

Graphe du poids spectral : code de Bumsoo Kyung

Cette méthode utilise un fichier gnuplot, *gnuplot_fine.gp*, préparé par M. Bumsoo Kyung, pour générer un graphique en format EPS.

1. S'assurer que la ligne `const bool REAL_FREQ` au début du fichier *cdmft_hubbard_nr2.cpp* soit égale à la valeur booléenne `true` afin que les fichiers de données du poids spectral soient générés, puis lancer un calcul de façon standard.
2. Une fois le calcul terminé, copier le fichier *gnuplot_fine.gp* et tous les fichiers *A_** (qui se retrouvent dans le répertoire de résultats *[batchName]_XXXXX.BQ/XXXXX.BQ*) dans le même répertoire.
3. Ouvrir *gnuplot_fine.gp* avec un éditeur de texte.
4. Remplacer les noms des fichiers *A_** avec ceux placés dans le répertoire.
5. Corriger les infos en début de document (e.g. U/t, n, nom du fichier, etc.)
6. Sauvegarder et fermer le fichier.
7. Exécuter la commande : `gnuplot gnuplot_fine.gp`
8. Le résultat est un fichier de format *.eps*

Notons que les noms des fichiers de données du poids spectral ont la forme *A_8.0_4.00_.00_004_060.dat* pour le cas $U=8.0$, $\mu=4.00$ et $t'=0.00$. Les deux derniers chiffres, 004 et 060, correspondent aux vecteurs d'onde k_x et k_y respectivement. En fait, les valeurs du poids spectral sont calculées pour la moitié gauche diagonale supérieure ($k_y \geq k_x$) du premier quadrant de la zone de Brillouin, i.e. $k_x = 0$ à π et $k_y = 0$ à π . Ce quadrant est divisé en grille de 64×64 . Ainsi, *A_8.0_4.00_.00_004_060.dat* correspond au point $k_x = (4/64)\pi = 0.0625\pi$ et $k_y = 60/64\pi = 0.9375\pi$.

Graphe du poids spectral : code de David Sénéchal

La procédure suivante utilise les mêmes paramètres que ceux dans le code de M. Bumsoo Kyung afin de faciliter la comparaison entre le poids spectral généré par les deux codes. Cette méthode utilise un script Perl, *psplot2*, créé par M. David Sénéchal pour générer un graphique en format PLT et PDF.

1. Dans le fichier *para.dat*, ajuster la fréquence minimale du poids spectral `wmin`, la fréquence maximale `wmax`, le pas en fréquence `step` et l'élargissement lorentzien `eta`. Dans le code de M. Bumsoo Kyung, ces valeurs sont respectivement -15, 15, 0.025 et 0.125.
2. Encore dans le fichier *para.dat*, inscrire l'option `t 16` à la ligne `wavevectors` et uniquement l'option `-s` à la ligne `command_line`. Cette dernière générera seulement le poids spectral en évitant tout calcul de CDMFT et en utilisant les paramètres de bain définis dans le fichier. Bien entendu, on peut ajouter l'option `-cdmft` au besoin.

3. Une fois le calcul terminé, lancer la commande `psplot2 0.125 3 [batchName] *_sp` dans le répertoire où se trouvent les fichiers de données générés, `[batchName]_dw_sp` et `[batchName]_up_sp`. Ici, 0.125 correspond à la valeur du paramètre `eta` défini dans le fichier `para.dat`.
4. Le résultat est trois fichiers : deux fichiers PLT correspondant aux spins up et down et un fichier PDF, `spectre.pdf`, qui inclut les deux cas.

Notons que les fichiers `[batchName]_dw_sp` et `[batchName]_up_sp` contiennent toutes les données du poids spectral. La première ligne commentée affiche les paramètres de bain utilisés tandis que la seconde correspond aux vecteurs d'onde. Ces derniers sont en multiple de π .

Pour faire la correspondance entre les deux codes, la colonne (0.0625, 0.9375) correspondrait au fichier `A_8.0_4.00_.00_004_060.dat` dans le cas du code de M. Bumsoo Kyung.