

Manual de Usuario

DFToy

Julian Cogua & Juan Esteban Neira

Índice

1. Introducción	3
2. Marco Teórico — DFTOY	3
2.1. Introducción a la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)	3
2.2. DFT en 1D	3
2.3. Potencial Externo	3
2.4. Ciclo Auto-Consistente (SCF)	4
2.5. Resultados y Visualización	4
3. Requisitos del sistema	4
4. Instalación	5
4.1. Desde PyPI	5
4.2. Instalación manual	5
5. Uso de la aplicación	5
5.1. Ejecución	5
5.2. Ejecución SCF	7
5.3. Salidas y gráficos	7
6. Uso de la GUI	8
6.1. Menú <i>Archivo</i>	8
6.2. Menú <i>Edición</i>	8
6.3. Menú <i>Simulación</i>	8
6.4. Menú <i>Resultados</i>	9
6.5. Menú <i>Ayuda</i>	9
6.6. Ventana <i>Parámetros</i>	9
6.7. Ventana <i>Gráfica</i>	9
6.8. Ventana <i>Línea de tiempo de mensajes y alertas</i>	10
7. Consejos de uso	10
8. Ejemplo Práctico de DFT: Sistema de Dos Partículas con Potencial x	11
8.1. Definición del Sistema	11
8.2. Ecuación Clave y Potencial Efectivo	12
8.3. Procedimiento Iterativo en DFTOY	12

8.4. Resultados Típicos	12
8.5. Analogía Didáctica	13
9. Preguntas frecuentes	13
10. Contacto	13

1. Introducción

Este manual proporciona instrucciones para el uso de **DFToy**, una aplicación para la simulación de densidades electrónicas en sistemas unidimensionales utilizando el método SCF. El manual está dirigido a usuarios finales y no requiere conocimientos de programación.

2. Marco Teórico — DFTOY

2.1. Introducción a la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

La **Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)** es un método de mecánica cuántica para estudiar sistemas electrónicos. La idea principal es que las propiedades fundamentales de un sistema de electrones pueden derivarse de la **densidad electrónica** $\rho(x)$, en lugar de la función de onda completa $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_N)$.

Esto simplifica los cálculos, ya que la densidad depende solo de tres coordenadas espaciales (en 3D) en lugar de $3N$ coordenadas, donde N es el número de electrones.

2.2. DFT en 1D

DFTOY implementa **DFT unidimensional (1D)** con fines pedagógicos y de visualización. El espacio se discretiza en una **malla uniforme** de N puntos:

$$x_i = x_0 + i\Delta x, \quad i = 0, 1, \dots, N - 1$$

donde Δx es el tamaño del paso. La densidad inicial $\rho^{(0)}(x_i)$ puede definirse como:

- Constante (uniforme)
- Función gaussiana centrada
- Importada desde una simulación previa

2.3. Potencial Externo

El usuario puede definir un **potencial externo** $V_{\text{ext}}(x)$, representando efectos de núcleos, campos eléctricos o confinamientos. Ejemplos típicos:

- Pozo cuadrado
- Potencial armónico
- Barrera de potencial
- Función personalizada

2.4. Ciclo Auto-Consistente (SCF)

El ciclo **SCF** (Self-Consistent Field) se implementa siguiendo los pasos:

1. Inicializar la densidad $\rho^{(0)}(x)$
2. Calcular el potencial efectivo $V_{\text{eff}}(x)$:

$$V_{\text{eff}}(x) = V_{\text{ext}}(x) + V_H[\rho](x) + V_{\text{xc}}[\rho](x)$$

donde $V_H[\rho](x)$ es el potencial de Hartree y $V_{\text{xc}}[\rho](x)$ el potencial de intercambio-correlación.

3. Resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_{\text{eff}}(x) \right] \psi_i(x) = \epsilon_i \psi_i(x)$$

para obtener los orbitales $\psi_i(x)$ y energías ϵ_i .

4. Calcular la nueva densidad:

$$\rho^{(k+1)}(x) = \sum_i f_i |\psi_i(x)|^2$$

donde f_i es la ocupación del orbital i .

5. Verificar el criterio de convergencia:

$$\max |\rho^{(k+1)}(x) - \rho^{(k)}(x)| < \varepsilon$$

Si no se cumple, repetir desde el paso 2.

2.5. Resultados y Visualización

Al converger el ciclo SCF, DFTOY calcula:

- **Densidad electrónica final** $\rho(x)$
- **Potencial efectivo** $V_{\text{eff}}(x)$
- **Energía total** $E[\rho]$

El software genera automáticamente **gráficas** para visualizar densidad, potencial y energía, facilitando la interpretación de resultados.

3. Requisitos del sistema

- Sistema operativo: Linux, Windows o MacOS.
- Python 3.8 o superior.
- Librerías: NumPy, Matplotlib.
- Gnuplot.

4. Instalación

4.1. Desde PyPI

1. Abrir terminal o CMD.
2. Ejecutar:

```
pip install dftoy
```

3. Confirmar que la instalación fue correcta ejecutando:

```
dftoy --help
```

4.2. Instalación manual

1. Descargar el repositorio desde GitHub.
2. Navegar a la carpeta raíz y ejecutar:

```
pip install .
```

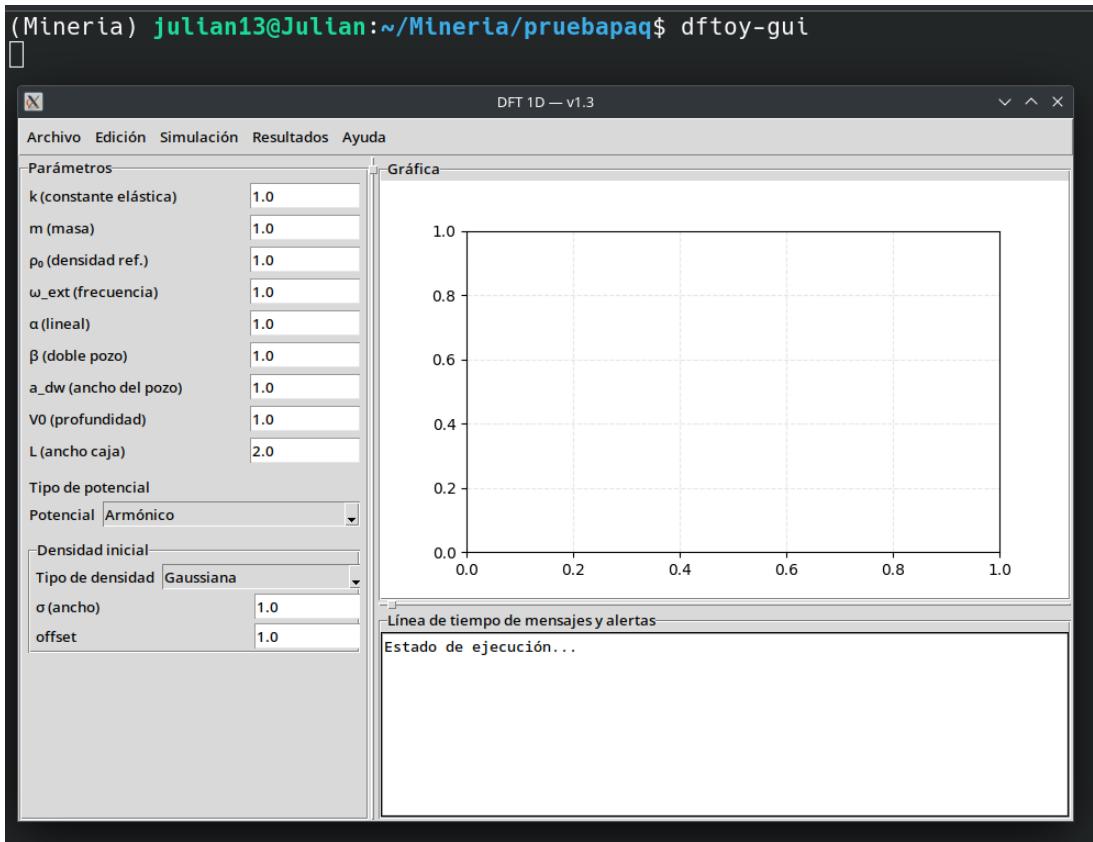
5. Uso de la aplicación

5.1. Ejecución

- Para ejecutar el programa desde terminal (sin GUI) solo escriba dftoy en la terminal y presione *Enter*.

```
(Mineria) julian13@Julian:~/Mineria/pruebapaq$ dftoy
```

- Para ejecutar la GUI (Interfaz gráfica) escriba dftoy-gui en la terminal y presione *Enter*, esto abrirá la GUI en una nueva ventana.



- Ingresar los parámetros solicitados (masa, constante k , densidad inicial ρ_0).
- Seleccionar el tipo de potencial externo:
 1. $v(x) = \alpha|x|$
 2. $v(x) = \beta(x^2 - a^2)^2$ (doble pozo)
 3. $v(x) = 0,5m\omega_{\text{ext}}^2x^2$ (armónico)
 4. $v(x) = -V_0$ en $|x| < L/2$ (pozo cuadrado finito)
- Introducir los parámetros específicos de cada potencial.
- Seleccionar el tipo de densidad inicial:
 1. Gaussiana
 2. Bimodal
 3. Lorentziana

```

Ingrese el valor de k: 1
Ingrese el valor de m: 1
Ingrese el valor de rho_0: 1

Seleccione el potencial externo:
1. v(x) = alpha * |x|
2. v(x) = beta * (x^2 - a^2)^2 (doble pozo)
3. v(x) = 0.5 * m * omega_ext^2 * x^2 (armónico)
4. v(x) = -V0 en |x| < L/2 (pozo cuadrado finito)
Opción: 1
Ingrese el valor de alpha (coeficiente de |x| en v(x)): 1

Seleccione tipo de densidad inicial:
1. Gaussiana
2. Bimodal
3. Lorentziana
Opción: 1

```

5.2. Ejecución SCF

- El programa prepara la malla espacial y la densidad inicial.
- Calcula iterativamente la densidad autoconsistente usando SCF.
- Muestra en consola la energía química μ , la energía del estado fundamental E y el tiempo de cálculo.

```

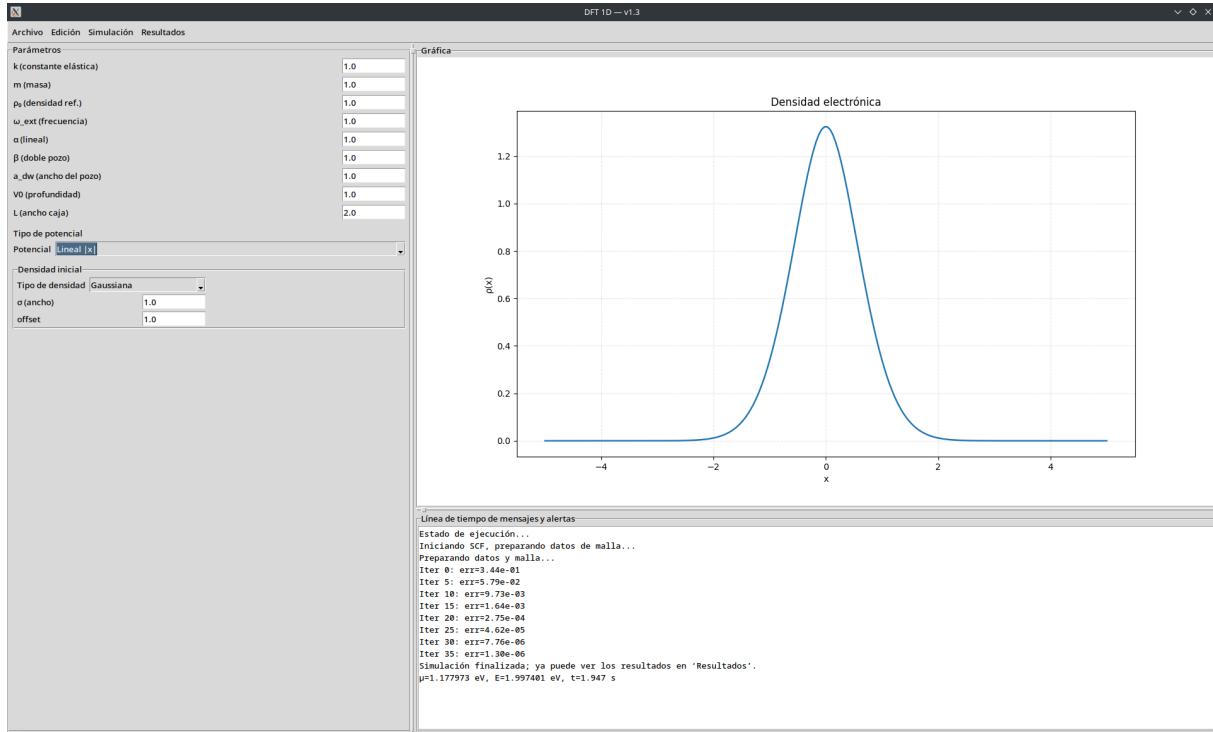
Energía química (mu): 1.1779727724070899 J
Energía del estado fundamental (E): 1.9974010188327007 J
Tiempo total de cálculo: 0.44 segundos.

```

5.3. Salidas y gráficos

- Se generan archivos:
 - `rho_vs_x.dat`: densidad calculada.
 - `convergencia.dat`: error SCF por iteración.
 - `plot.gp`, `convergencia.gp`: scripts de gnuplot.
 - `rho_vs_x.eps` y `convergencia.eps`: gráficos finales.
- Los gráficos se pueden abrir directamente desde la GUI o usando un visualizador de EPS.

6. Uso de la GUI



6.1. Menú Archivo

- **Nuevo:** Reinicia la GUI, limpia la ventana de gráfica; línea de tiempo y mensajes; además, devuelve los parámetros a su configuración inicial.
- **Abrir:** Permite abrir archivos guardados con extensión *.dftoy* .
- **Guardar:** Permite guardar archivos con extensión *.dftoy* .
- **Exportar $\rho(x)$:** Exporta los datos de la gráfica de densidad electrónica Vs. posición en un *.dat*.
- **Salir:** Cierra la GUI.

6.2. Menú Edición

- **Limpiar terminal:** Limpia solo la línea de tiempo y mensajes, lo demás se conserva.

6.3. Menú Simulación

- **Ejecutar SCF:** Da inicio al ciclo autoconsistente (SCF) usando los parámetros, tipo de densidad inicial y tipo de potencial externo seleccionados por el usuario.
- **Cancelar:** Cancela el ciclo autoconsistente y reinicia la GUI.

6.4. Menú *Resultados*

- **Potencial externo:** Muestra la gráfica del potencial externo seleccionado y determinado por los parámetros en la ventana de *Gráfica*.
- **Potencial efectivo:** Muestra la gráfica del potencial efectivo determinado por los parámetros en la ventana de *Gráfica*.
- **Estados(n=0...3):** Muestra la gráfica de los primeros 3 estados producidos por la configuración seleccionada en la ventana de *Gráfica*.
- **Densidad $\rho(x)$:** Muestra la gráfica de la densidad electrónica Vs. posición producida por la configuración seleccionada en la ventana de *Gráfica*.
- **Convergencia:** Muestra la gráfica de convergencia producida por la configuración seleccionada en la ventana de *Gráfica*.

6.5. Menú *Ayuda*

- **Manual de usuario:** Abre en el visor de pdf de su equipo el Manual de Usuario.

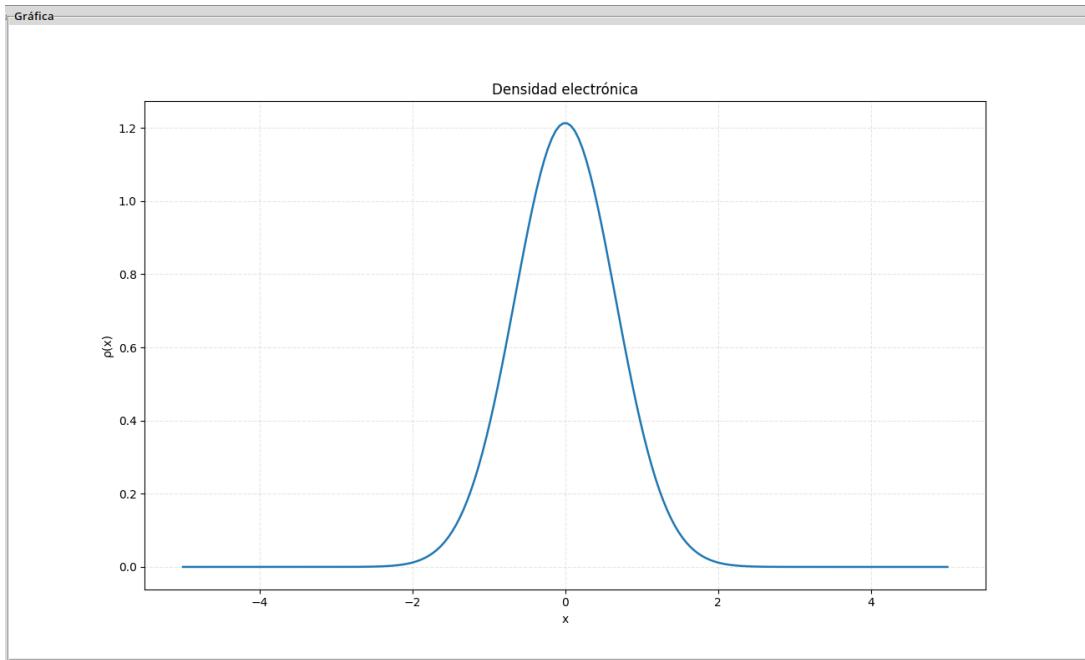
6.6. Ventana *Parámetros*

Ubicada en la parte izquierda de la GUI, en ella se pueden dar valores a todos los parámetros y seleccionar el tipo de potencial externo y tipo de densidad inicial que se desea usar.

Parámetros	
k (constante elástica)	1.0
m (masa)	1.0
ρ_0 (densidad ref.)	1.0
ω_{ext} (frecuencia)	1.0
α (lineal)	1.0
β (doble pozo)	1.0
a_dw (ancho del pozo)	1.0
V0 (profundidad)	1.0
L (ancho caja)	2.0
Tipo de potencial	
Potencial	Armónico
Densidad inicial	
Tipo de densidad	Gaussiana
σ (ancho)	1.0
offset	1.0

6.7. Ventana *Gráfica*

Ubicada en la parte superior derecha, en ella se pueden visualizar las diferentes gráficas que genera el programa y que se pueden cambiar en el menú *Resultados*, como ya se mencionó anteriormente.



6.8. Ventana Línea de tiempo de mensajes y alertas

Ubicada en la parte inferior derecha, aquí se muestran todos los mensajes como error en iteraciones, inicialización y finalización del ciclo autoconsistente. Además, al finalizar la simulación muestra el potencial químico, energía fundamental y el tiempo total que tomó la simulación.

```
Línea de tiempo de mensajes y alertas
Nuevo proyecto listo.
Iniciando SCF, preparando datos de malla...
Preparando datos y malla...
Iter 0: err=2.95e-01
Iter 5: err=4.96e-02
Iter 10: err=8.33e-03
Iter 15: err=1.40e-03
Iter 20: err=2.35e-04
Iter 25: err=3.96e-05
Iter 30: err=6.65e-06
Iter 35: err=1.12e-06
Simulación finalizada; ya puede ver los resultados en 'Resultados'.
μ=0.874522 eV, E=1.390500 eV, t=0.973 s
```

7. Consejos de uso

- Usar valores de k y m razonables para asegurar convergencia.
- Revisar los gráficos para detectar posibles errores o inestabilidades.
- Consultar los archivos de salida para análisis detallado.

8. Ejemplo Práctico de DFT: Sistema de Dos Partículas con Potencial $|x|$

La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) permite transformar un problema de muchos cuerpos en un problema equivalente de una sola partícula. DFTOY está diseñado para resolver esta transformación de manera exacta para sistemas de **dos partículas en una dimensión** con interacción armónica.

8.1. Definición del Sistema

Consideramos un sistema de dos partículas en 1D descrito por el Hamiltoniano:

$$H = \sum_{i=1}^2 \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx_i^2} + v(x_i) \right] + u(x_1, x_2)$$

Para este ejemplo, aplicamos el Caso 2:

- **Potencial Externo $v(x)$:** Proporcional al valor absoluto de la posición: $v(x) = a|x|$.
- **Interacción $u(x_1, x_2)$:** Armónica: $u(x_1, x_2) = \frac{k}{2}(x_1 - x_2)^2$.

Parámetros de ejemplo:

- $a = 1 \text{ J}$
- $k/m = 1 \text{ J/L}^2$, con $L = \sqrt{\hbar^2/(mJ)}$.

Parámetros	
k (constante elástica)	1.0
m (masa)	1.0
ρ_0 (densidad ref.)	1.0
ω_{ext} (frecuencia)	1.0
α (lineal)	1.0
β (doble pozo)	1.0
a_{dw} (ancho del pozo)	1.0
V_0 (profundidad)	1.0
L (ancho caja)	2.0

Tipo de potencial

Potencial Lineal $|x|$

Densidad inicial	
Tipo de densidad	Gaussiana
σ (ancho)	1.0
offset	1.0

8.2. Ecuación Clave y Potencial Efectivo

El objetivo de DFT es resolver la ecuación tipo Schrödinger para una sola partícula $f(x)$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + v_{\text{eff}}(x) \right] f(x) = \mu f(x)$$

donde μ es el multiplicador de Lagrange.

El potencial efectivo es:

$$v_{\text{eff}}(x) = v(x) + \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho(x)}$$

Para el sistema con interacción armónica y $v(x) = a|x|$, DFTOY calcula $v_{\text{eff}}(x)$ iterativamente a partir de la densidad inicial $\rho^{(0)}(x)$.

8.3. Procedimiento Iterativo en DFTOY

El ciclo SCF se realiza en cuatro pasos:

Paso 1: Inicialización y Primera Iteración

- Definir densidad inicial $\rho^{(0)}(x)$ o potencial inicial $v_{\text{eff}}^{(0)}(x)$.
- Resolver la ecuación de Schrödinger numéricamente para obtener $f^{(1)}(x)$ y $\mu^{(1)}$.
- Calcular la nueva densidad: $\rho^{(1)}(x) = 2|f^{(1)}(x)|^2$.

Paso 2: Iteraciones Sucesivas

- Recalcular v_{eff} usando $\rho^{(1)}(x)$ y resolver nuevamente la ecuación de Schrödinger.
- Obtener $f^{(2)}(x)$ y $\rho^{(2)}(x)$.

Paso 3: Convergencia

- Repetir el proceso hasta que $\rho^{(i+1)}(x) \approx \rho^{(i)}(x)$.
- Alternativamente, detener cuando $\mu^{(i+1)} \approx \mu^{(i)}$.

Paso 4: Resultados Finales

- La densidad final $\rho(x)$ corresponde a la última $f(x)$ convergente.
- La energía de estado fundamental se calcula mediante:

$$E = 2\mu - \frac{2\nu\hbar(\nu_0 + \nu)}{4\nu_0}$$

8.4. Resultados Típicos

Para $a = 1$ J y $k/m = 1$ J/L², el cálculo de DFTOY converge a:

- **Energía de estado fundamental:** $E \approx 1,24 \times 10^{19}$ eV
- **Potencial químico del sistema:** $\mu \approx 7,35$ eV

La densidad $\rho(x)$ muestra un estrecho acuerdo con métodos variacionales, con pequeñas discrepancias cerca de $x = 0$.

```

Línea de tiempo de mensajes y alertas
Estado de ejecución...
Iniciando SCF, preparando datos de malla...
Preparando datos y malla...
Iter 0: err=3.44e-01
Iter 5: err=5.79e-02
Iter 10: err=9.73e-03
Iter 15: err=1.64e-03
Iter 20: err=2.75e-04
Iter 25: err=4.62e-05
Iter 30: err=7.76e-06
Iter 35: err=1.30e-06
Simulación finalizada; ya puede ver los resultados en 'Resultados'.
μ=7.35233e+18 eV, E=1.24668e+19 eV, t=0.754 s

```

8.5. Analogía Didáctica

El proceso iterativo puede compararse con afinar un instrumento musical:

- Se comienza con una nota inicial (densidad $\rho^{(0)}$)
- Se toca la cuerda (potencial v_{eff})
- Se ajusta la afinación (resolviendo la ecuación de Schrödinger)
- Se repite hasta obtener una nota estable (densidad convergente)

9. Preguntas frecuentes

- **¿Qué hacer si SCF no converge?** Ajustar la densidad inicial o los parámetros de mezcla en la configuración.
- **¿Puedo usar otros potenciales?** Solo los predefinidos en la aplicación, salvo que se modifique el código.

10. Contacto

Para dudas o soporte, contactar a:

- Julián Cogua Arévalo, email:ojcoguaa@udistrital.edu.co
- Juan Esteban Neira Diaz, email:jueneirad@udistrital.edu.co

Repositorio de Github

<https://github.com/XxyamzxX/DFTOY>

Documentación

<https://xxymzxx.github.io/dftoy/>