

## QCT : Code de David Sénéchal

Pour une excellente introduction au code de M. David Sénéchal, on se référera au document *qct.pdf* rédigé par ce dernier.

### Utilisation de *qct*

1. Dans *\$HOME*, créer un répertoire *bin*.
2. Dans le répertoire *qct*, exécuter la commande : `rm *.o`
3. Exécuter ensuite : `make -f ms.mk`
4. Créer un répertoire pour les calculs et y mettre le programme *qct* (de *\$HOME/bin/*) et les fichiers de description de l'amas (*\*.cls*), de paramètres (*para.dat*) et de soumission de calculs (*bqsubmit.dat*).
5. Ajuster les paramètres des fichiers *para.dat* et *bqsubmit.dat*. À cet égard, voir la documentation *qct.pdf* et *bqTools.pdf*.
6. Exécuter la commande : `bqsubmit &`

### Fichier *bqsubmit.dat*

Voici un exemple de fichier *bqsubmit.dat* utilisé lors des calculs:

```
batchName = phase_diagr_t06
remoteHost = ss3
linkFiles = qct 2x2-8b.cls
templateFiles = para.dat
command = ./qct -cdmft -sym > out
concurrentJobs = 40
emailAddress = mchamber@physique.usherbrooke.ca
rsyncPeriod = 300
param1 = mu = [2.7 3.1 3.5 3.9]
```

Puisque ce fichier soumet différentes valeurs du paramètre  $\mu$  (potentiel chimique), le fichier *para.dat* doit inclure:

```
LATTICE_PARAMETERS
U      8
mu     ~~mu~~
tx     1
*
```

### Résultats

Les résultats importants sont inscrits dans le fichier *cdmft.dat* qui peut être ouvert à l'aide d'un éditeur de texte. Ce fichier est aussi aisément importable dans Excel.

## Paramétrisation

Voici quelques indications sur les paramètres à utiliser dans le fichier *para.dat* pour les différents états pour un réseau carré de 2 sites par 2 avec 8 sites de bain. On devrait ajouter les options suivantes à la ligne `command_line` dans tous les cas : `-cdmft -sym`. Notons finalement qu'il existe d'autres paramétrisations possibles pour l'état SC et SC+AF; une seule est présentée ici.

### État normal

1. On utilise le fichier d'amas *2x2-8b.cls* qu'on indique à la ligne `cluster_file`
2. Le nombre d'électrons `n_electrons` devrait avoir la valeur 12 (pour un secteur d'énergie fixe) ou 10 (pour un secteur d'énergie libre).
3. Les paramètres du réseau `LATTICE_PARAMETERS` devraient contenir  $U$  (énergie potentielle),  $\mu$  (potentiel chimique),  $t_x$  (amplitude de saut premiers voisins, noté  $t$  dans la littérature) et  $t_1$  (paramètres de saut seconds voisins, noté  $t'$  dans la littérature).
4. Les paramètres de l'amas `CLUSTER_PARAMETERS` devraient contenir les paramètres de bain de spin up, soit `tb1u`, `tb2u`, `eb1u` et `eb2u`.
5. Les paramètres variationnels `VARIATIONAL_PARAMETERS` devraient contenir les mêmes paramètres que précédemment. Pour éviter de tomber dans un minimum local, on peut mettre 0.5 au lieu de 0.1 comme valeur dans la troisième colonne.
6. On peut changer la fréquence de coupure à la ligne `frequency_cutoff`. Au lieu de 1.5, on peut utiliser 10, mais dans ce cas, il faut ajouter la commande `-self_dist` à la ligne `command_line`.

### État supraconducteur

1. On utilise le fichier *2x2-8b.cls* qu'on indique à la ligne `cluster_file`.
2. Le nombre d'électrons `n_electrons` doit être -1.
3. Les paramètres du réseau `LATTICE_PARAMETERS` sont les mêmes que pour l'état normal.
4. On ajoute `ds` avec une valeur de départ quelconque (e.g. 0.1) aux paramètres de l'amas `CLUSTER_PARAMETERS`.
5. On ajoute `ds` aux paramètres variationnels `VARIATIONAL_PARAMETERS` avec, par exemple, les valeurs suivantes : -8      8      0.5

### État supraconducteur+antiferromagnétisme

1. On utilise le fichier *2x2-8b.cls* qu'on indique à la ligne `cluster_file`.
2. Le nombre d'électrons `n_electrons` doit être -1.
3. Les paramètres du réseau `LATTICE_PARAMETERS` sont les mêmes que pour l'état normal.

4. On ajoute `M` avec une valeur de départ quelconque (e.g. 0.1) aux paramètres de l'amas `CLUSTER_PARAMETERS`.
5. On ajoute `M`, `dt` et `tb1d`, `tb2d`, `eb1d` et `eb2d` aux paramètres variationnels `VARIATIONAL_PARAMETERS` avec, par exemple, les valeurs suivantes : -8            8            0.5

### ***Propriétés***

Si on possède les paramètres de bain de l'état désiré, on peut facilement obtenir les autres propriétés du système (énergie cinétique, occupation double, paramètre d'ordre, etc.) et éviter tous les calculs de CDMFT en utilisant la commande `-prop` au lieu de `-cdmft` à la ligne `command_line`.