

# Manual de Usuario

## DFToy

Julian Cogua & Juan Esteban Neira

## Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>2</b>
<b>2. Requisitos del sistema</b>	<b>2</b>
<b>3. Instalación</b>	<b>2</b>
3.1. Desde PyPI . . . . .	2
3.2. Instalación manual . . . . .	2
<b>4. Uso de la aplicación</b>	<b>2</b>
4.1. Ejecución . . . . .	2
4.2. Ejecución SCF . . . . .	4
4.3. Salidas y gráficos . . . . .	4
<b>5. Uso de la GUI</b>	<b>5</b>
5.1. Menú <i>Archivo</i> . . . . .	5
5.2. Menú <i>Edición</i> . . . . .	5
5.3. Menú <i>Simulación</i> . . . . .	5
5.4. Menú <i>Resultados</i> . . . . .	6
5.5. Menú <i>Ayuda</i> . . . . .	6
5.6. Ventana <i>Parámetros</i> . . . . .	6
5.7. Ventana <i>Gráfica</i> . . . . .	6
5.8. Ventana <i>Línea de tiempo de mensajes y alertas</i> . . . . .	7
<b>6. Consejos de uso</b>	<b>7</b>
<b>7. Preguntas frecuentes</b>	<b>8</b>
<b>8. Contacto</b>	<b>8</b>

# 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. Requisitos del sistema

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

## 3. Instalación

### 3.1. Desde PyPI

1. Abrir terminal o CMD.
2. Ejecutar:

```
pip install dftoy
```

3. Confirmar que la instalación fue correcta ejecutando:

```
dftoy --help
```

### 3.2. Instalación manual

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

```
pip install .
```

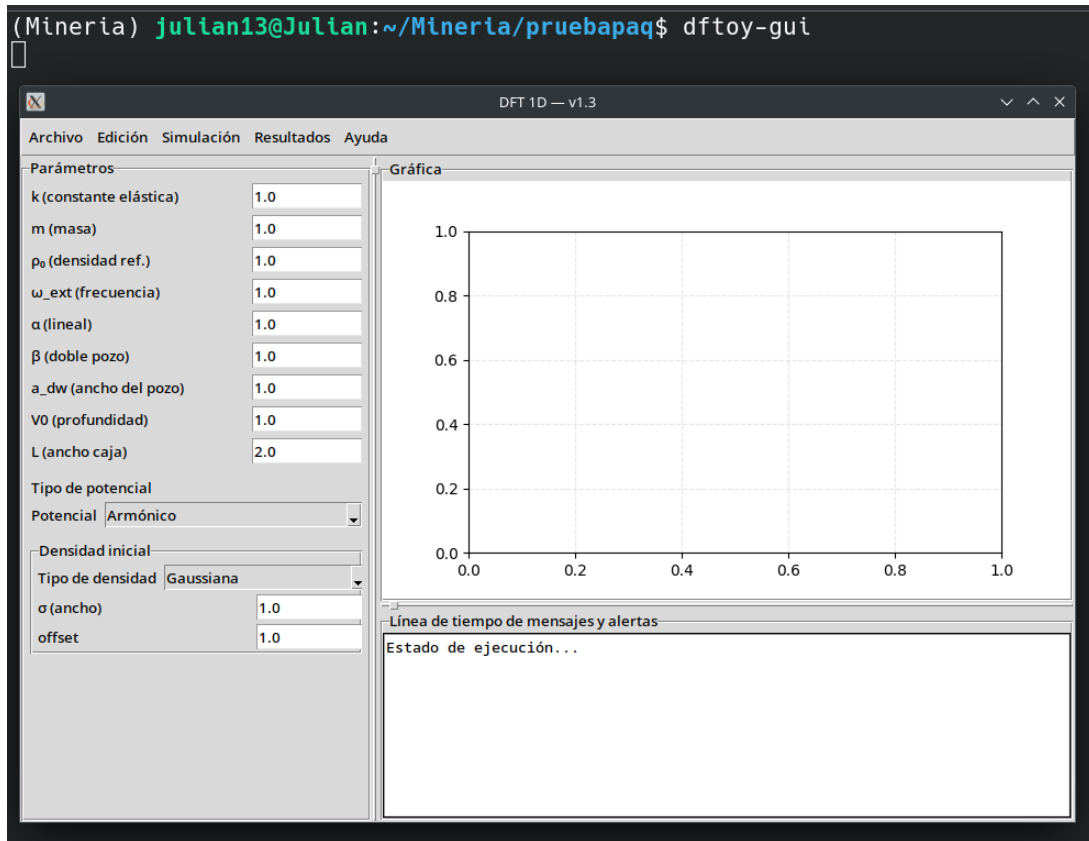
## 4. Uso de la aplicación

### 4.1. 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  $\rho_0$ ).
- Seleccionar el tipo de potencial externo:
  1.  $v(x) = \alpha|x|$
  2.  $v(x) = \beta(x^2 - a^2)^2$  (doble pozo)
  3.  $v(x) = 0,5m\omega_{\text{ext}}^2 x^2$  (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

```

## 4.2. 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  $\mu$ , la energía del estado fundamental  $E$  y el tiempo de cálculo.

```

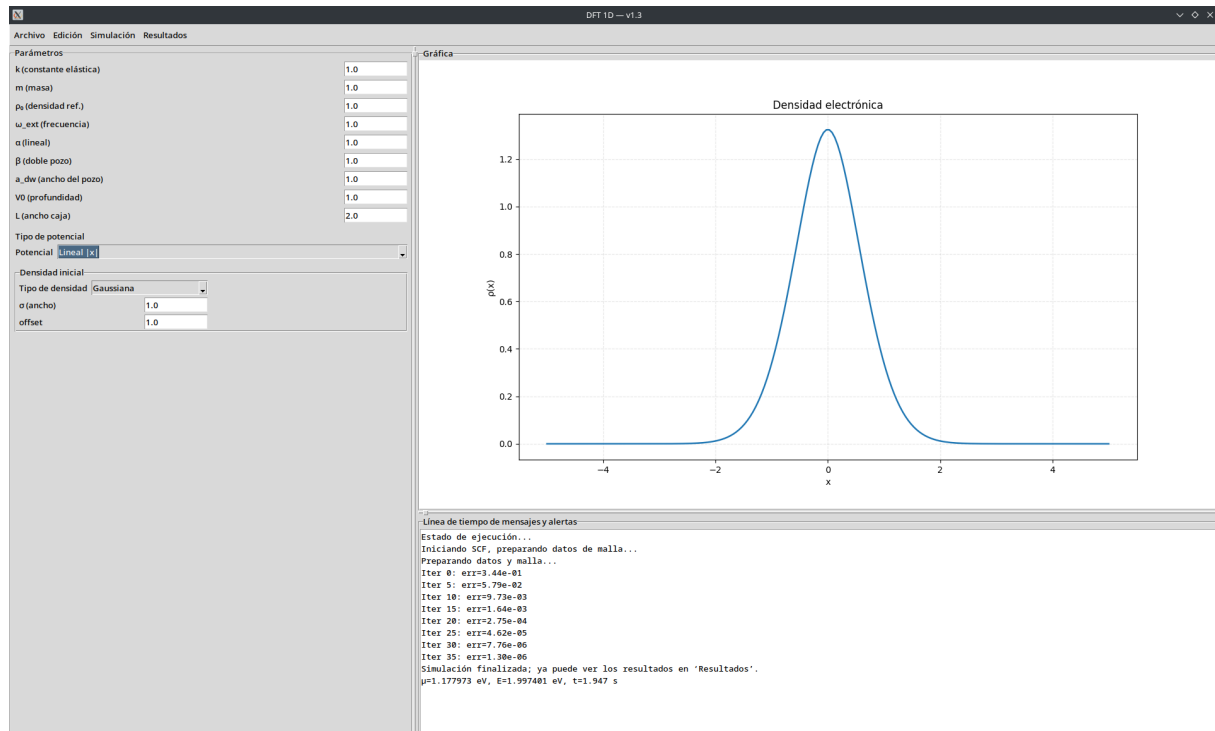
Energía química (mu): 1.1779727724070899 J
Energía del estado fundamental (E): 1.9974010188327007 J
Tiempo total de cálculo: 0.44 segundos.

```

## 4.3. 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.

## 5. Uso de la GUI



### 5.1. 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 .DFT.
- **Guardar:** Permite guardar archivos con extensión .DFT.
- **Exportar  $\rho(x)$ :** Exporta los datos de la gráfica de densidad electrónica Vs. posición en un .dat.
- **Salir:** Cierra la GUI.

### 5.2. Menú *Edición*

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

### 5.3. 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.

## 5.4. 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*.

## 5.5. Menú *Ayuda*

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

## 5.6. Ventana *Parámetros*

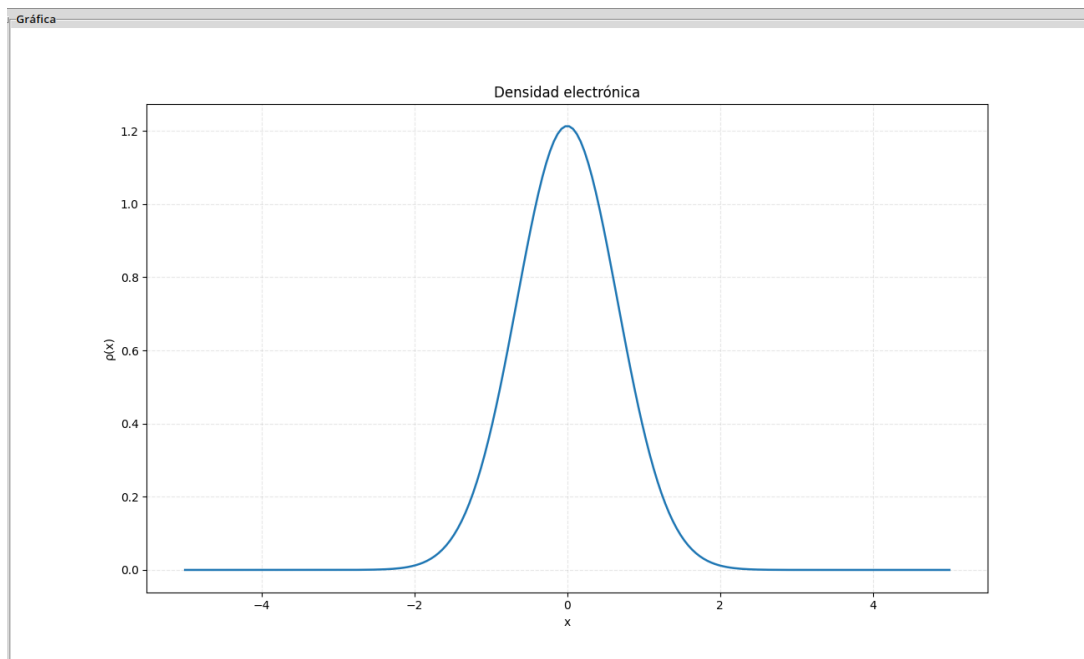
Ubicada en la parte izquierda de la GUI, en ella se pueden dar valores a todos los parámetros y seleccionar el tipo de potencial externo y tipo de densidad inicial que se desea usar.

The screenshot shows a window titled "Parámetros" with the following controls:

- Parameters with numerical input fields:
  - k (constante elástica): 1.0
  - m (masa): 1.0
  - $\rho_0$  (densidad ref.): 1.0
  - $\omega_{ext}$  (frecuencia): 1.0
  - $\alpha$  (lineal): 1.0
  - $\beta$  (doble pozo): 1.0
  - a\_dw (ancho del pozo): 1.0
  - V0 (profundidad): 1.0
  - L (ancho caja): 2.0
- Potential type: A dropdown menu labeled "Tipo de potencial" with "Potencial Armónico" selected.
- Density initial section:
  - Tipo de densidad: A dropdown menu with "Gaussiana" selected.
  - $\sigma$  (ancho): 1.0
  - offset: 1.0

## 5.7. 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.



## 5.8. 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 tomo 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'.
 $\mu=0.874522$  eV,  $E=1.390500$  eV,  $t=0.973$  s

```

## 6. 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.

## 7. 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.

## 8. 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://xxyamzxx.github.io/dftoy/>