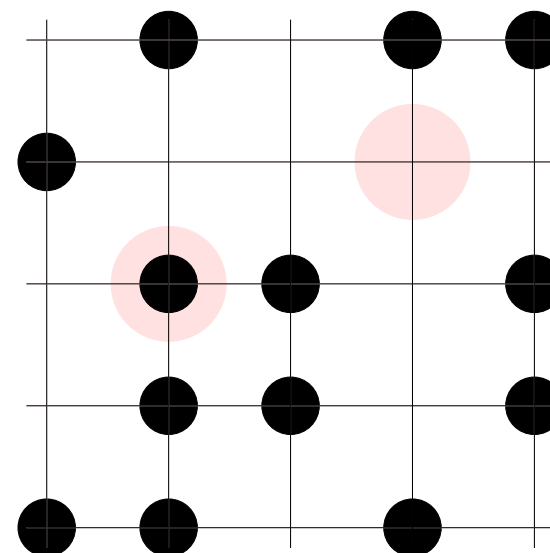
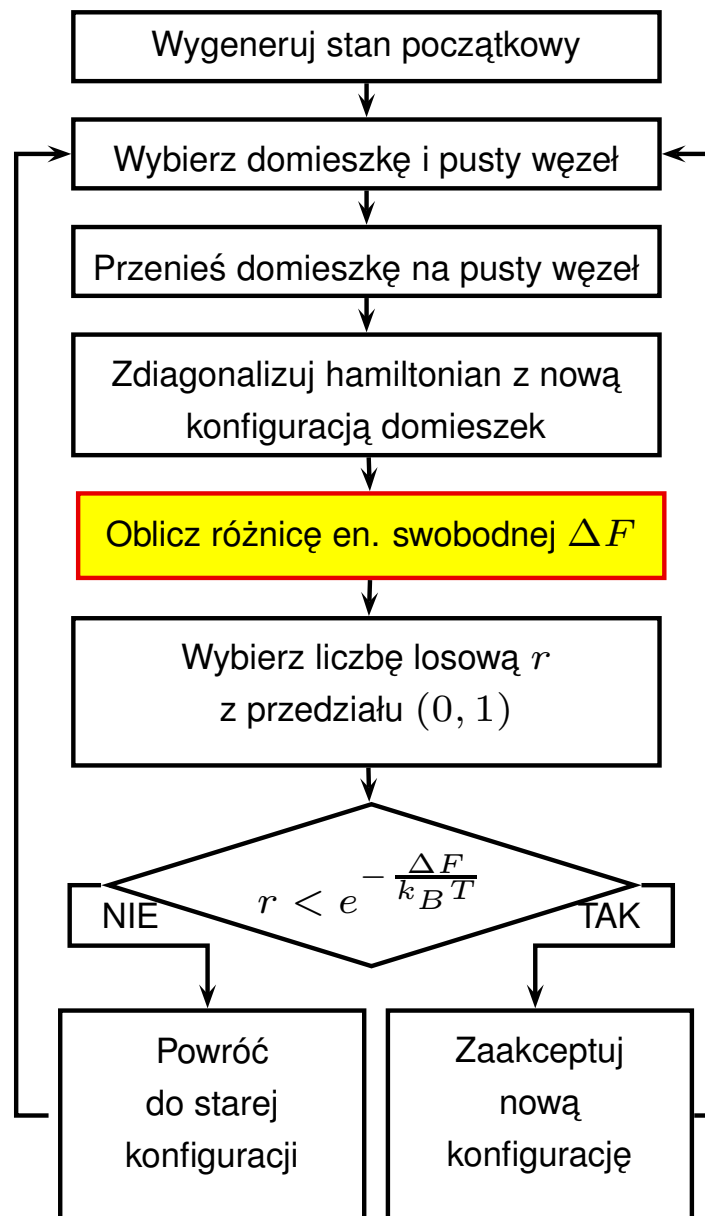
ALGORYTM METROPOLISA DLA MODELU FK



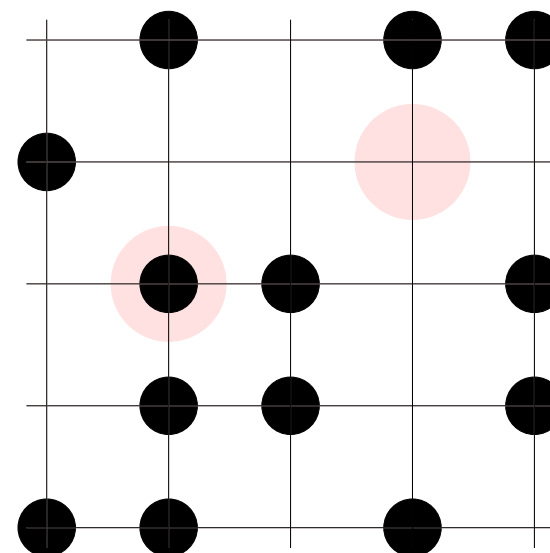
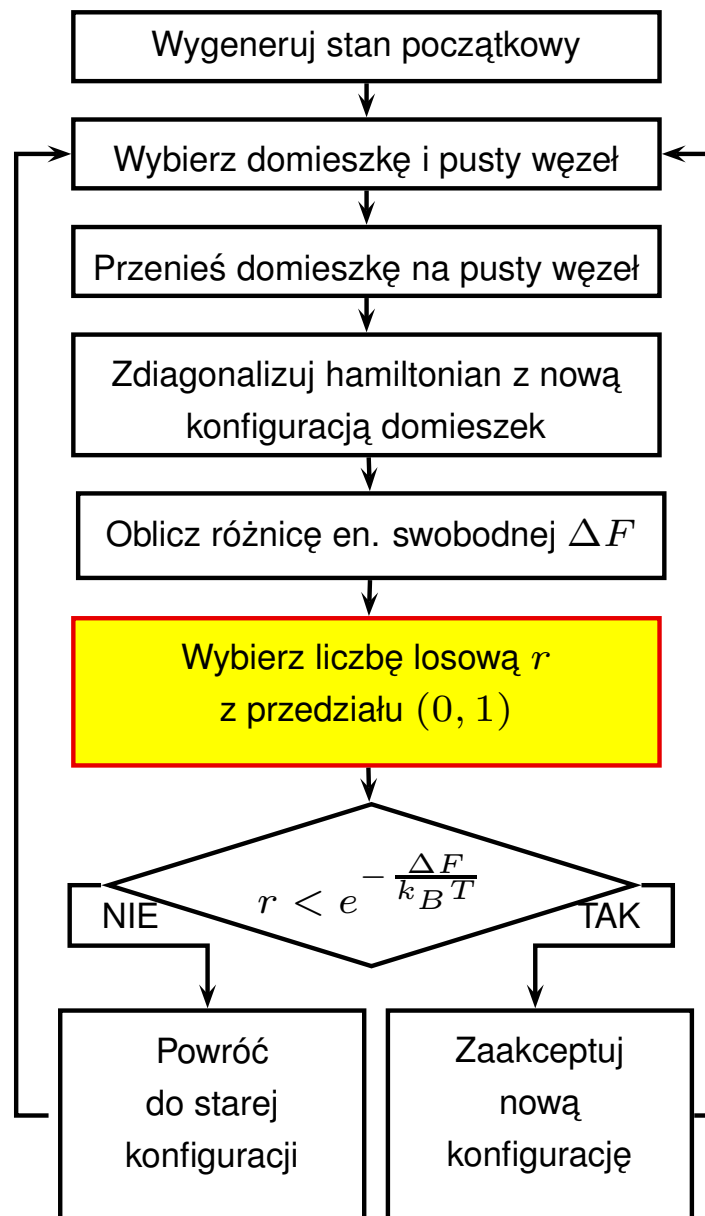
ALGORYTM METROPOLISA DLA MODELU FK



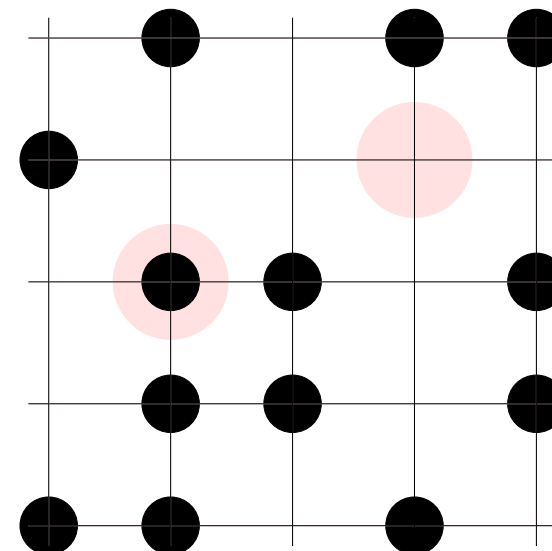
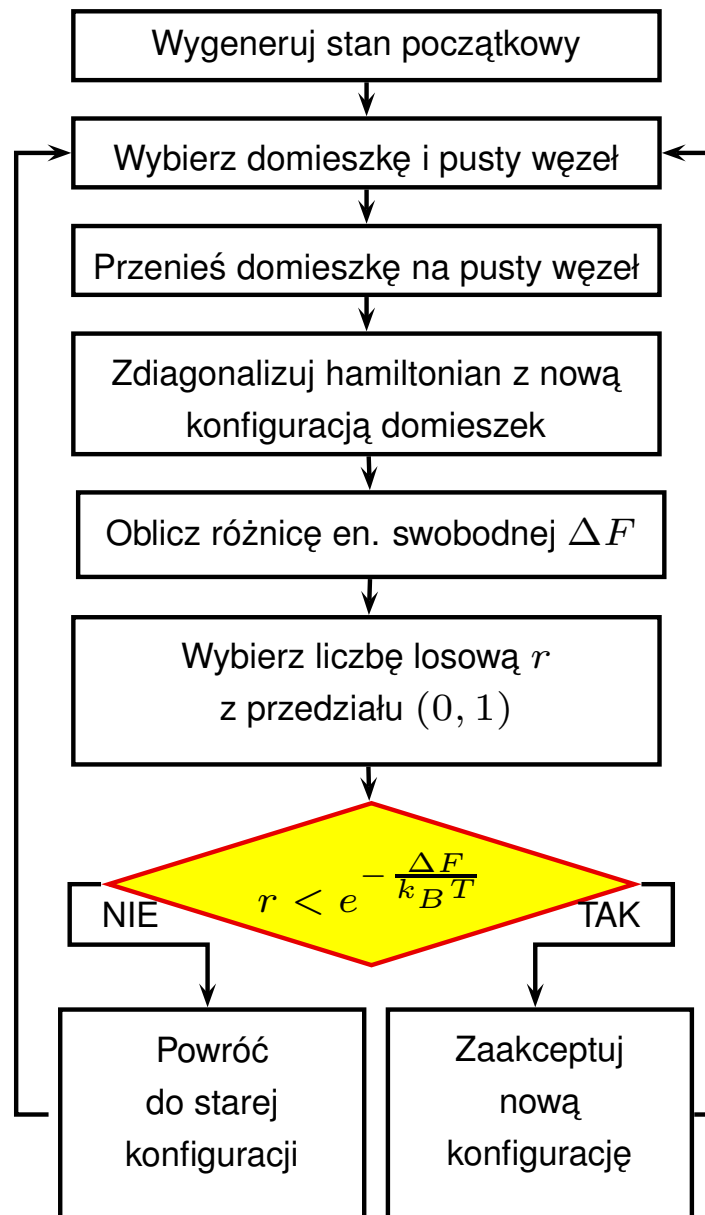
ALGORYTM METROPOLISA DLA MODELU FK



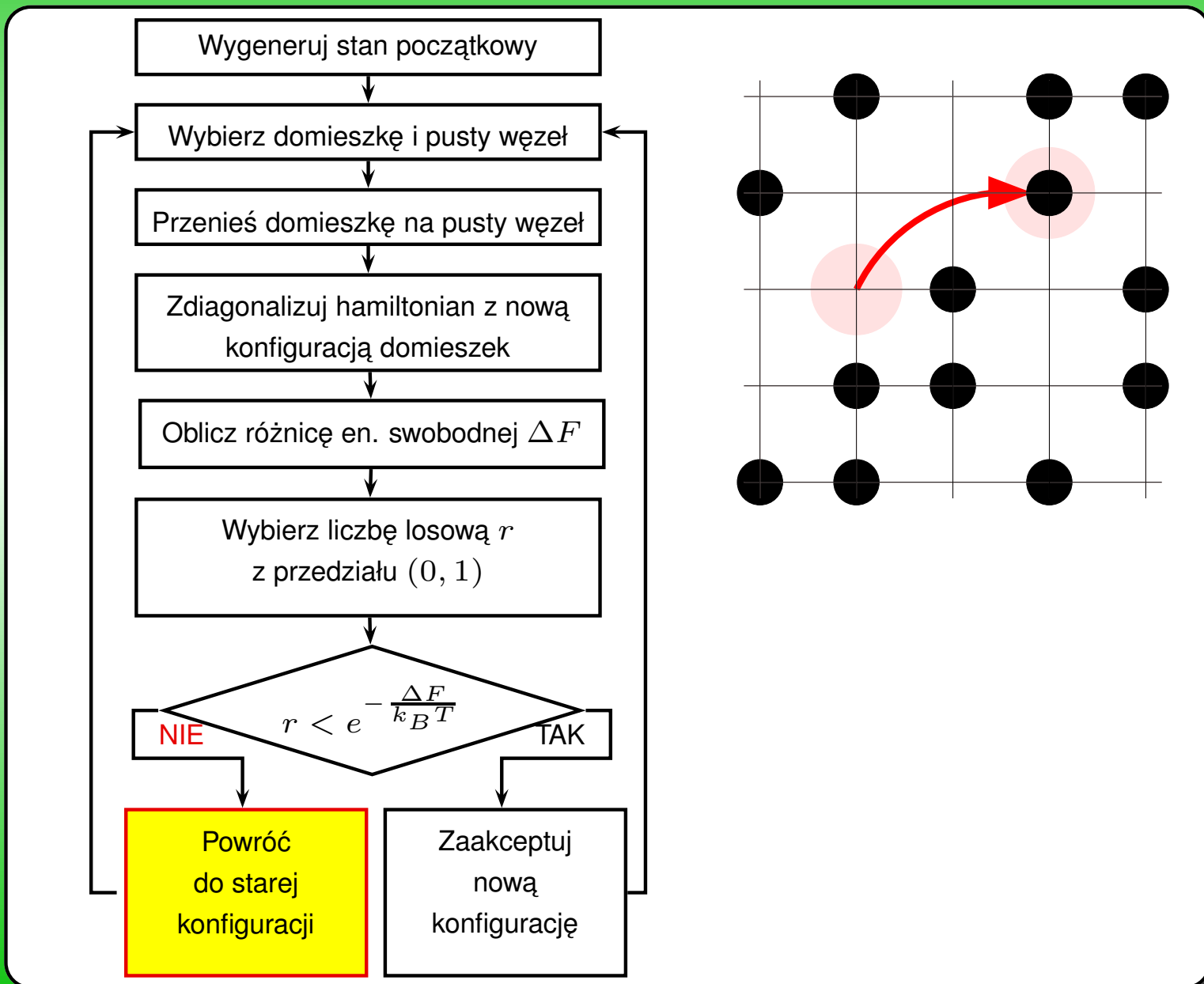
ALGORYTM METROPOLISA DLA MODELU FK



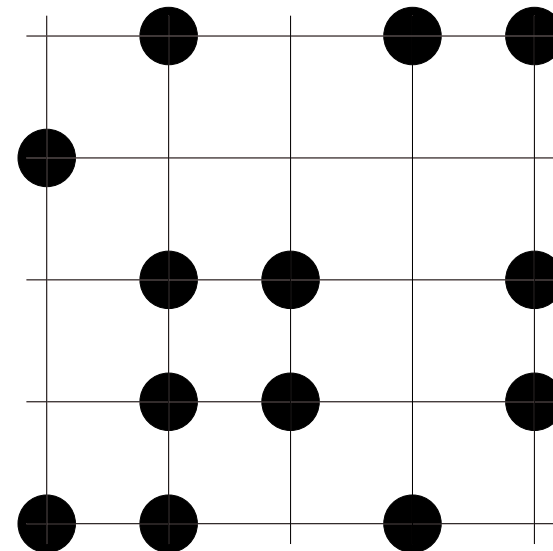
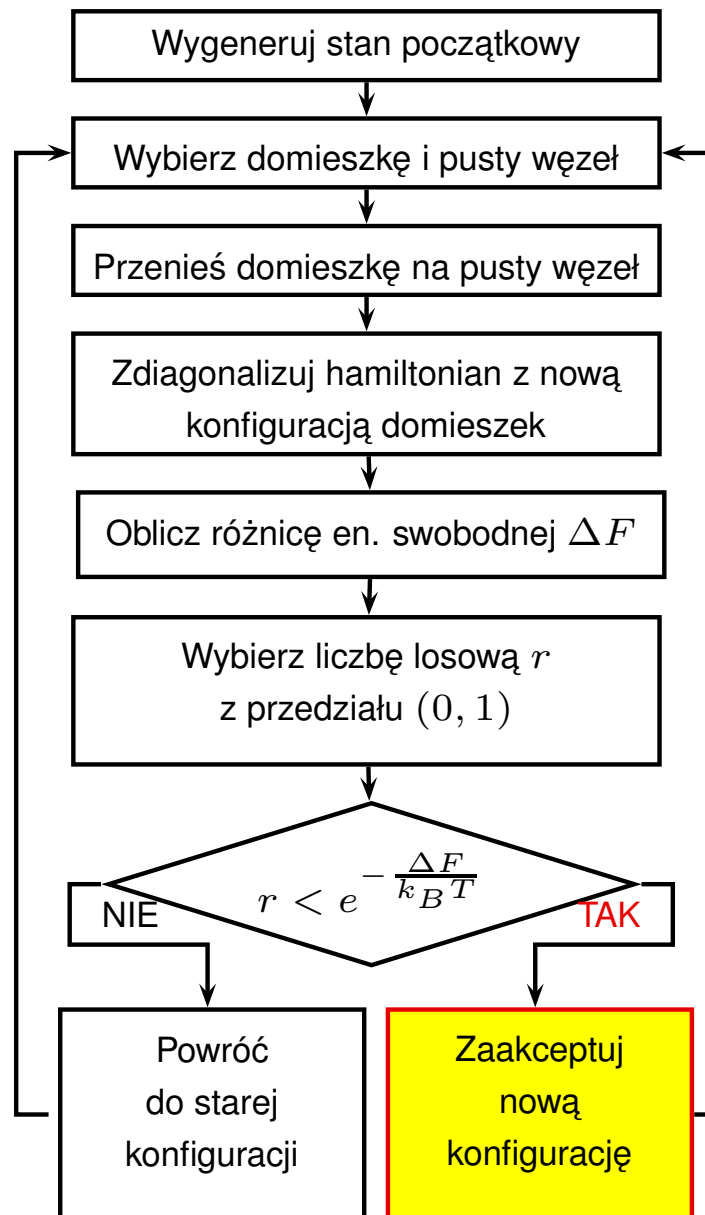
ALGORYTM METROPOLISA DLA MODELU FK



ALGORYTM METROPOLISA DLA MODELU FK



ALGORYTM METROPOLISA DLA MODELU FK



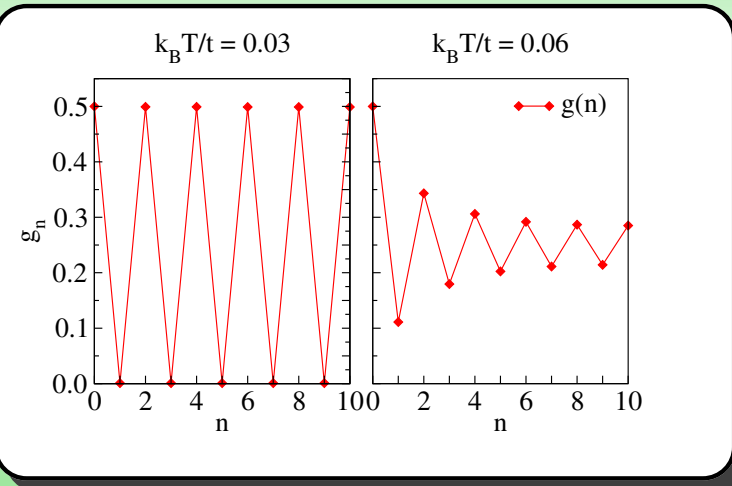
WYZNACZNIENIE FUNKCJI KORELACYJNEJ

Funkcja korelacyjna gęstość–gęstość dla jonów:

$$g_n = \frac{1}{4N} \sum_{i=1}^N \sum_{\tau_1, \tau_2 = \pm n} w(r_i) w(r_i + \tau_1 x + \tau_2 y)$$

$$w(r_i) = w_i,$$

x, y – wektory jednostowe wzdłuż osi x i y .



WYZNACZNIENIE FUNKCJI KORELACYJNEJ

Funkcja korelacyjna gęstość–gęstość dla jonów:

$$g_n = \frac{1}{4N} \sum_{i=1}^N \sum_{\tau_1, \tau_2 = \pm n} w(r_i) w(r_i + \tau_1 x + \tau_2 y)$$

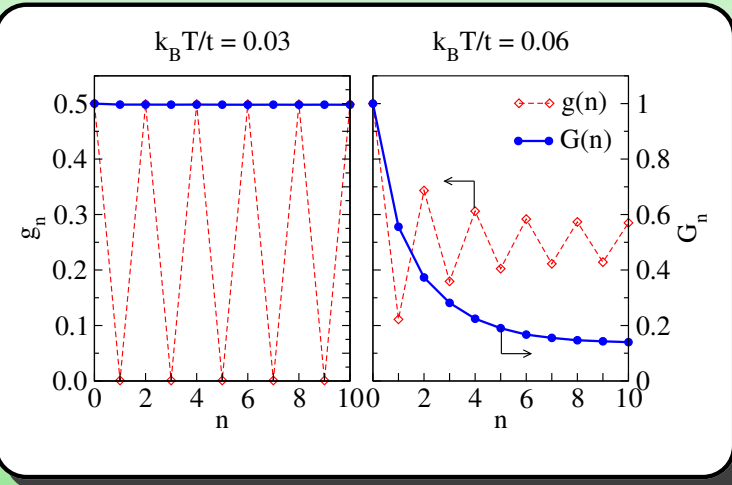
$$w(r_i) = w_i,$$

x, y – wektory jednostowe wzdłuż osi x i y .

Znormalizowana funkcja G_n :

$$G_n = (-1)^n 4(g_n - \rho_i^2)$$

ρ_i – koncentracja jonów.



CIEPŁO WŁAŚCIWE I PODATNOŚĆ

Ciepło właściwe można otrzymać z fluktuacji energii wewnętrznej

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{k_B T^2}$$

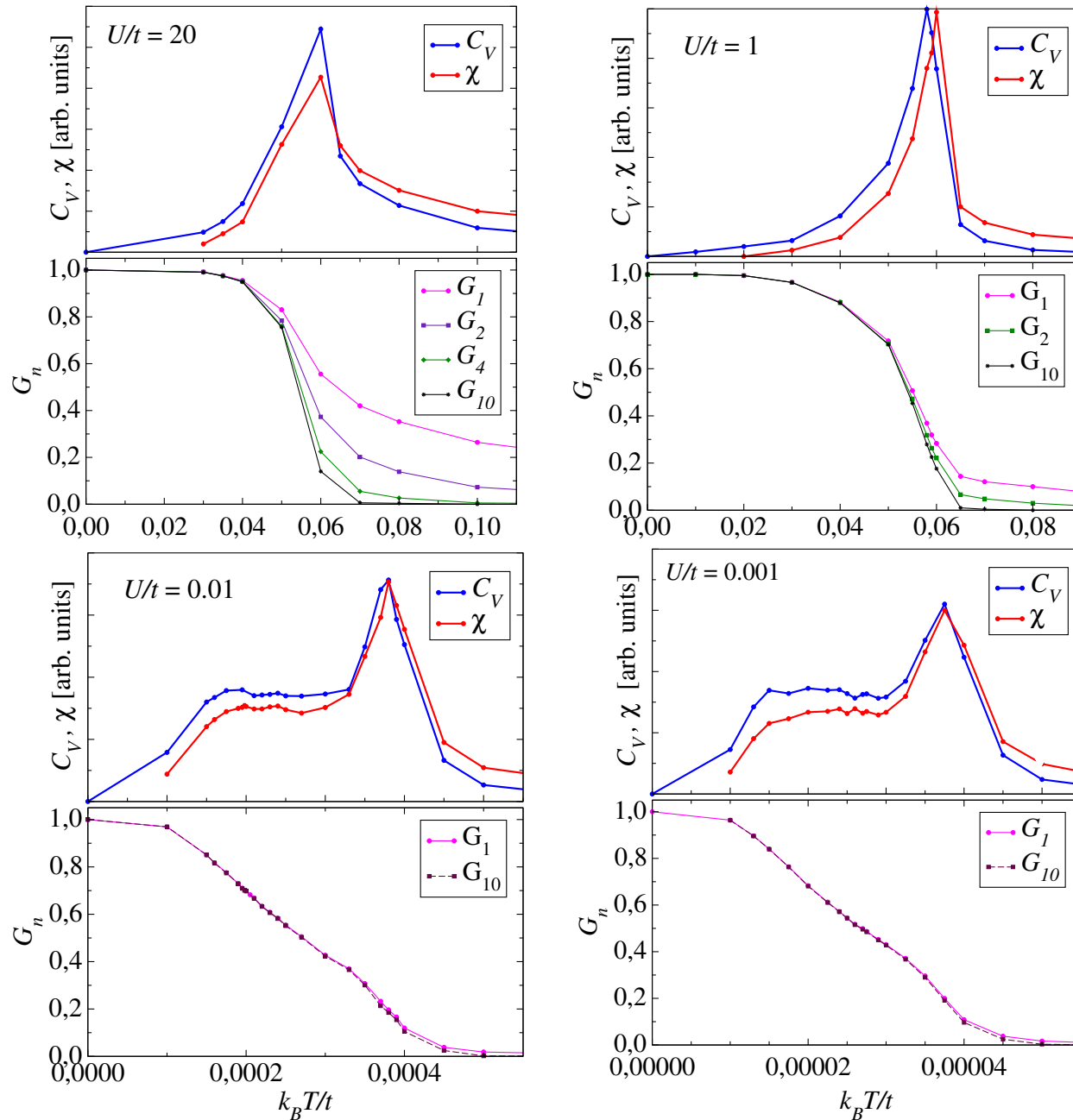
Podatność CDW

$$\chi = \frac{\langle g_1^2 \rangle - \langle g_1 \rangle^2}{k_B T}$$

$\langle \dots \rangle$ oznacza uśrednianie po konfiguracjach zaakceptowanych w algorytmie Metropolis'a.

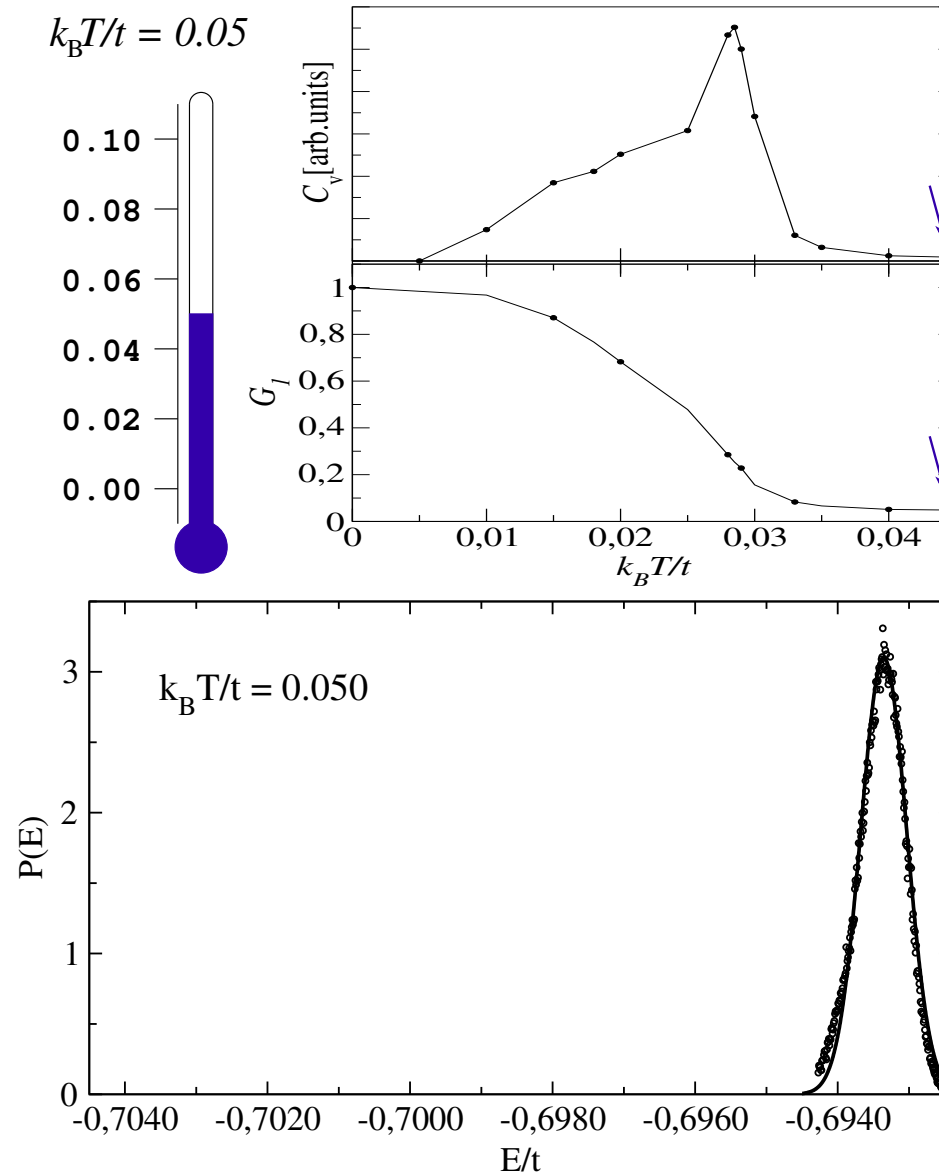
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

Ciepło właściwe, podatność CDW i funkcja korelacyjna



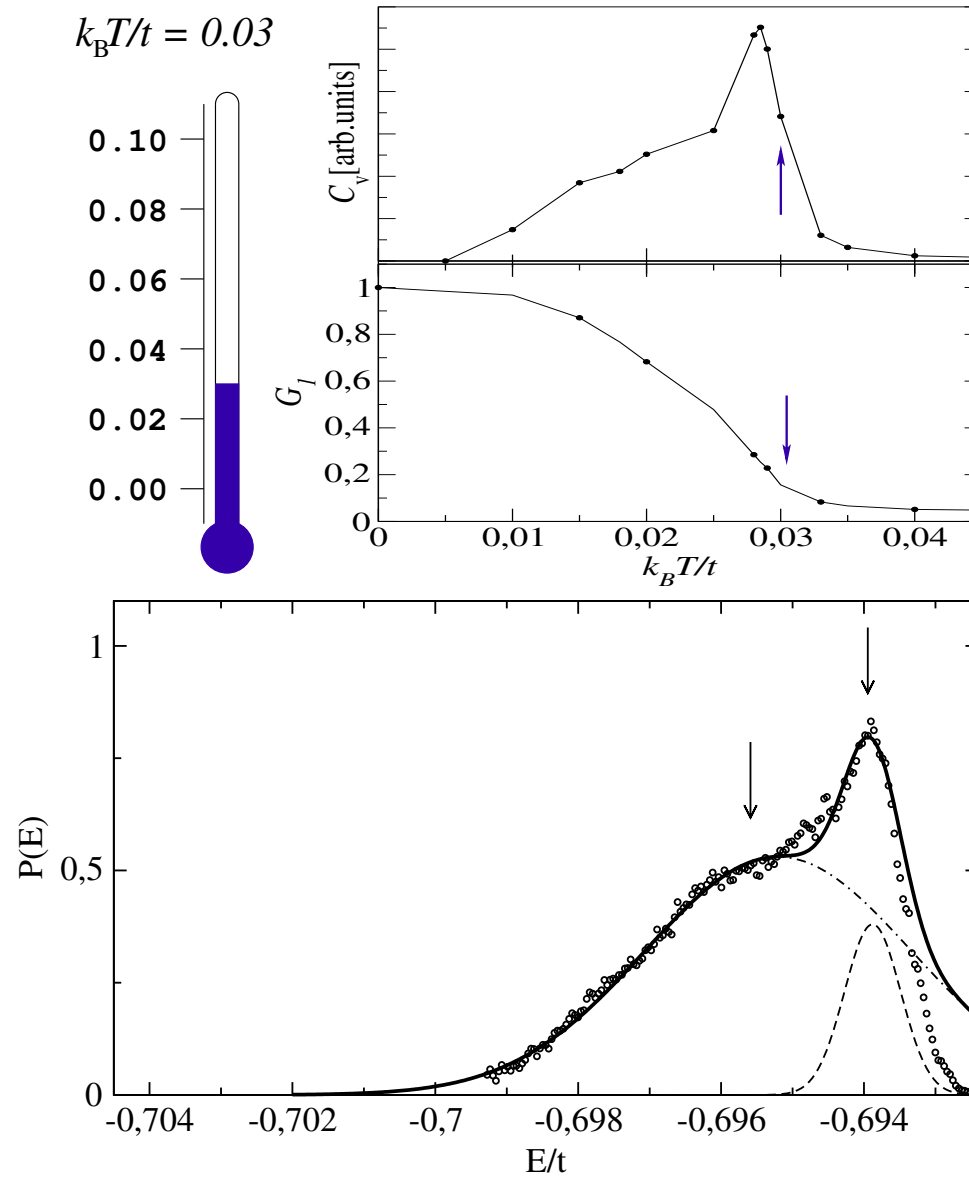
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

Identyfikacja przejścia I-go rodzaju $U/t = 0.5$



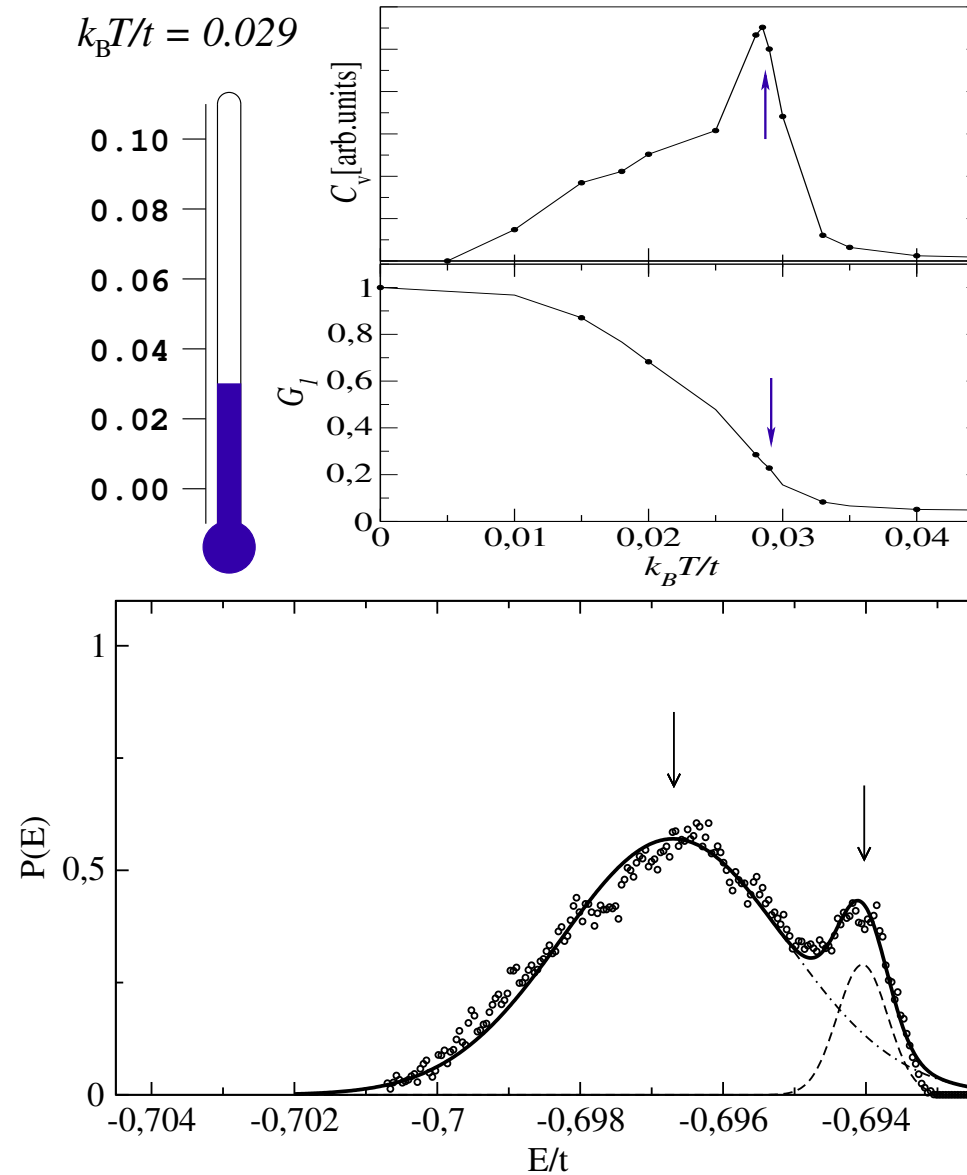
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

Identyfikacja przejścia I-go rodzaju $U/t = 0.5$



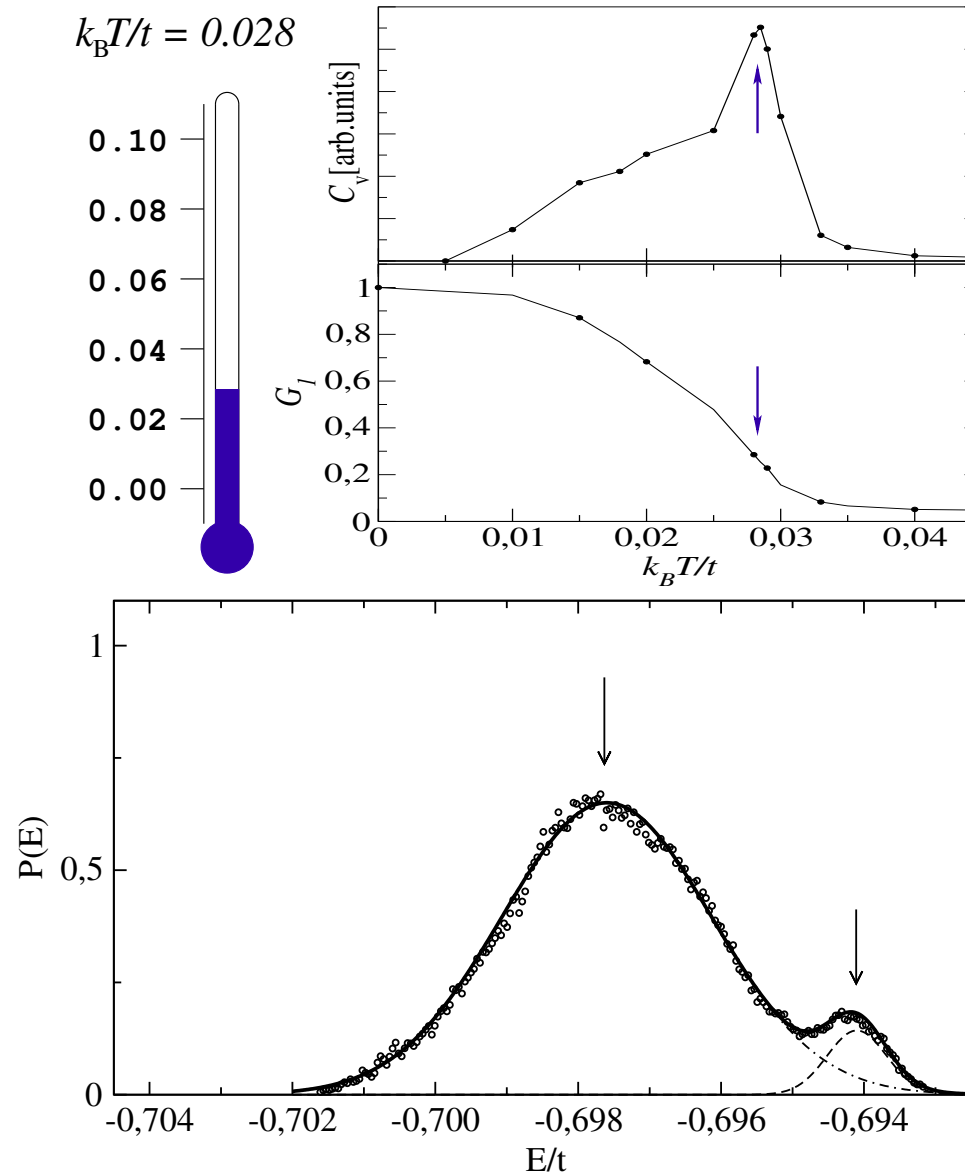
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

Identyfikacja przejścia I-go rodzaju $U/t = 0.5$



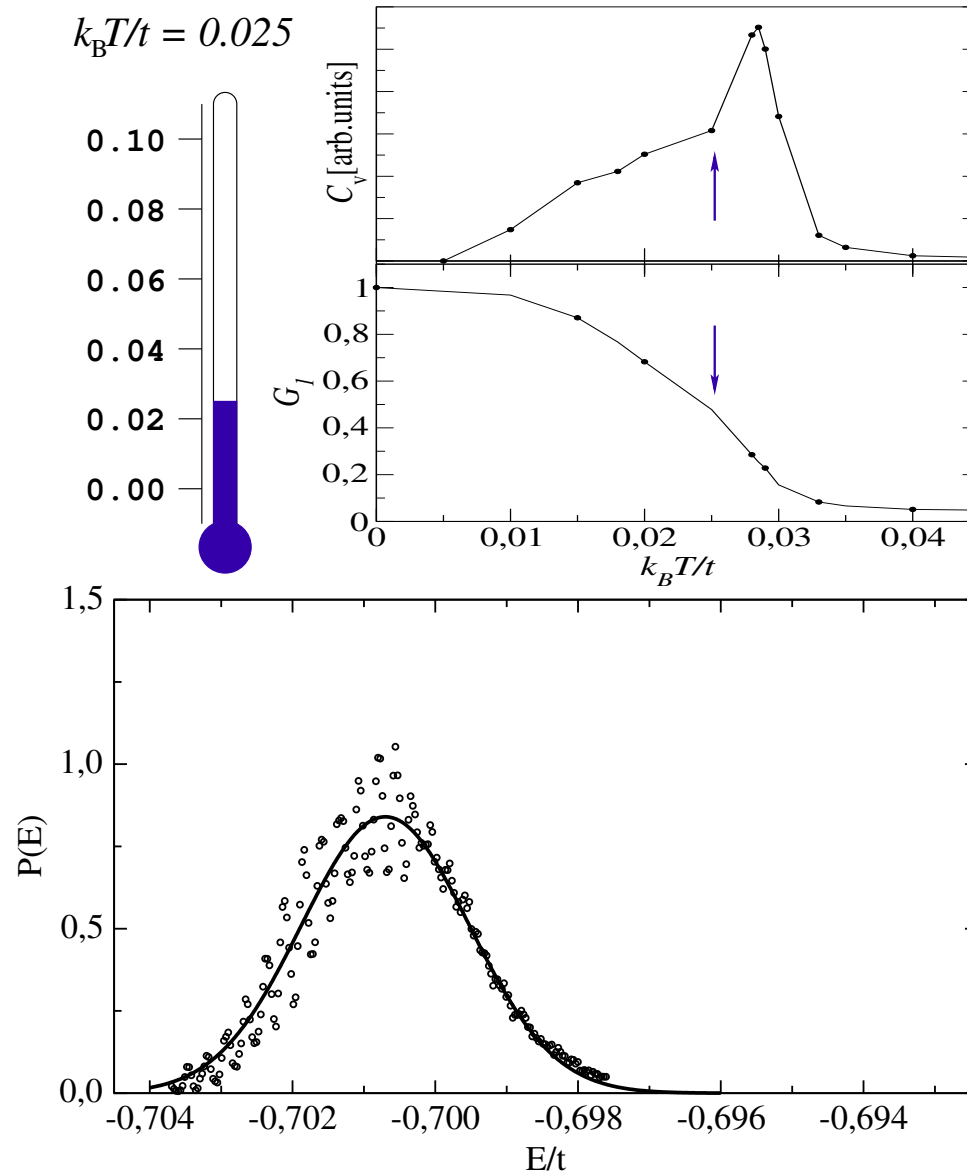
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

Identyfikacja przejścia I-go rodzaju $U/t = 0.5$



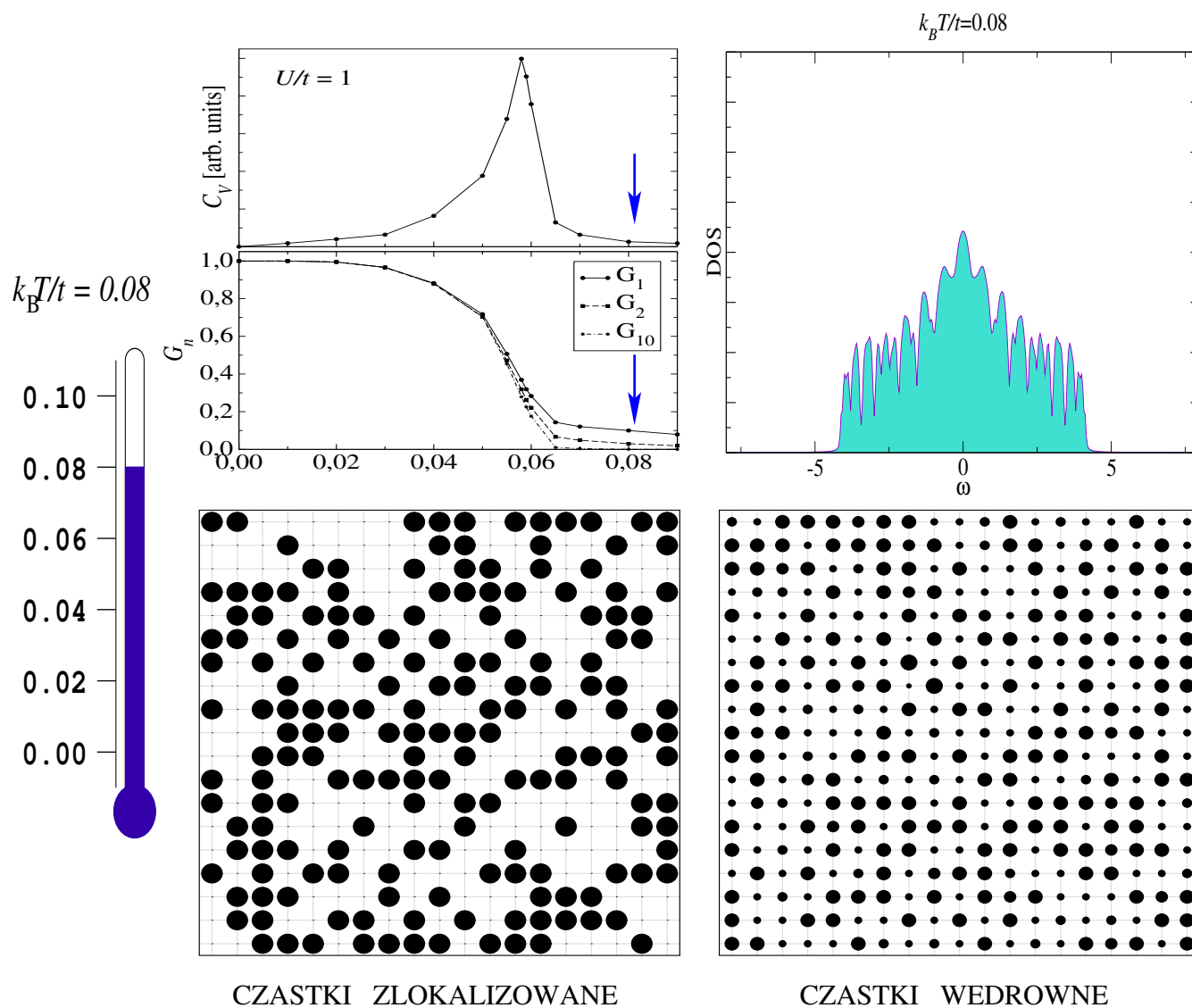
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

Identyfikacja przejścia I-go rodzaju $U/t = 0.5$



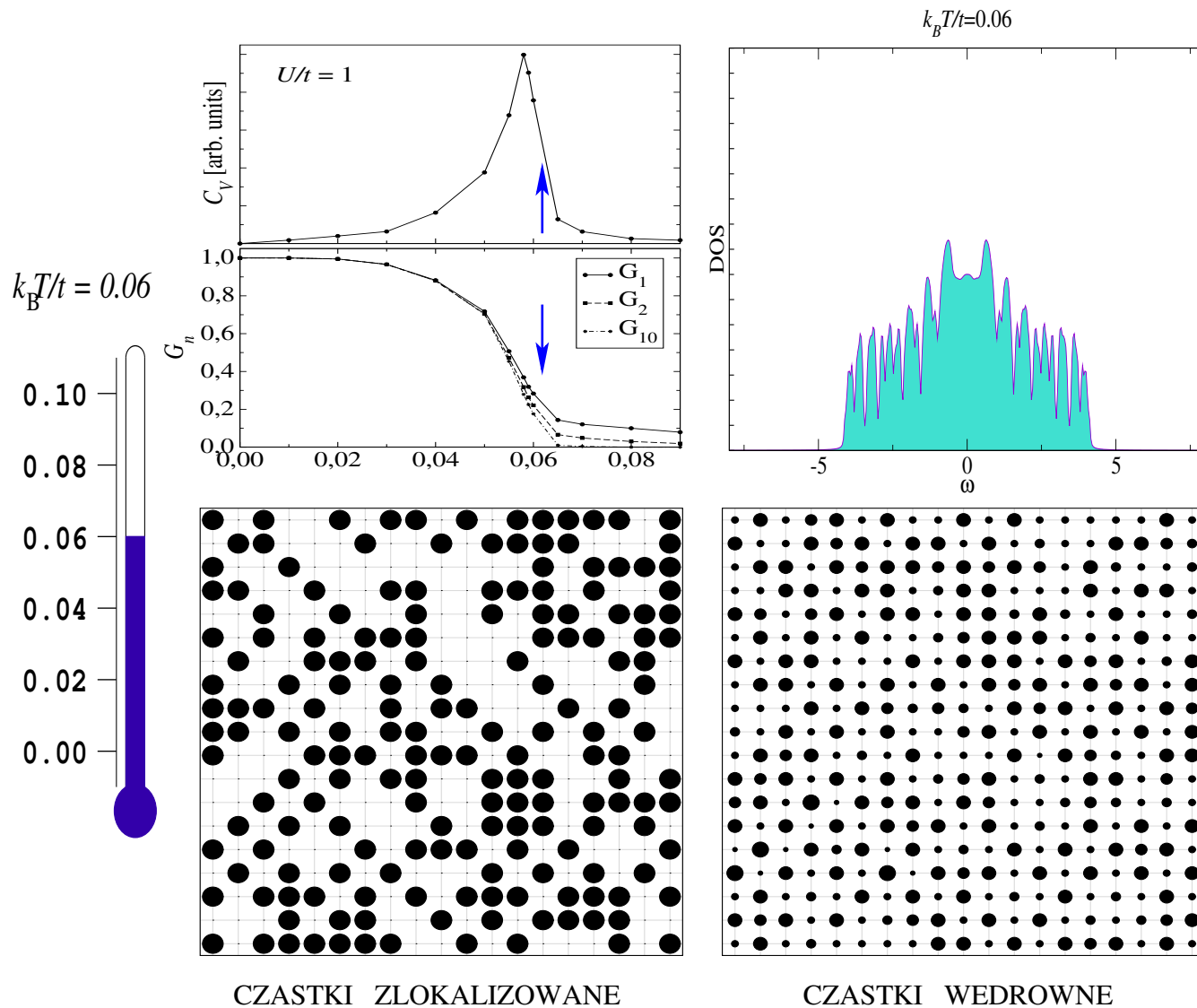
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

Rozkład jonów i elektronów $U/t = 1$



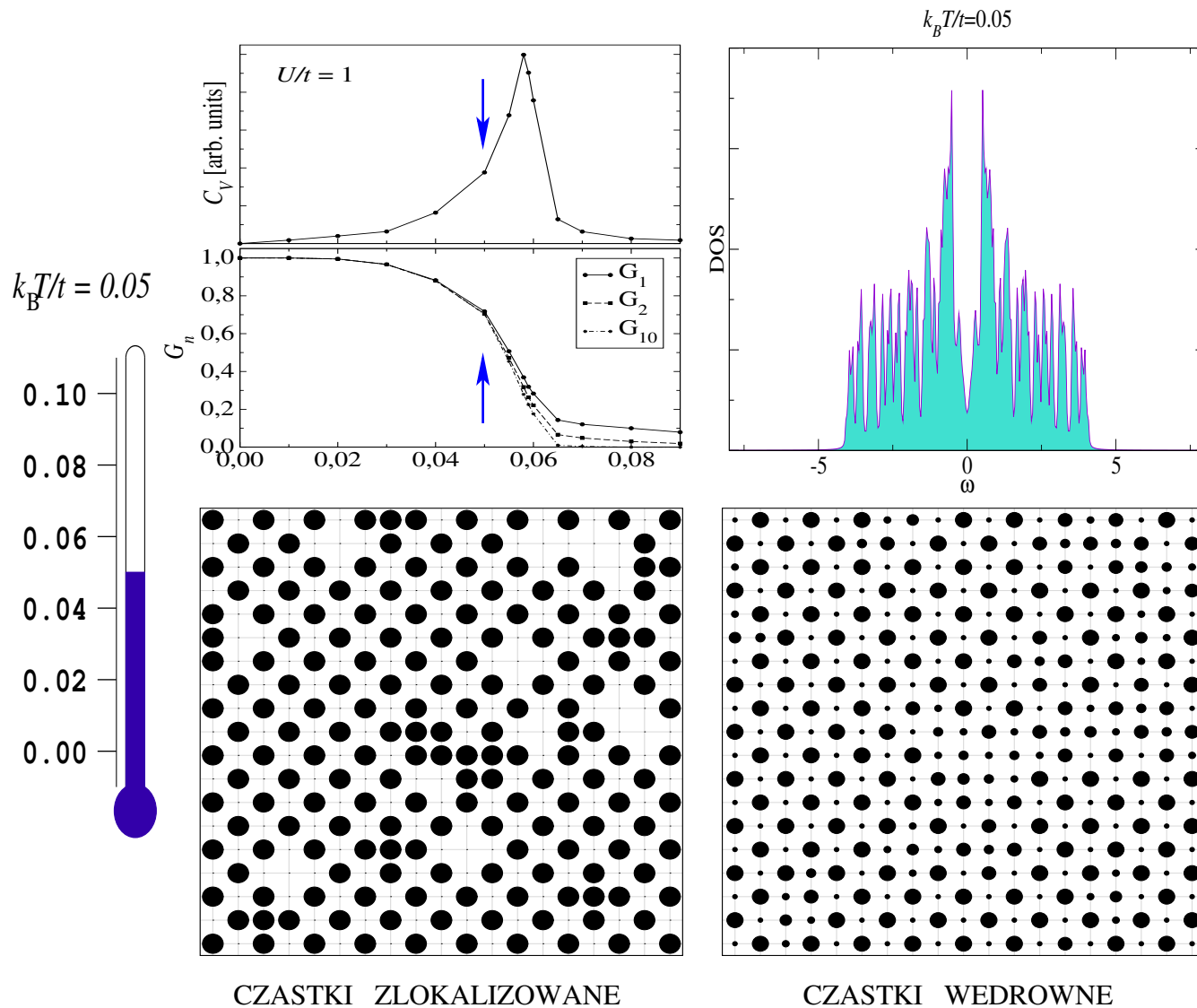
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

Rozkład jonów i elektronów $U/t = 1$



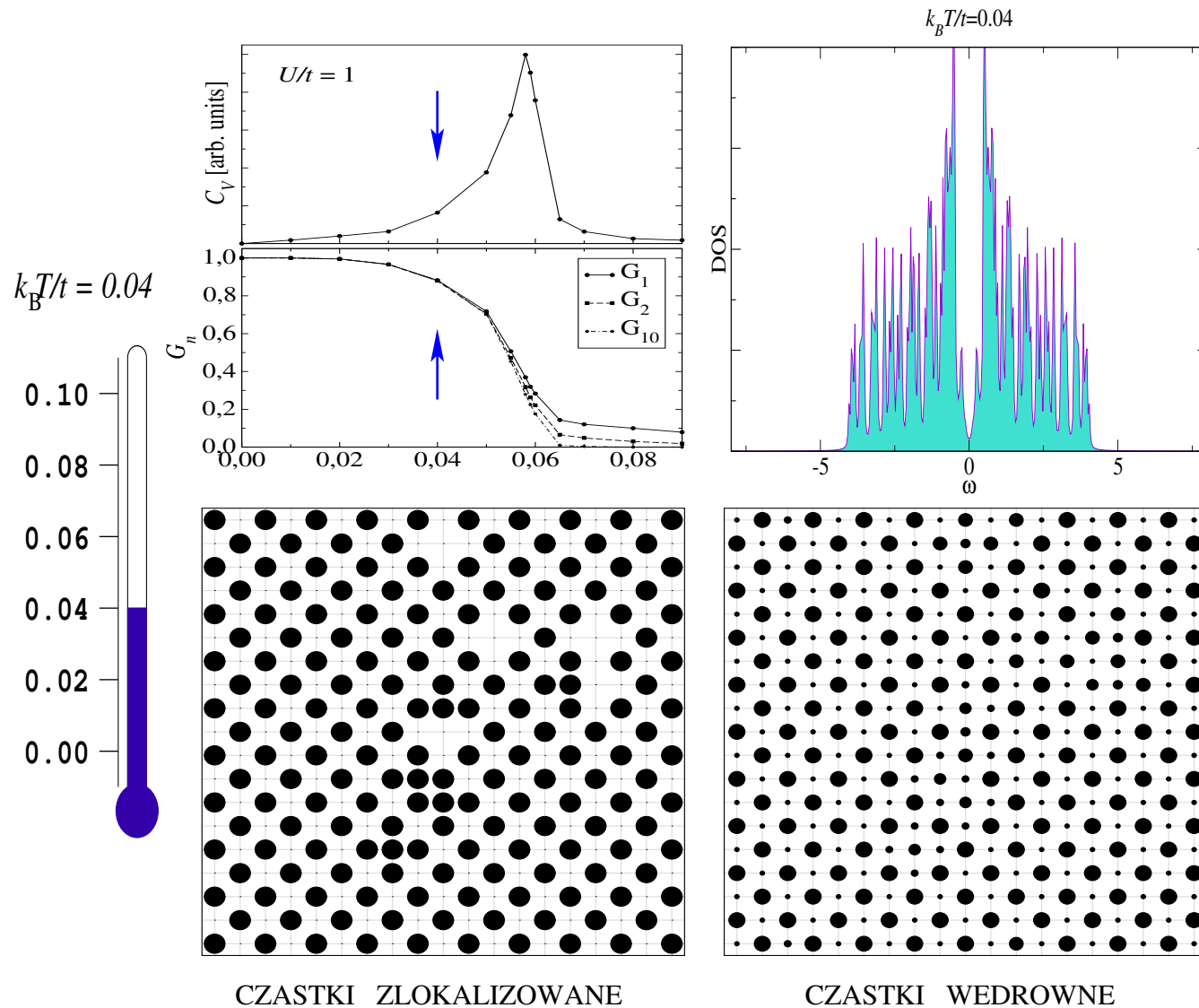
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

Rozkład jonów i elektronów $U/t = 1$



SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

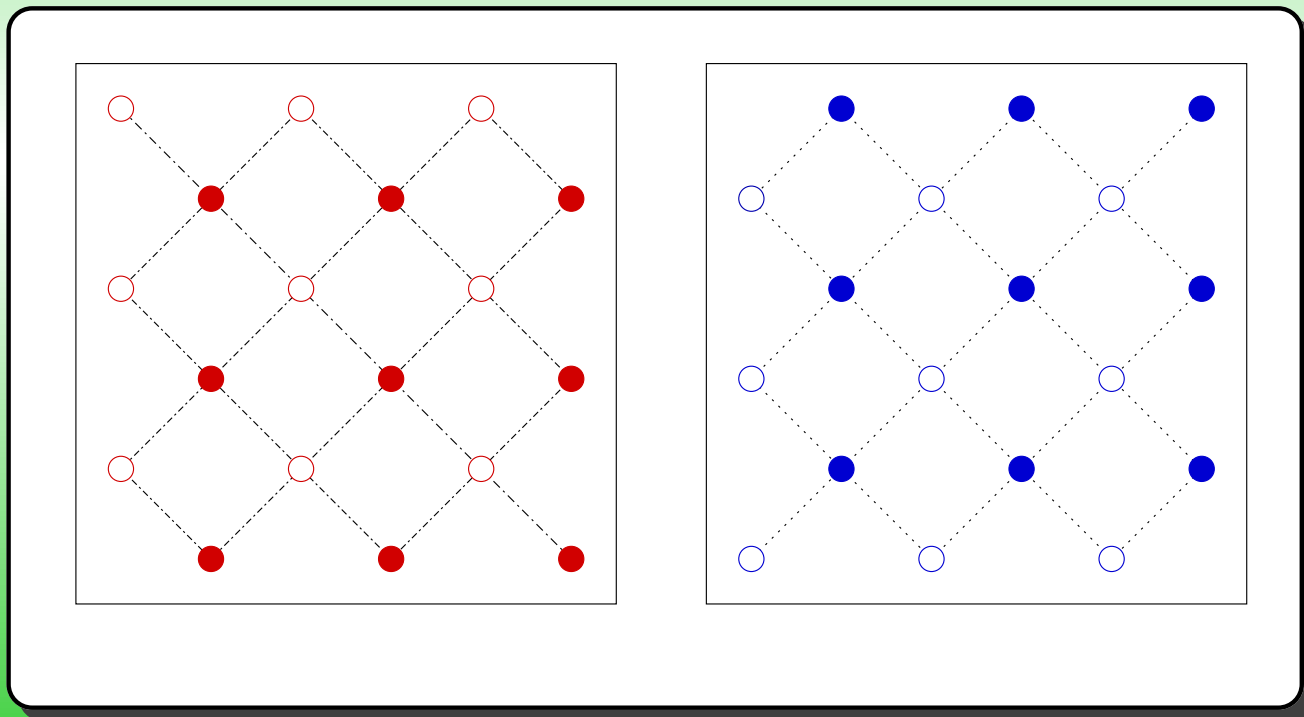
Rozkład jonów i elektronów $U/t = 1$



SIEĆ KWADRATOWA $t' \neq 0$ i $\rho_i = \rho_e = 0.5$

STAN PODSTAWOWY:

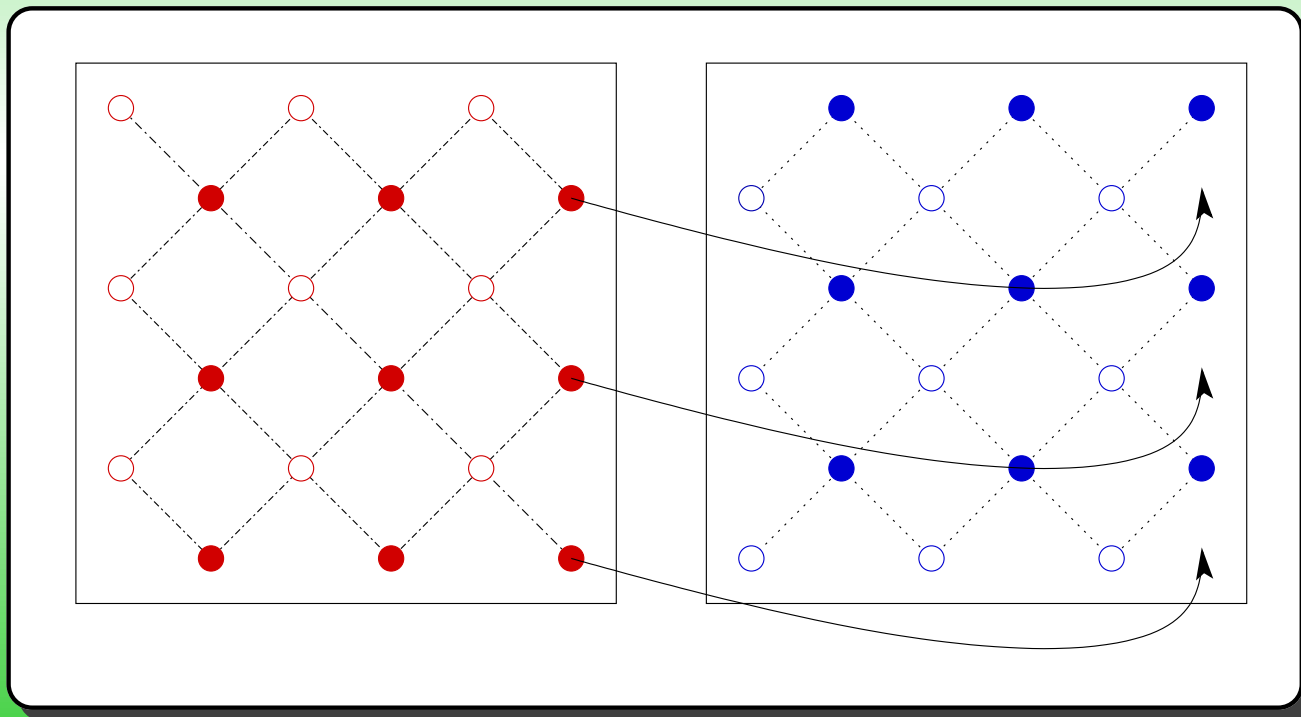
- dla $t'/t < 0.71$ – szachownica
- dla $t'/t > 0.71$ – paski



SIEĆ KWADRATOWA $t' \neq 0$ i $\rho_i = \rho_e = 0.5$

STAN PODSTAWOWY:

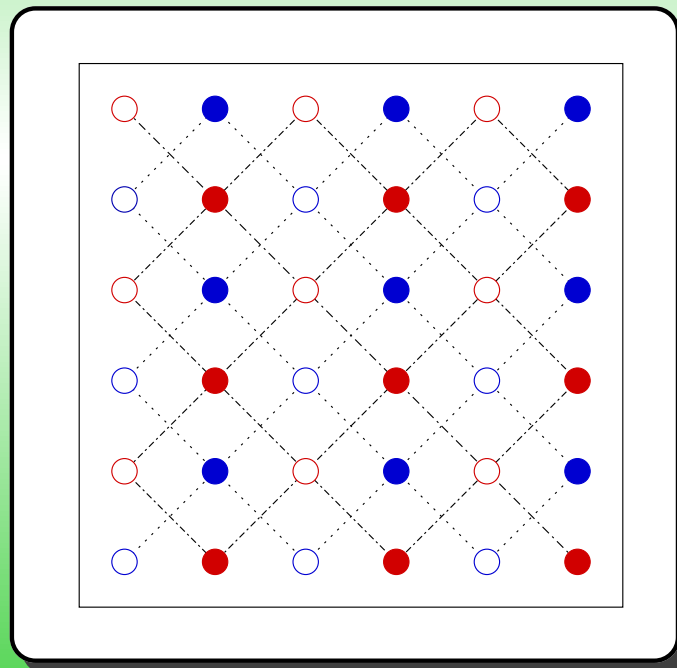
- dla $t'/t < 0.71$ – szachownica
- dla $t'/t > 0.71$ – paski



SIEĆ KWADRATOWA $t' \neq 0$ i $\rho_i = \rho_e = 0.5$

STAN PODSTAWOWY:

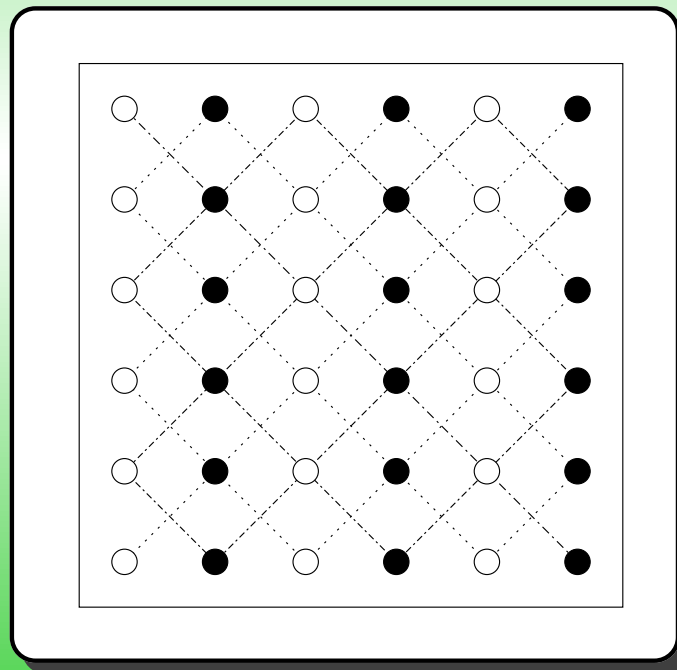
- dla $t'/t < 0.71$ – szachownica
- dla $t'/t > 0.71$ – paski



SIEĆ KWADRATOWA $t' \neq 0$ i $\rho_i = \rho_e = 0.5$

STAN PODSTAWOWY:

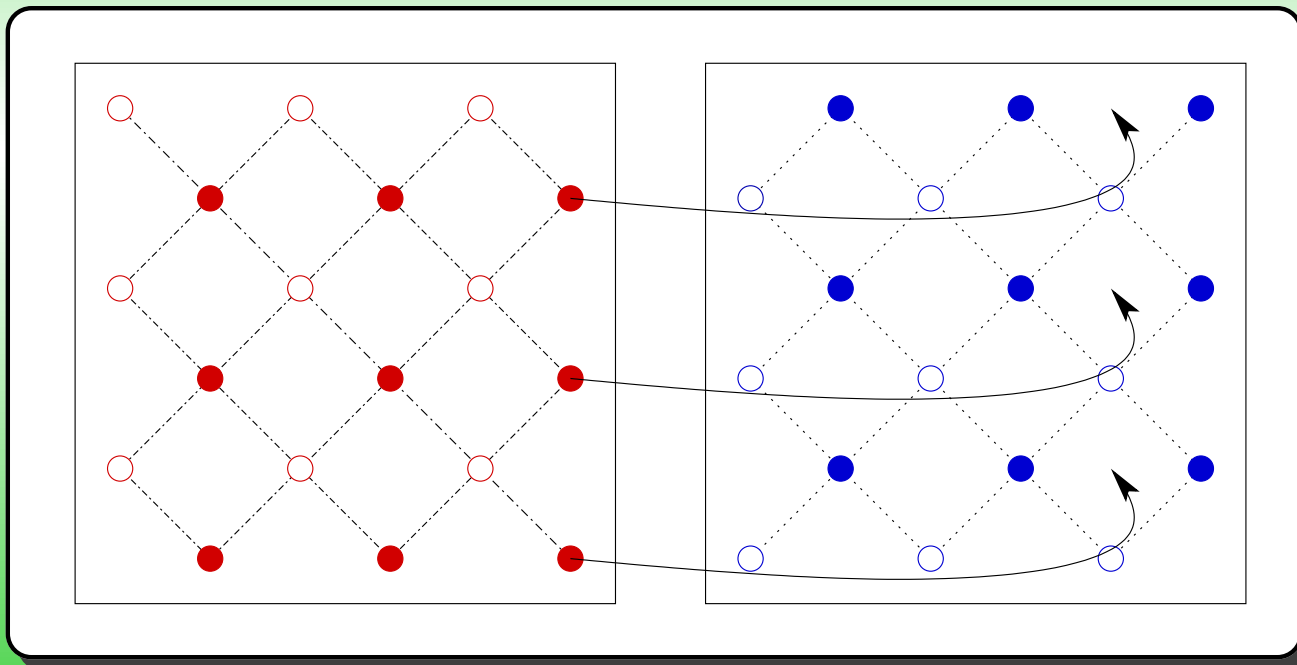
- dla $t'/t < 0.71$ – szachownica
- dla $t'/t > 0.71$ – paski



SIEĆ KWADRATOWA $t' \neq 0$ i $\rho_i = \rho_e = 0.5$

STAN PODSTAWOWY:

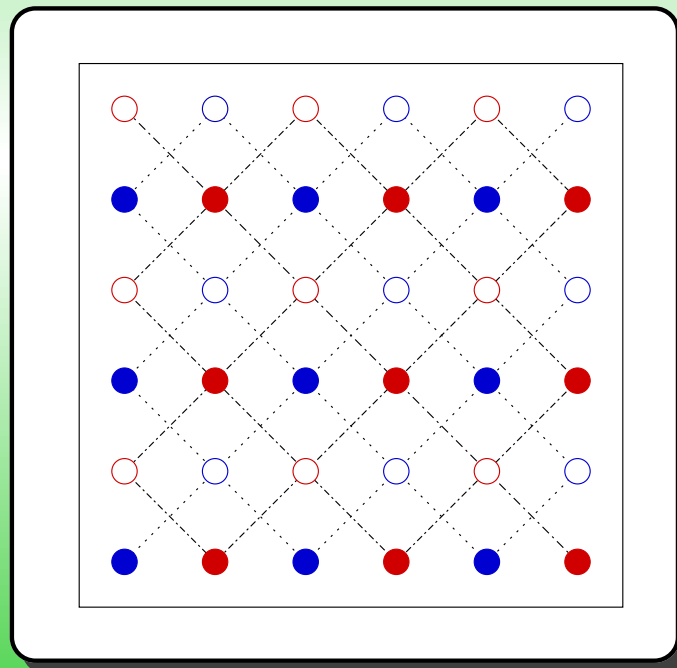
- dla $t'/t < 0.71$ – szachownica
- dla $t'/t > 0.71$ – paski



SIEĆ KWADRATOWA $t' \neq 0$ i $\rho_i = \rho_e = 0.5$

STAN PODSTAWOWY:

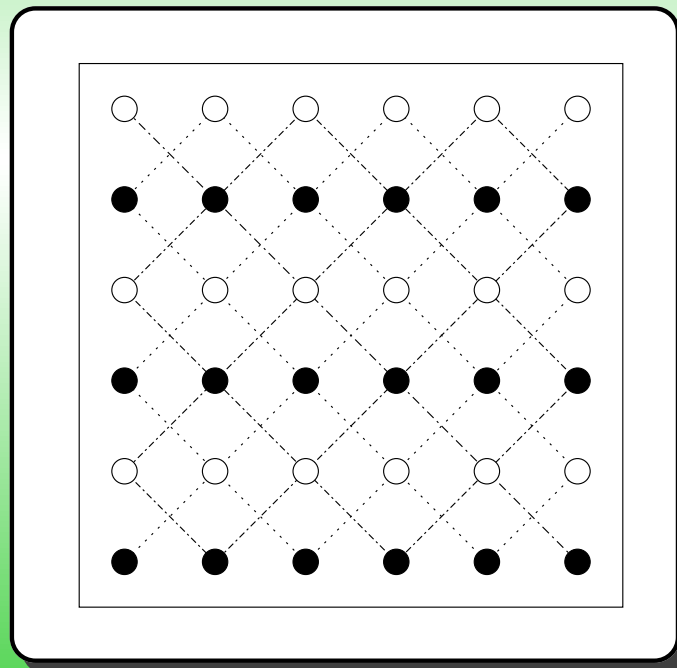
- dla $t'/t < 0.71$ – szachownica
- dla $t'/t > 0.71$ – paski



SIEĆ KWADRATOWA $t' \neq 0$ i $\rho_i = \rho_e = 0.5$

STAN PODSTAWOWY:

- dla $t'/t < 0.71$ – szachownica
- dla $t'/t > 0.71$ – paski

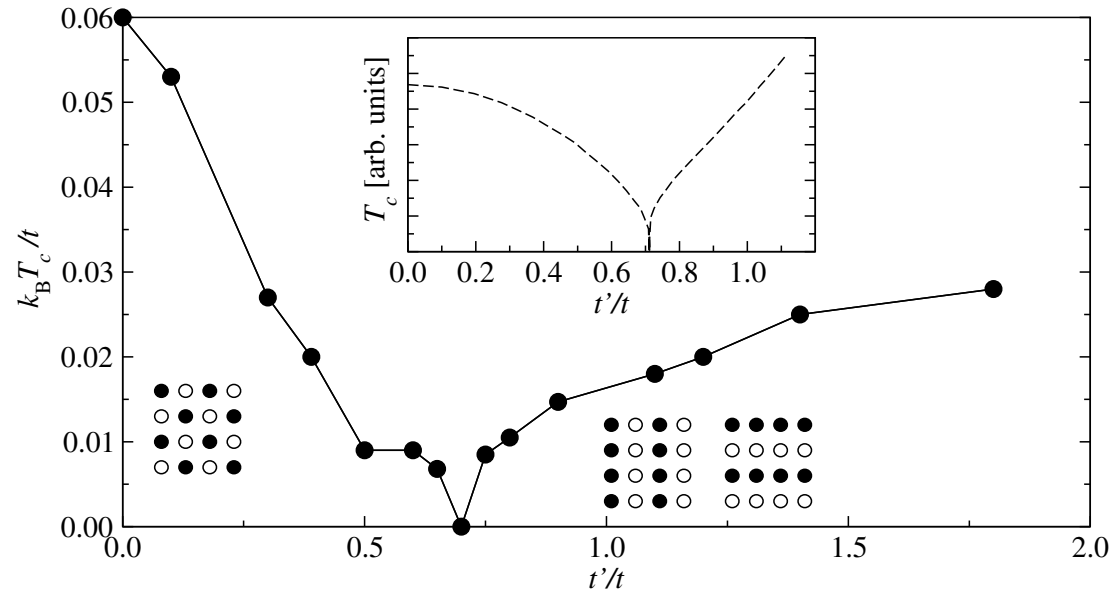


SIEĆ KWADRATOWA $t' \neq 0$ i $\rho_i = \rho_e = 0.5$

STAN PODSTAWOWY:

- dla $t'/t < 0.71$ – szachownica
- dla $t'/t > 0.71$ – paski

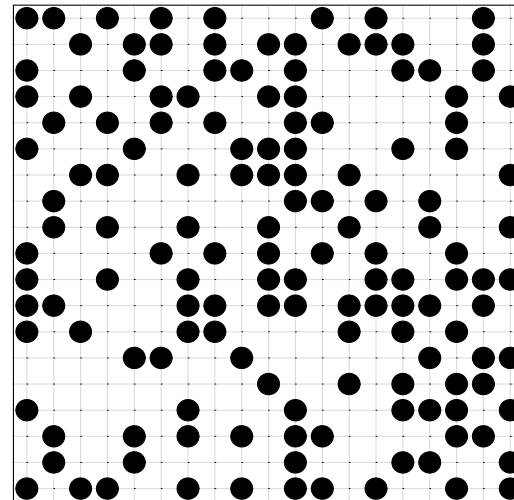
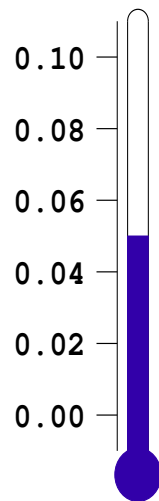
Diagram fazowy, $U/t = 1$



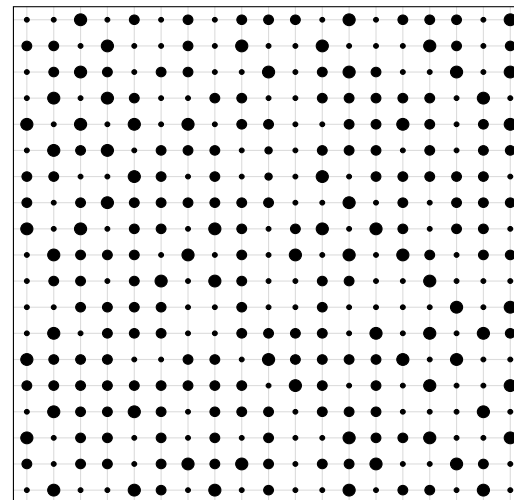
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 1$$

$$k_B T/t = 0.050$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

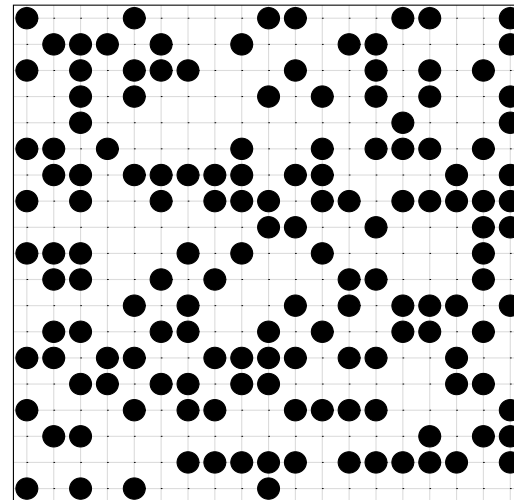
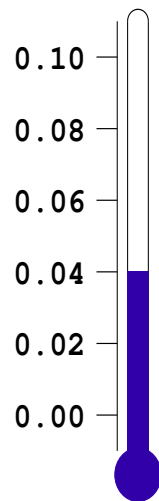


CZASTKI WEDROWNE

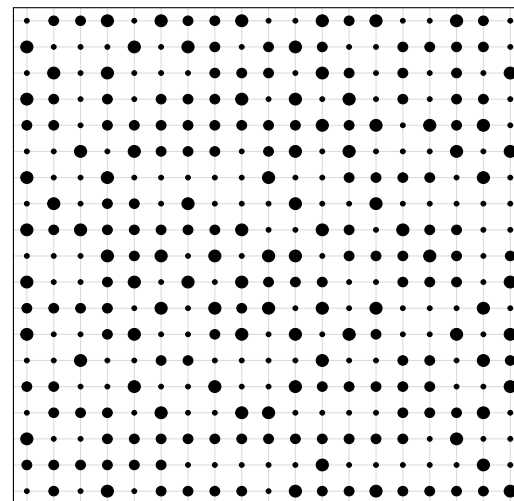
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 1$$

$$k_B T/t = 0.040$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

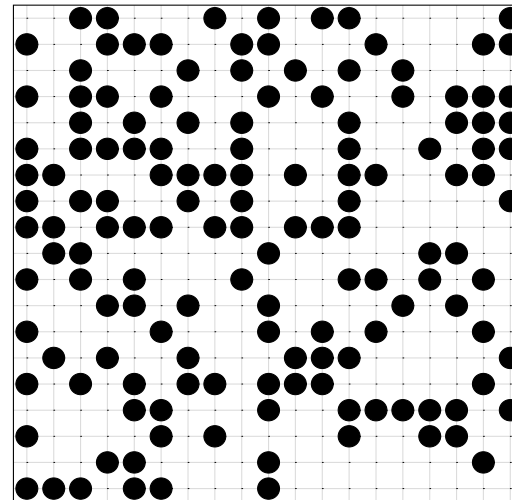
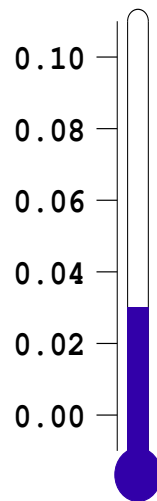


CZASTKI WEDROWNE

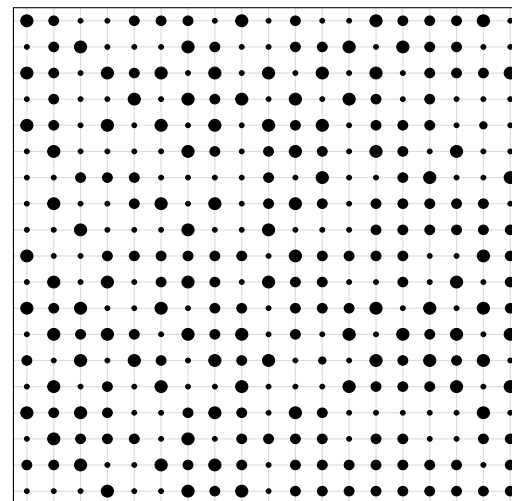
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 1$$

$$k_B T/t = 0.030$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

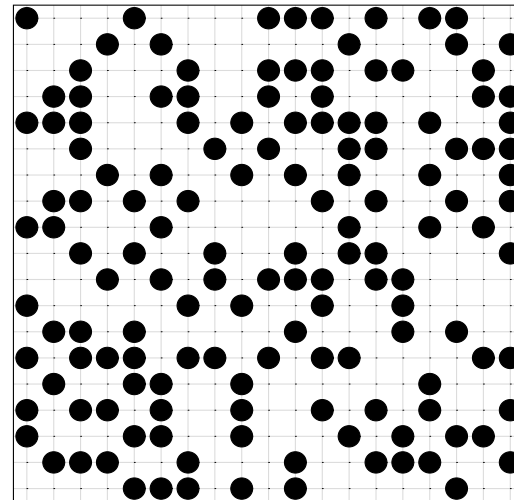
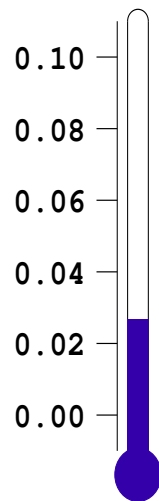


CZASTKI WEDROWNE

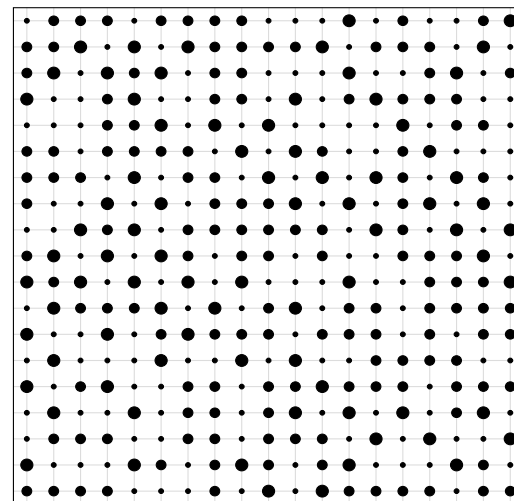
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 1$$

$$k_B T/t = 0.025$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

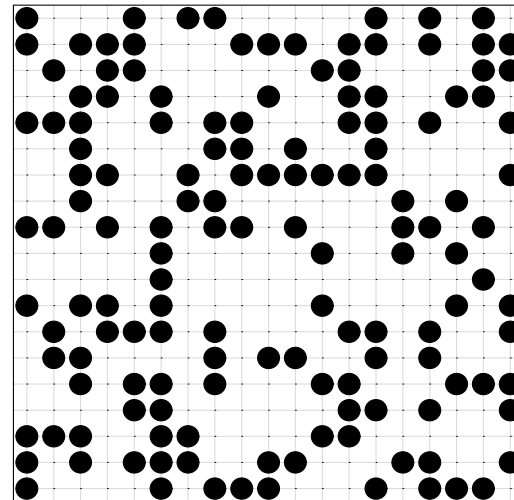
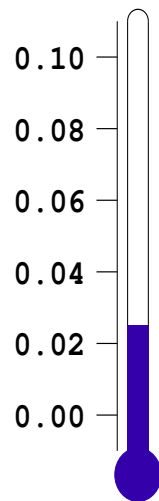


CZASTKI WEDROWNE

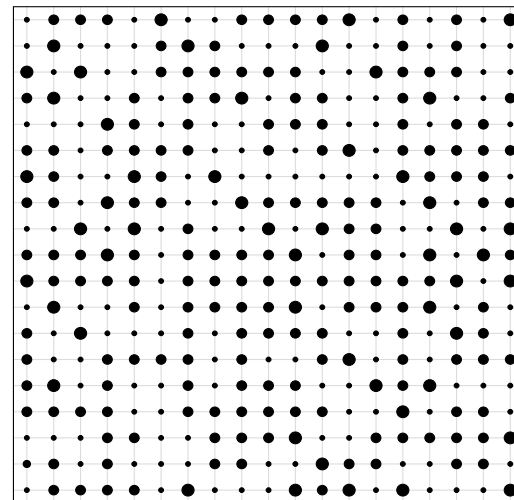
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 1$$

$$k_B T/t = 0.022$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

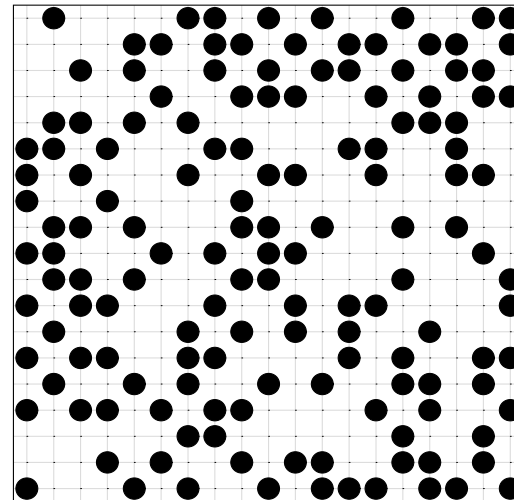
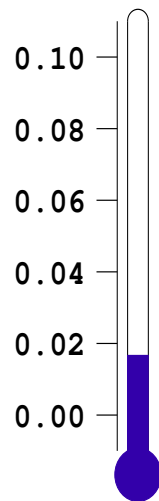


CZASTKI WEDROWNE

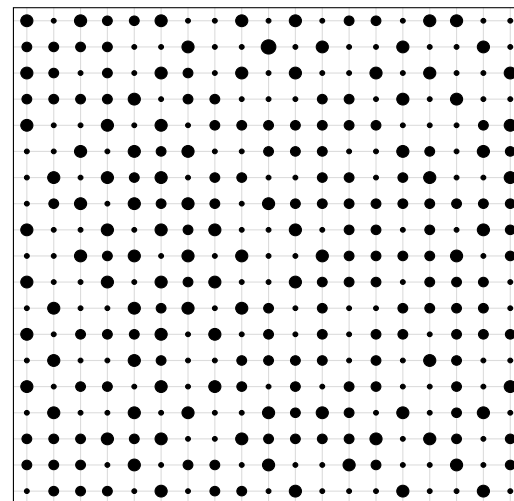
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 1$$

$$k_B T/t = 0.018$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

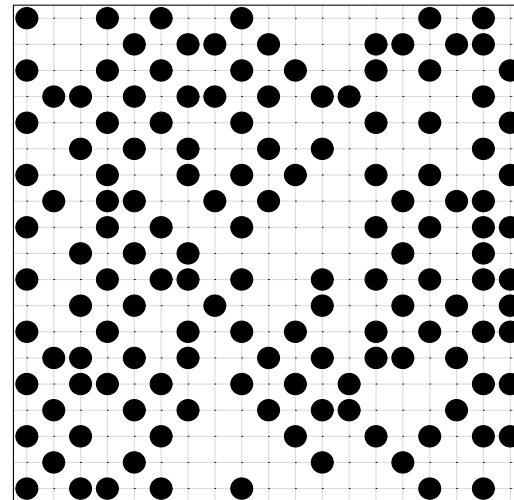
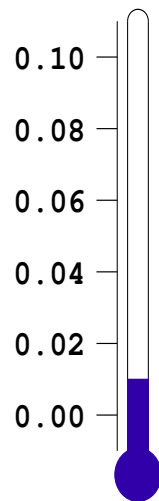


CZASTKI WEDROWNE

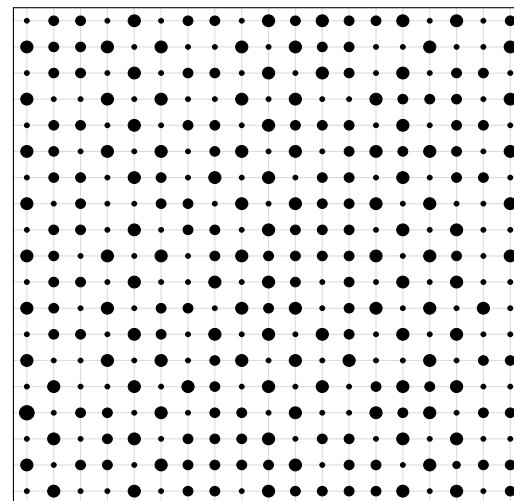
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 1$$

$$k_B T/t = 0.010$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

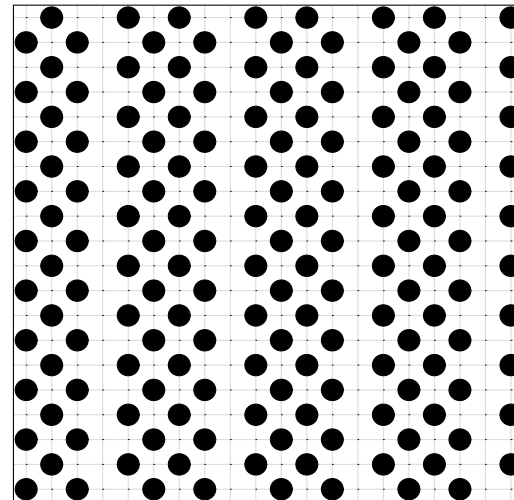
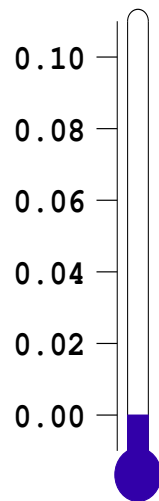


CZASTKI WEDROWNE

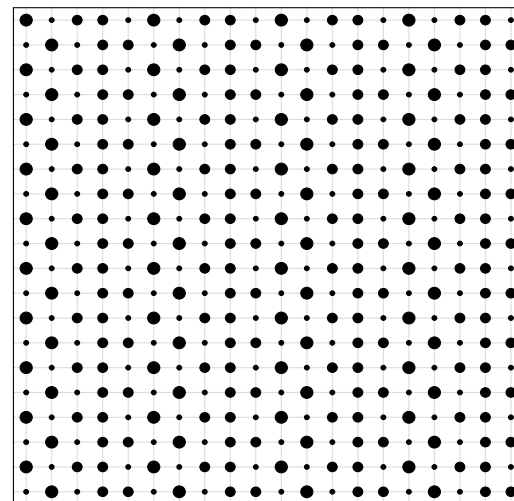
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 1$$

$$k_B T/t = 0.001$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

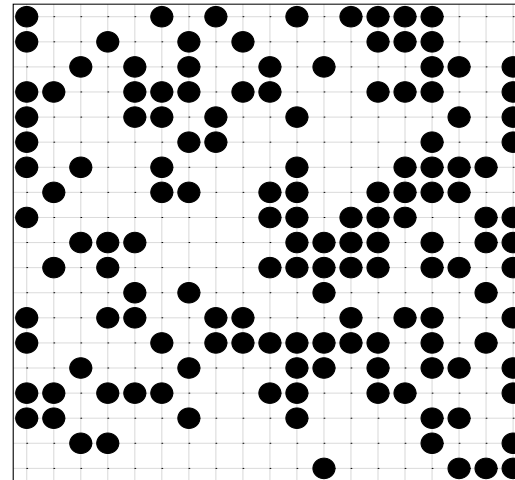
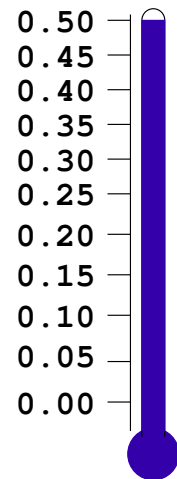


CZASTKI WEDROWNE

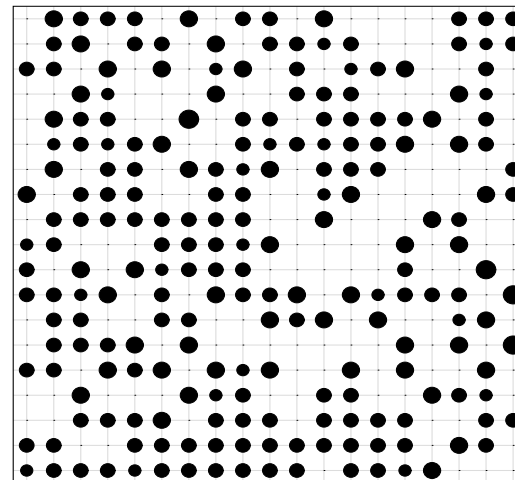
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 20$$

$$k_B T/t = 0.50$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

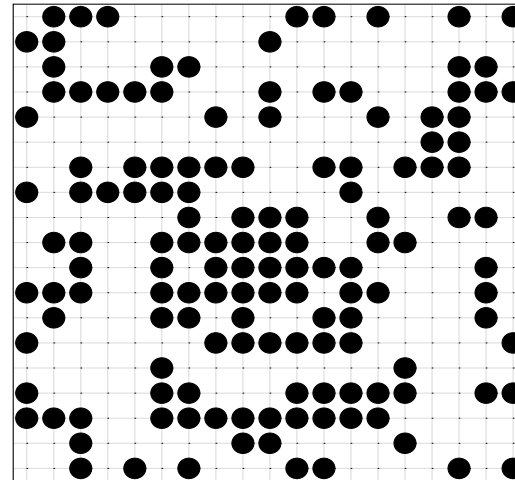
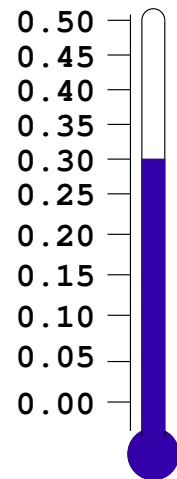


CZASTKI WEDROWNE

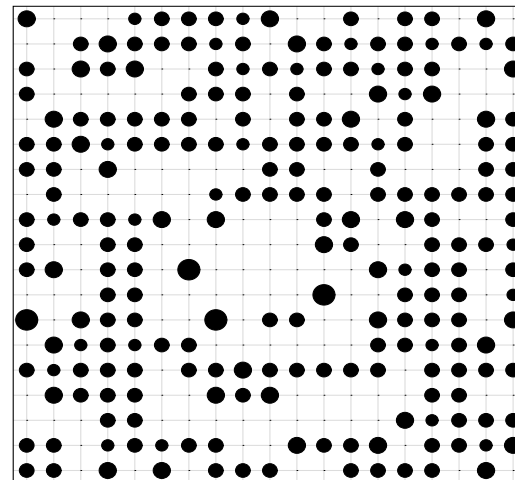
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 20$$

$$k_B T/t = 0.30$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

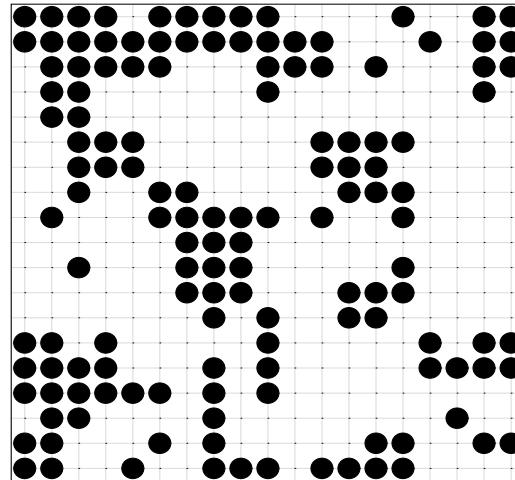
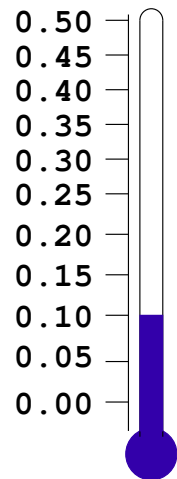


CZASTKI WEDROWNE

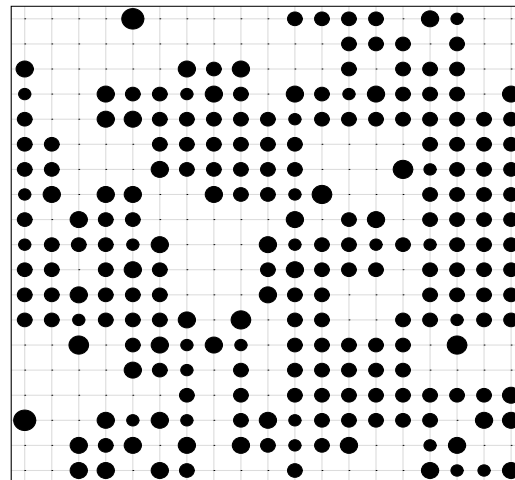
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 20$$

$$k_B T/t = 0.10$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

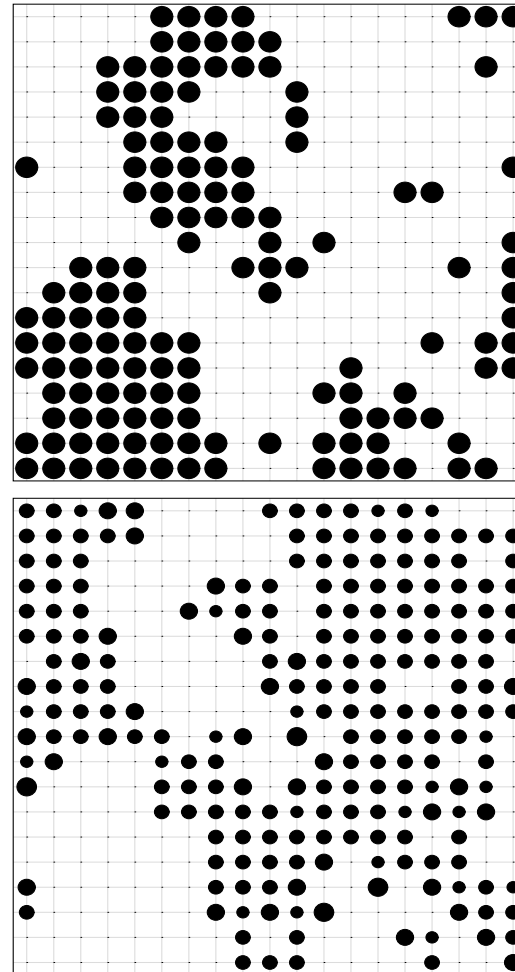
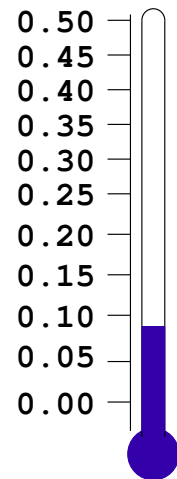


CZASTKI WEDROWNE

SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 20$$

$$k_B T/t = 0.09$$



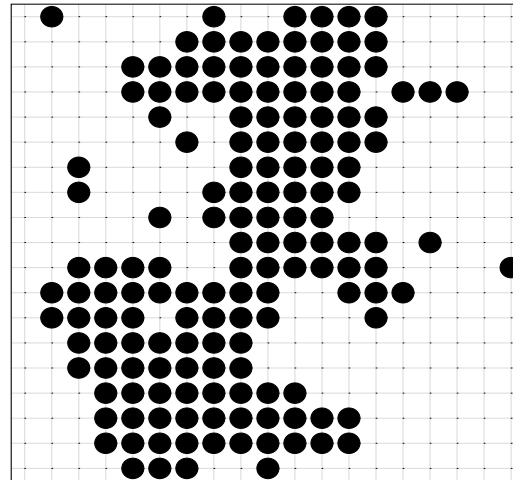
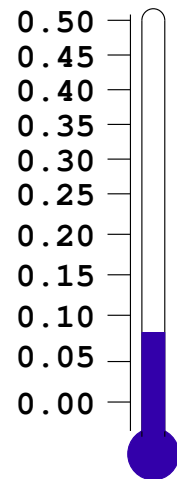
CZASTKI ZLOKALIZOWANE

CZASTKI WEDROWNE

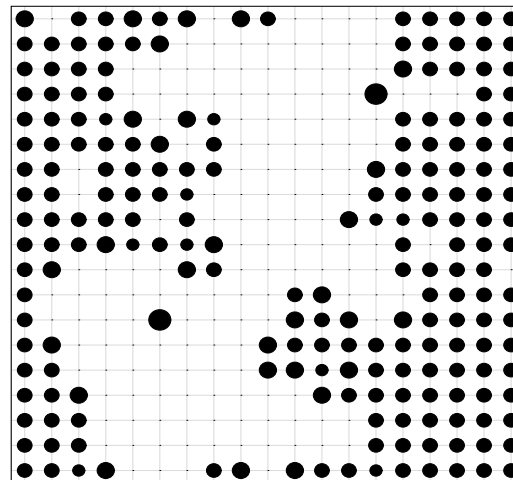
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 20$$

$$k_B T/t = 0.08$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

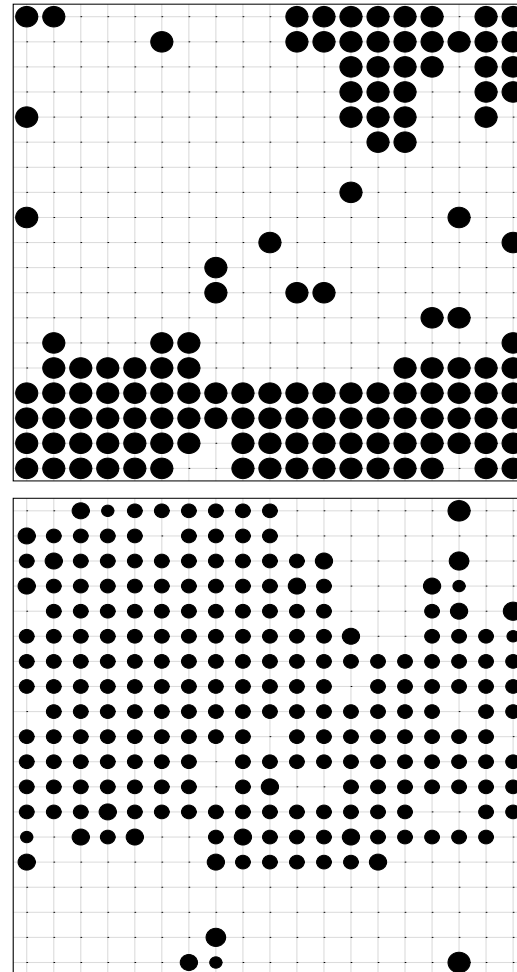
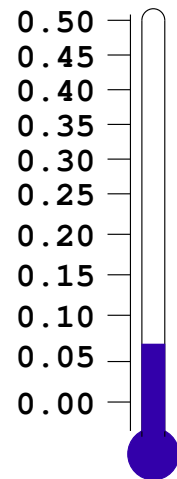


CZASTKI WEDROWNE

SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 20$$

$$k_B T/t = 0.07$$



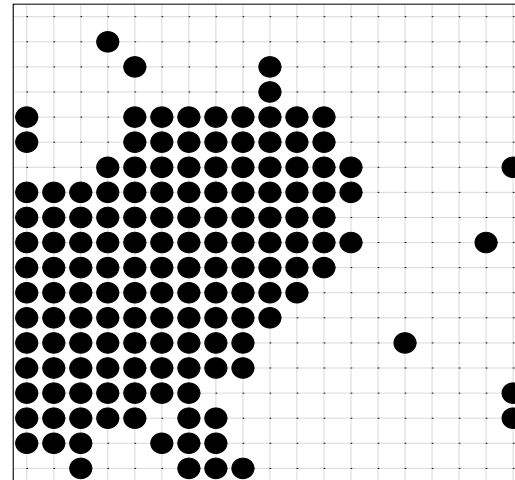
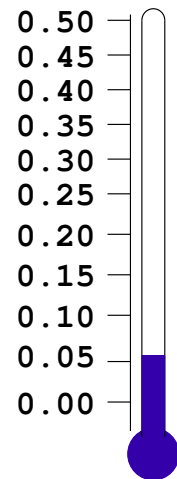
CZASTKI ZLOKALIZOWANE

CZASTKI WEDROWNE

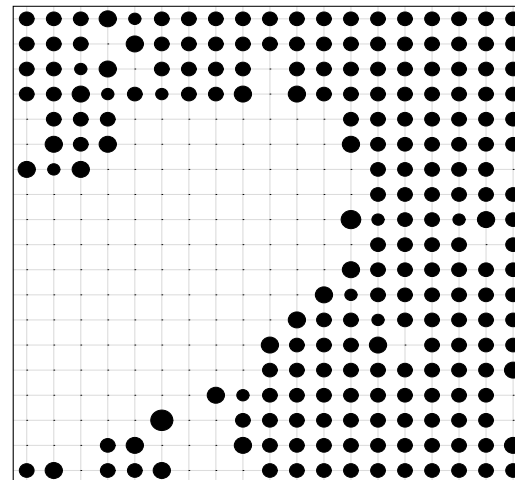
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 20$$

$$k_B T/t = 0.06$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE

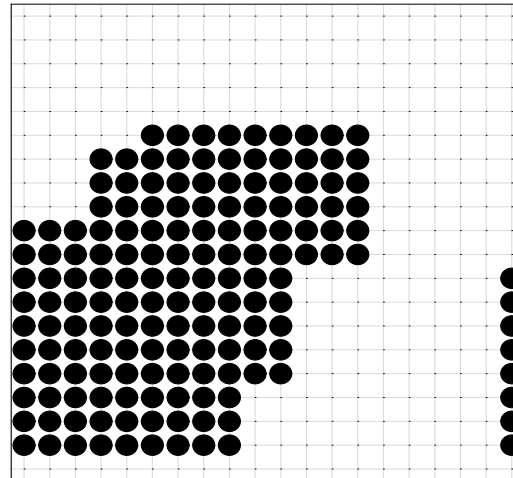
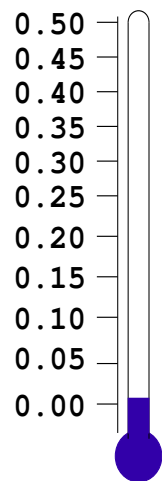


CZASTKI WEDROWNE

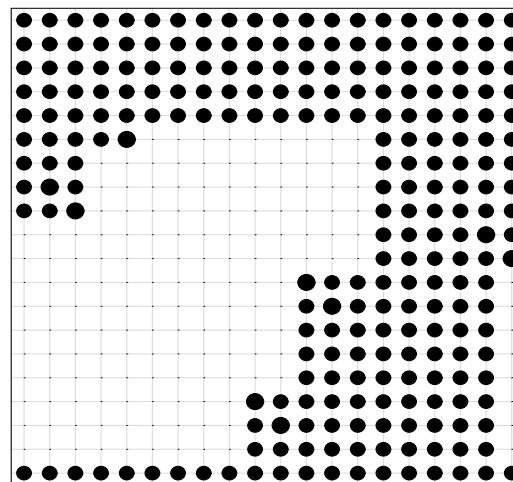
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.4$

$$U/t = 20$$

$$k_B T/t = 0.001$$



CZASTKI ZLOKALIZOWANE



CZASTKI WEDROWNE

INNE WYNIKI OTRZYMANE PREZENTOWANĄ METODĄ

- Funkcje spektralne dla elektronów wędrownych
- Gęstości stanów – dużo dokładniejsze niż otrzymane metodą DCA [[cond-mat/0504533](#)]
- Przejście fazowe dla modelu FK na sieci trójkątnej [[Phisica B \(w druku\)](#)]
- Diagram fazowy w modelu FK [[cond-mat/0504533](#)]
- Separacja fazowa na sieci heksagonalnej

ZAMIAST PODSUMOWANIA

Rola niejednorodności w układach silnie skorelowanych:

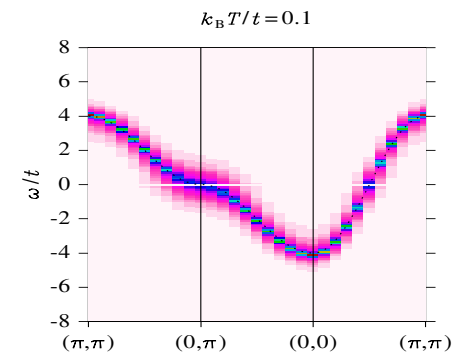
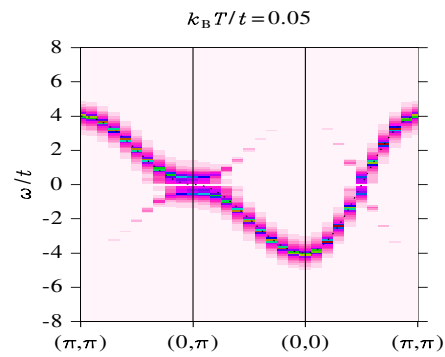
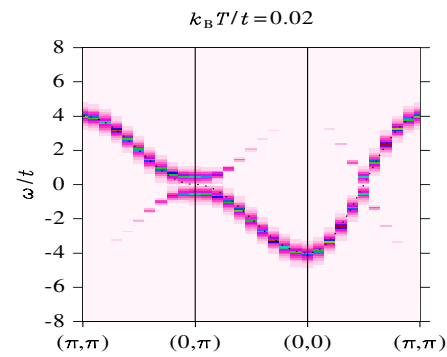
- tlenki metali przejściowych – statyczne lub dynamiczne niejednorodności
 - kolosalny magnetoopór w manganitach – klastery magnetyczne
 - wstęgi w nikletach
 - niejednorodności w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych:
 - * pseudoszczelina
 - * nadprzewodnictwo indukowane niejednorodnościami
 - magnetyczna separacja fazowa w tlenkach kobaltu
- rozcieńczone półprzewodniki magnetyczne – spintronika!
- koegzystancja faz AF i SC lub SDW i SC w nadprzewodnikach organicznych
- współzawodnictwo/koegzystencja AF i SC w układach ciężkofermionowych

Inhomogeneity-induced superconductivity? J. Eroles *et. al.* Europhys. Lett. 50, 540 (2000)

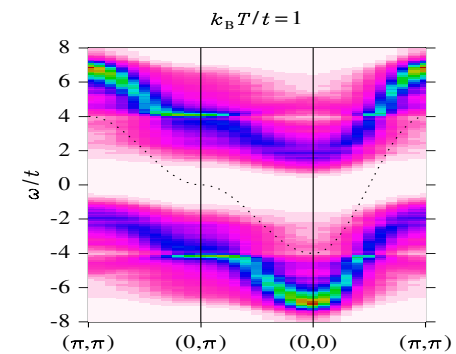
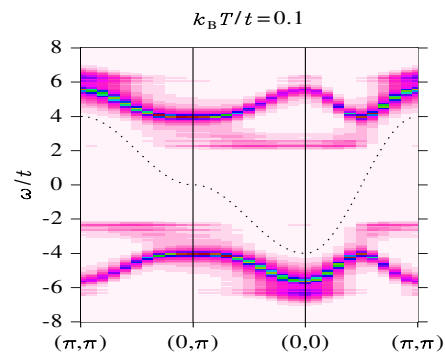
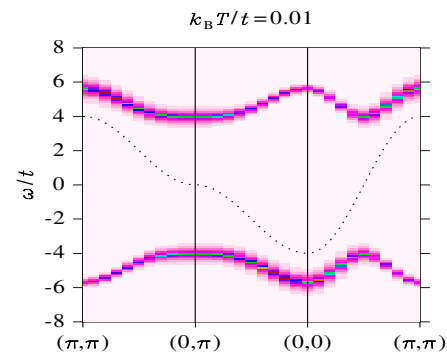
SIEĆ KWADRATOWA $\rho_i = \rho_e = 0.5$

Funkcje spektralne

$$U/t = 1$$



$$U/t = 8$$



GĘSTOŚĆ STANÓW $\rho_i = \rho_e = 0.5$

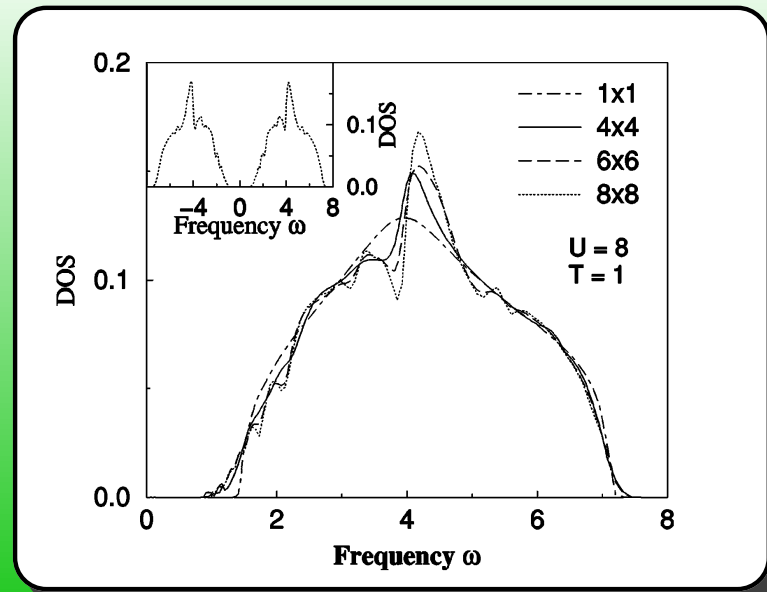
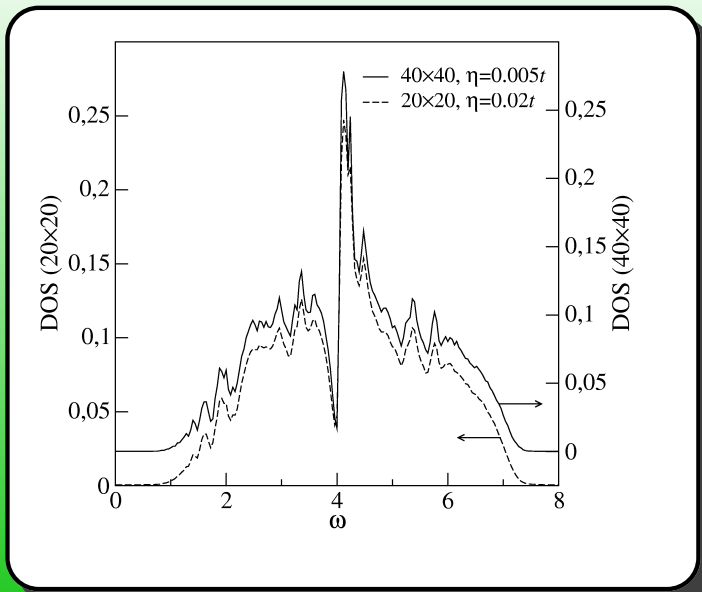
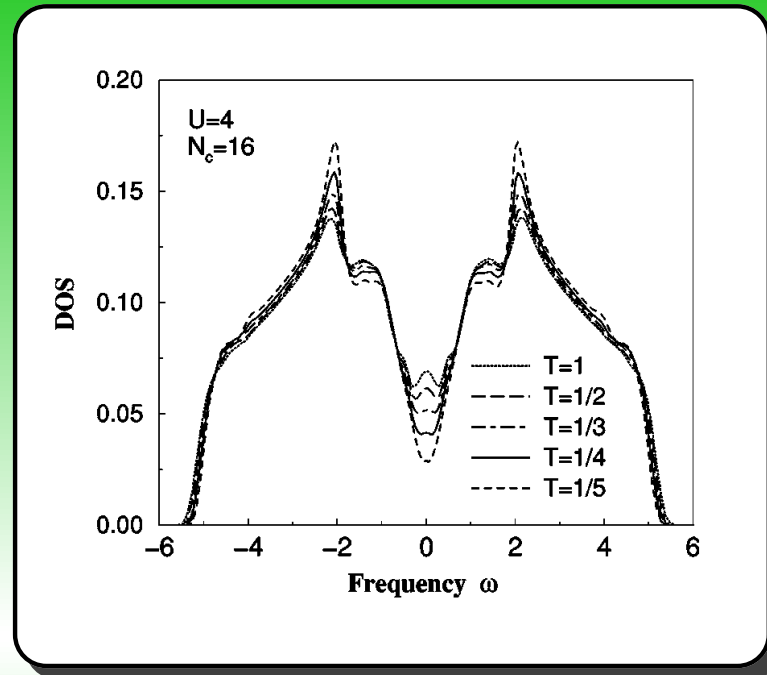
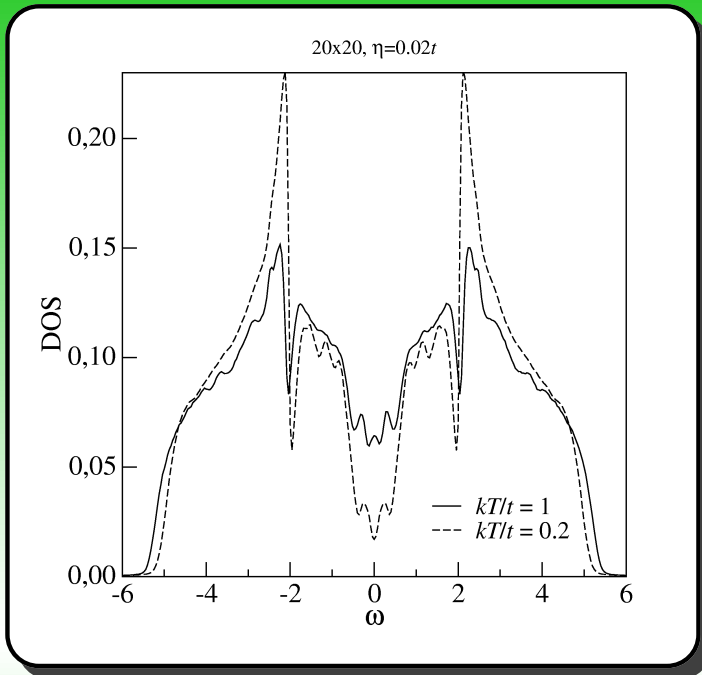
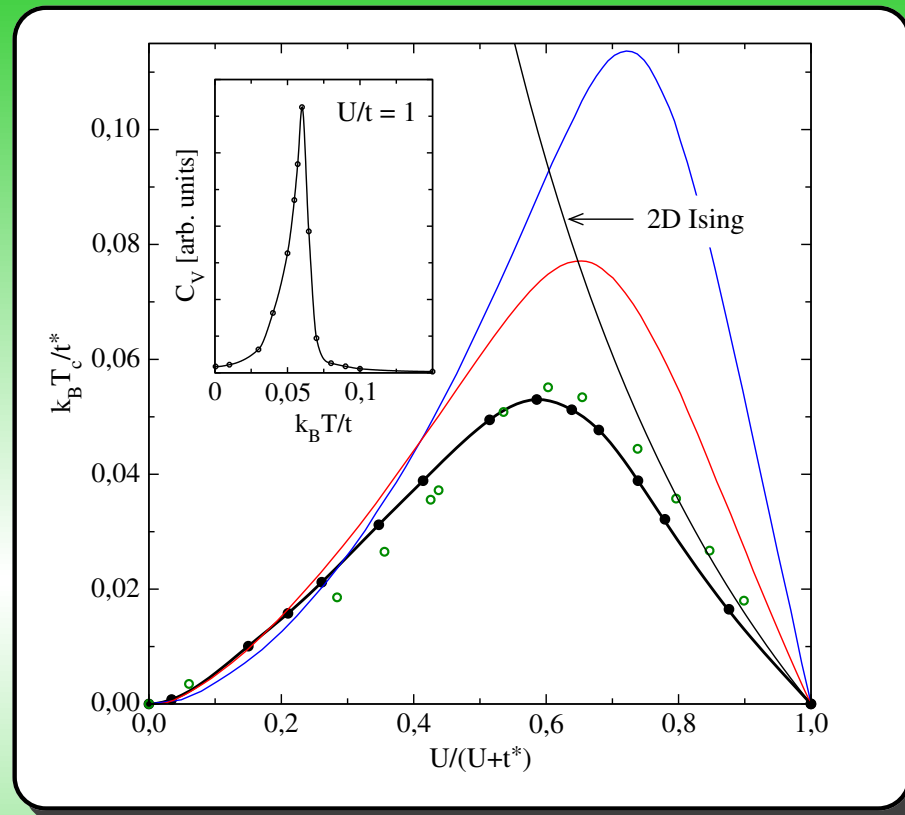


DIAGRAM FAZOWY $\rho_i = \rho_e = 0.5$



$$t^* = 2\sqrt{2}t$$

— — wyniki dla $d \rightarrow \infty$ dla sieci Bethe'go

— — wyniki dla $d \rightarrow \infty$ dla sieci hiperkubicznej

[L. Cheng, J. K. Freericks, B. A. Jones, PRB 68, 153102 (2003)]

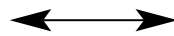
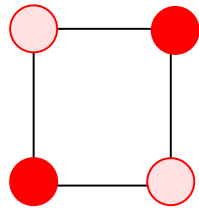
○ — wyniki otrzymane z zamykania się szczeliny w gęstości

stanów [P. de Vries, K. Michelson, H. de Raedt, Z. Phys. B 92, 353 (1993)]

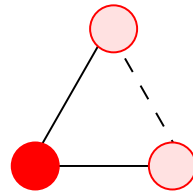
SIEĆ TRÓJKĄTNA

Frustracja

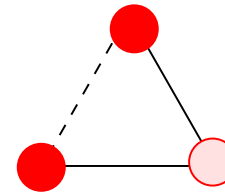
sieć kwadratowa





sieć trójkątna



?



-  wezeł zajęty przez domieszke
-  pusty wezeł

- Dla sieci kwadratowej stanem podstawowym jest szachownica
- Dla sieci trójkątnej, gdy $U \rightarrow \infty$ brak uporządkowania dalekozasięgowego (model Isinga)
- **Czy w przypadku słabego oddziaływania kulombowskiego dla sieci trójkątnej w MFK może istnieć uporządkowanie dalekozasięgowe?**

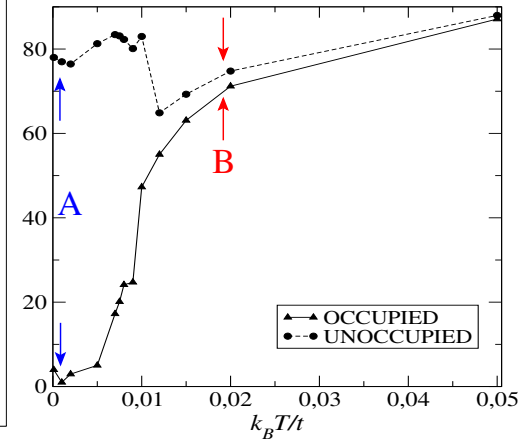
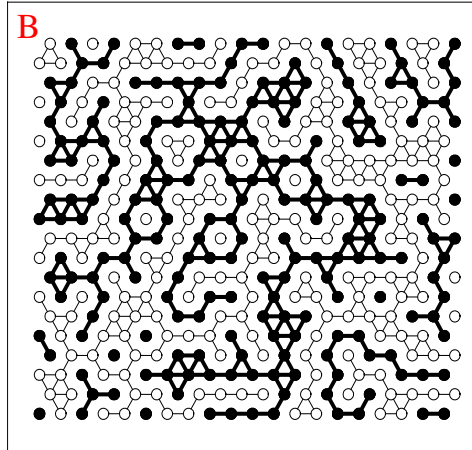
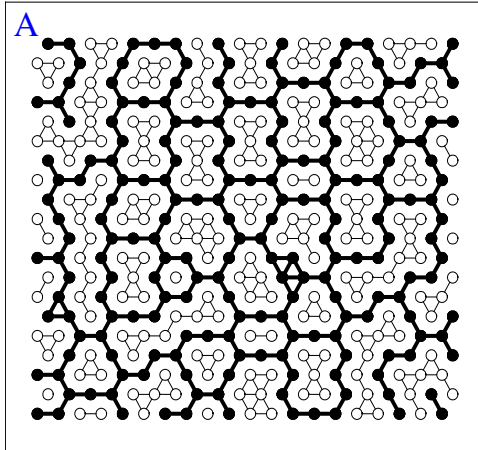
SIEĆ TRÓJKĄTNA

FRUSTRATED-BOND-GRAPH (FB-graph)

A: $k_B T/t=0.0001$

B: $k_B T/t=0.02$

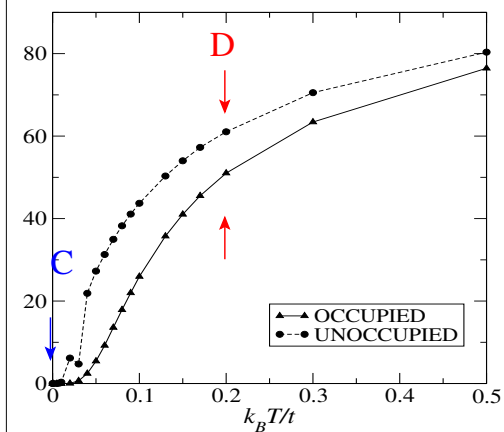
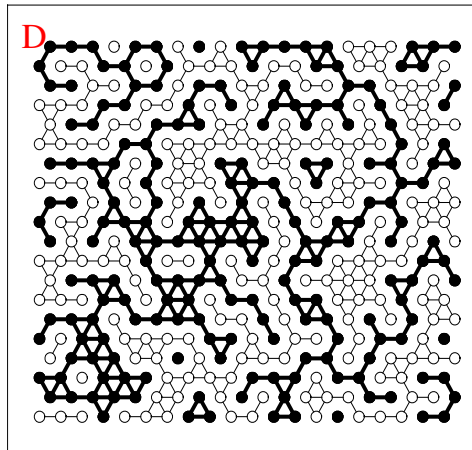
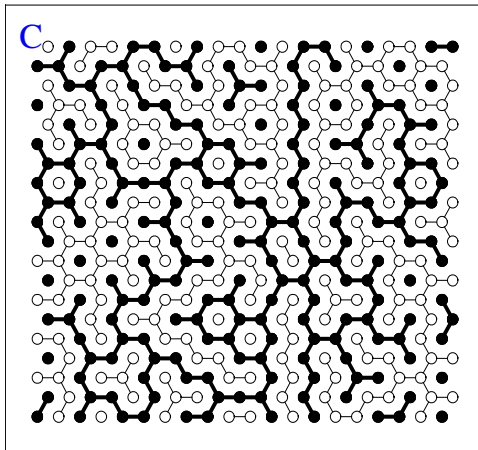
$U/t=1$



C: $k_B T/t=0.005$

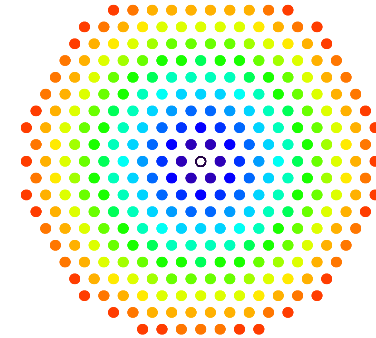
D: $k_B T/t=0.3$

$U/t=10$

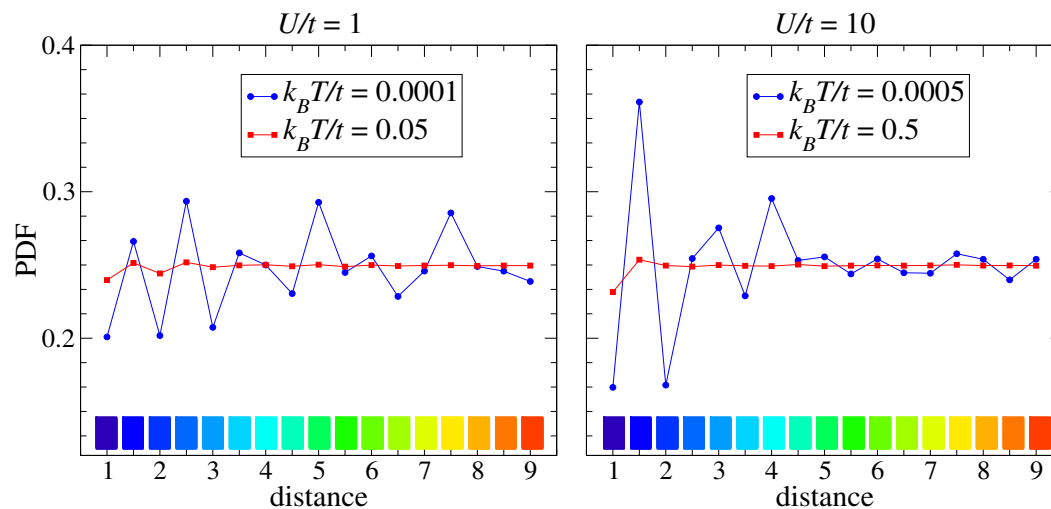


SIEĆ TRÓJKĄTNA

PDF – *Pair distribution function*



PDF daje prawdopodobieństwo znalezienia domieszki w danej odległości od innej domieszki



Słabe oddziaływanie:

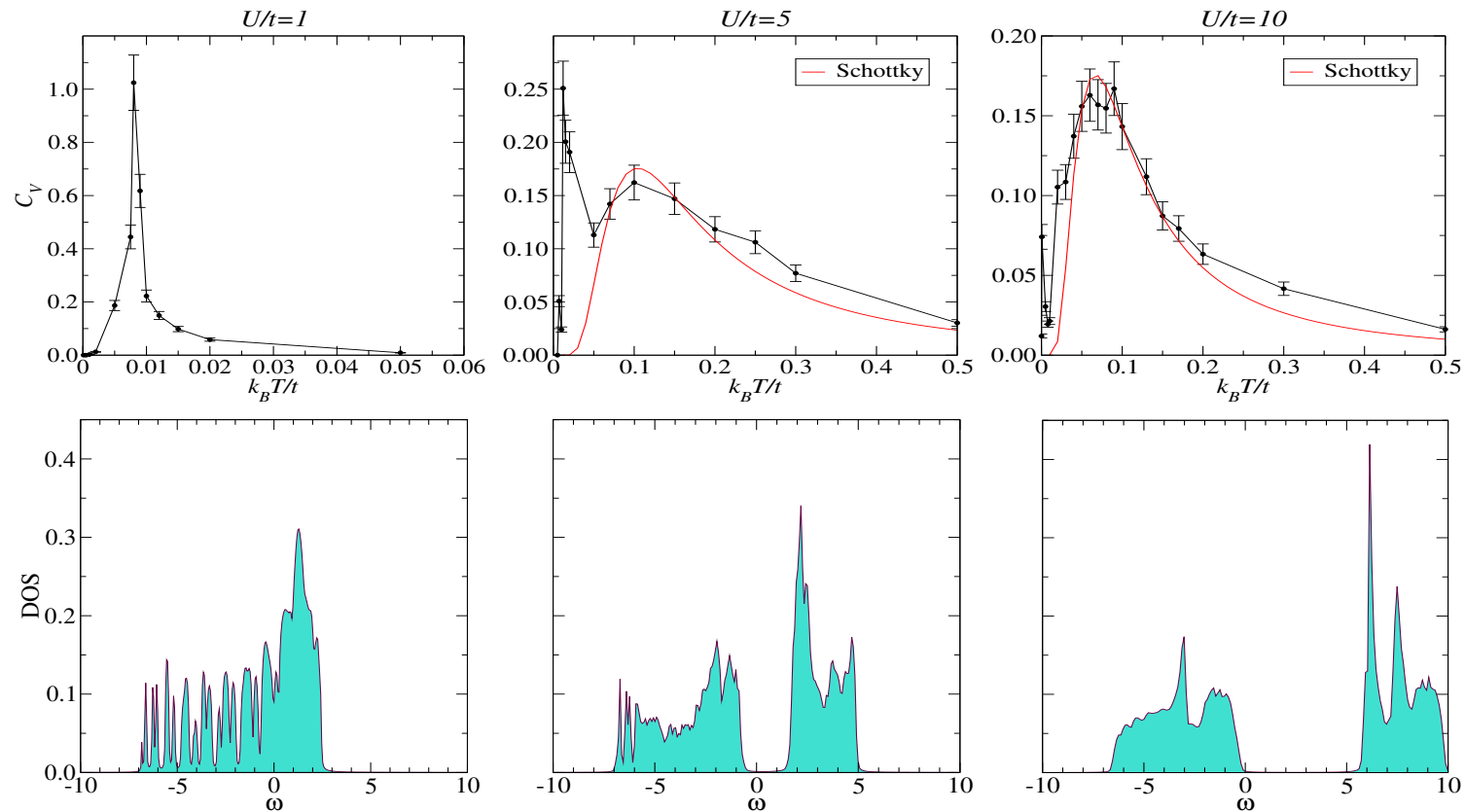
Oscylacje PDF mają
większy zasięg



Możliwe uporządkowanie dalekiego
zasięgu w niskich temperaturach!

SIEĆ TRÓJKĄTNA

Ciepło właściwe i gęstość stanów



- Ostry pik w cieple właściwym typu Isinga dla słabych oddziaływań U
- T_c obniża się wraz ze wzrostem oddziaływania U i dąży do zera, gdy $U \rightarrow \infty$
- Pik Schotky'ego w C_v dla średnich i silnych oddziaływań U