

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

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.
- 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 .
```

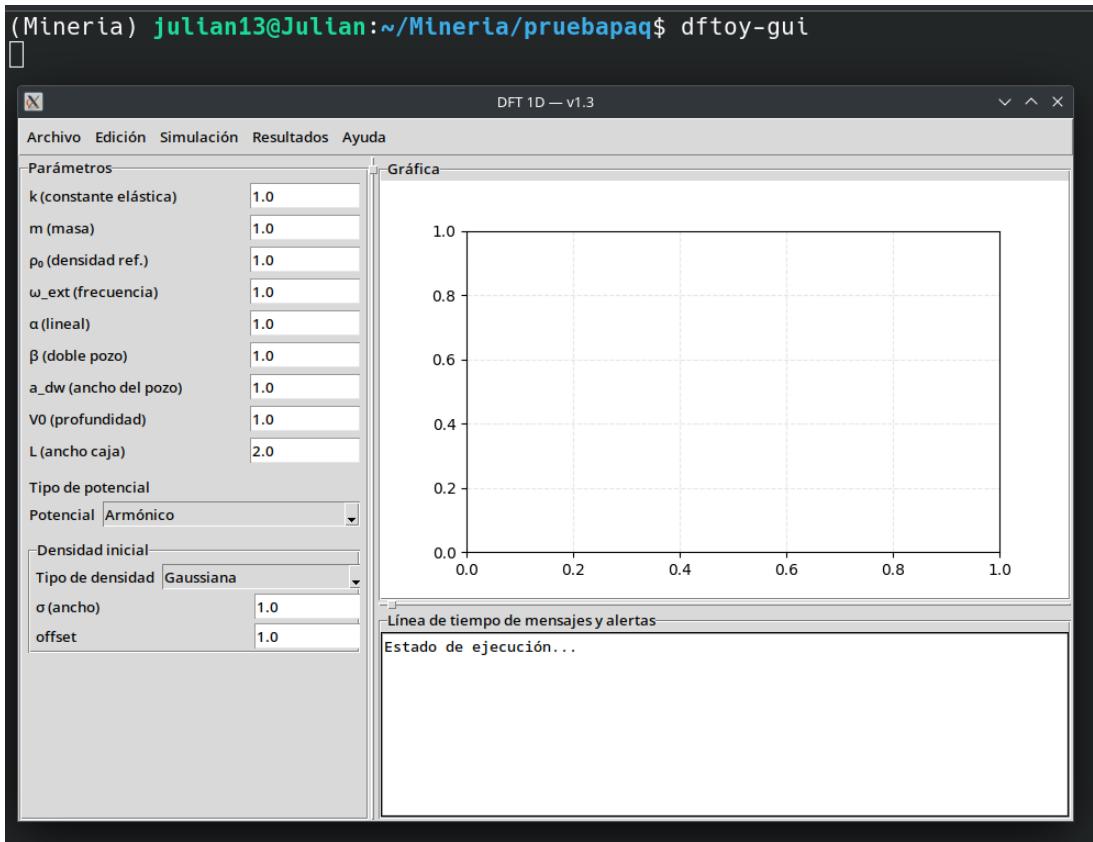
5. Uso de la aplicación

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.

```

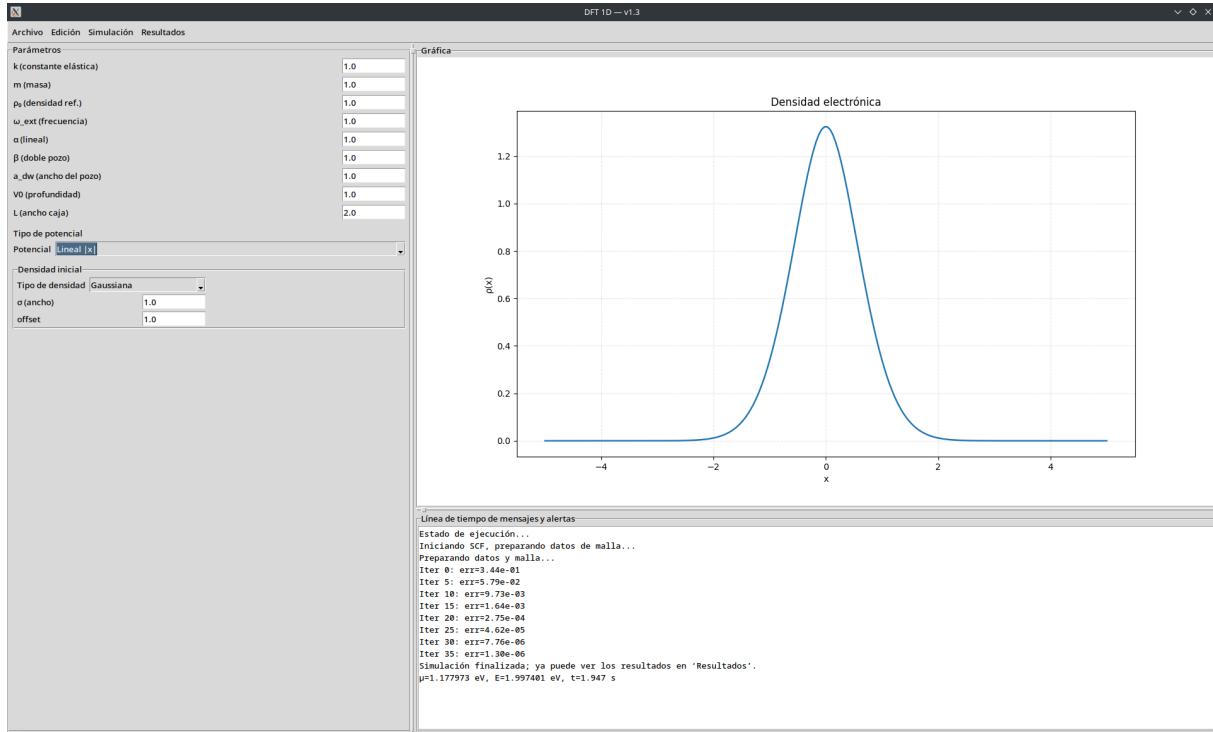
Energía química (mu): 1.1779727724070899 J
Energía del estado fundamental (E): 1.9974010188327007 J
Tiempo total de cálculo: 0.44 segundos.

```

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.

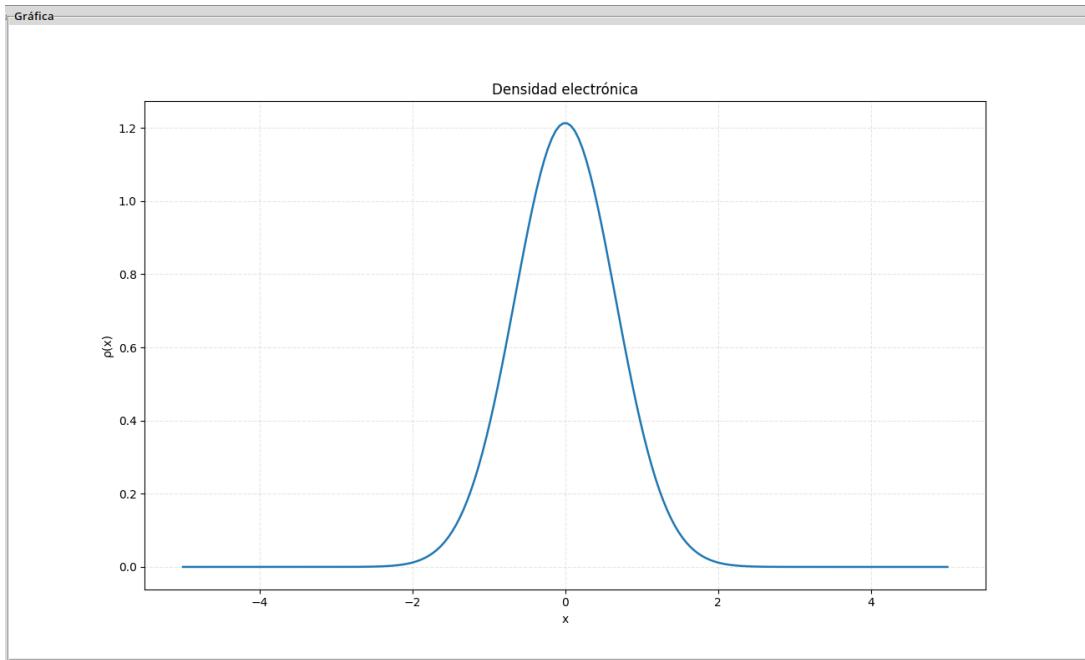
6.6. Ventana *Parámetros*

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:** $\mu \approx 7,35 \times 10^{18}$ 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
```

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 para programadores

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