

# Manual de Usuario

## DFToy

Julian Cogua & Juan Esteban Neira

## Índice

<b>1. Introducción</b>	<b>3</b>
<b>2. Marco Teórico — DFTOY</b>	<b>3</b>
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
<b>3. Requisitos del sistema</b>	<b>4</b>
<b>4. Instalación</b>	<b>5</b>
4.1. Desde PyPI . . . . .	5
4.2. Instalación manual . . . . .	5
<b>5. Uso de la aplicación</b>	<b>5</b>
5.1. Ejecución . . . . .	5
5.2. Ejecución SCF . . . . .	7
5.3. Salidas y gráficos . . . . .	7
<b>6. Uso de la GUI</b>	<b>8</b>
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
<b>7. Consejos de uso</b>	<b>10</b>
<b>8. Ejemplo Práctico de DFT: Sistema de Dos Partículas con Potencial <math> x </math></b>	<b>11</b>
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

<b>9. Preguntas frecuentes</b>	<b>13</b>
<b>10.Contacto</b>	<b>13</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. 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 **mallla uniforme** de  $N$  puntos:

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

donde  $\Delta x$  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  $\epsilon_i$ .

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:

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

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 .
```

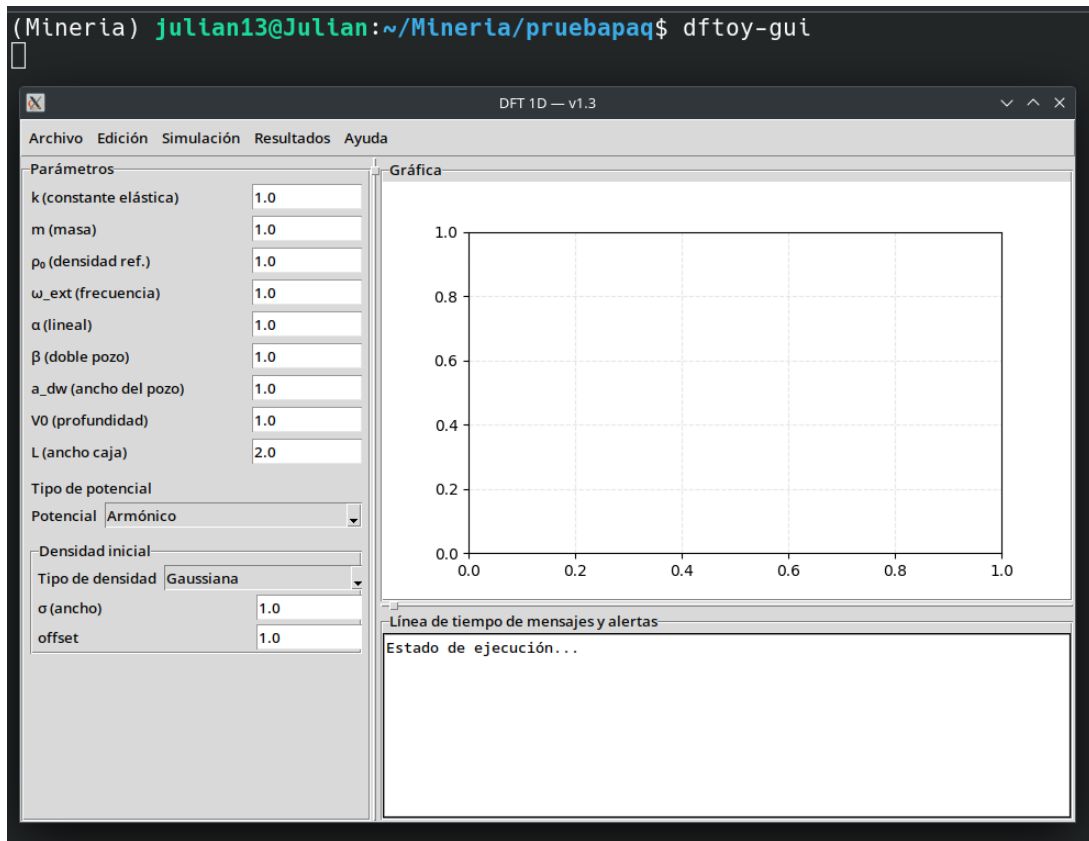
## 5. Uso de la aplicación

### 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  $\rho_0$ ).
- 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

```

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

```

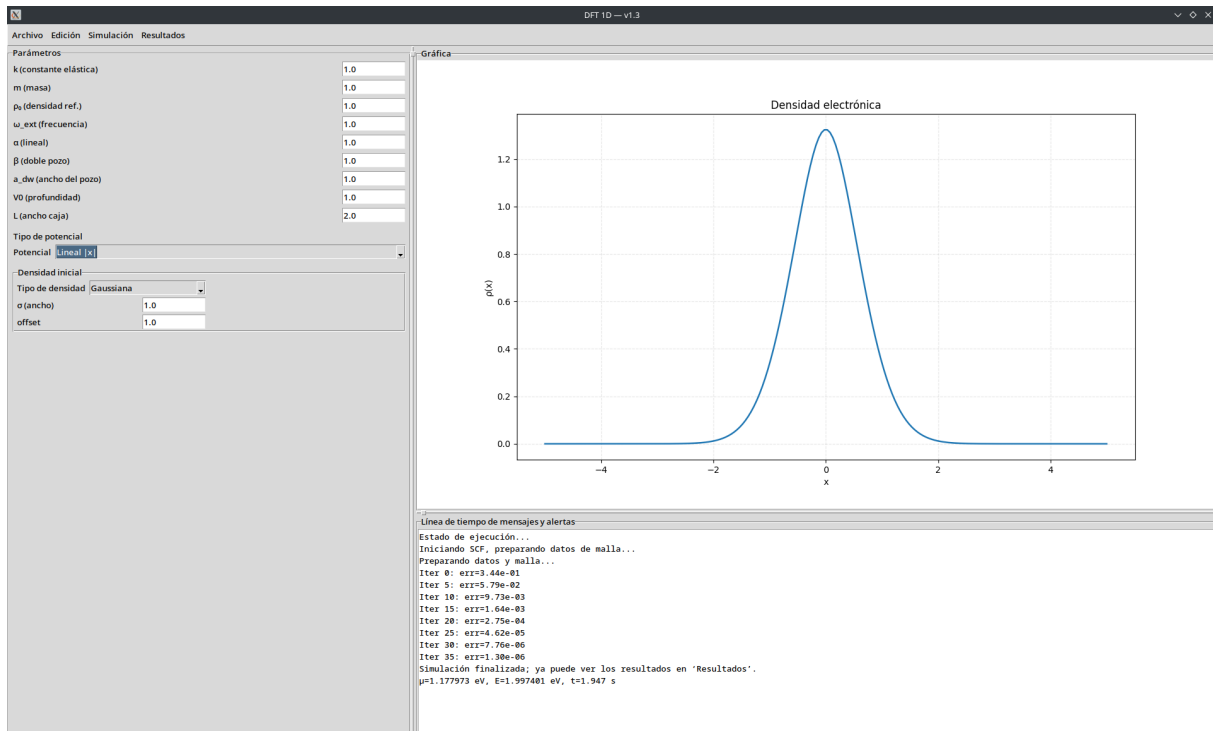
Energía química (mu): 1.1779727724070899 J
Energía del estado fundamental (E): 1.9974010188327007 J
Tiempo total de cálculo: 0.44 segundos.

```

## 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*

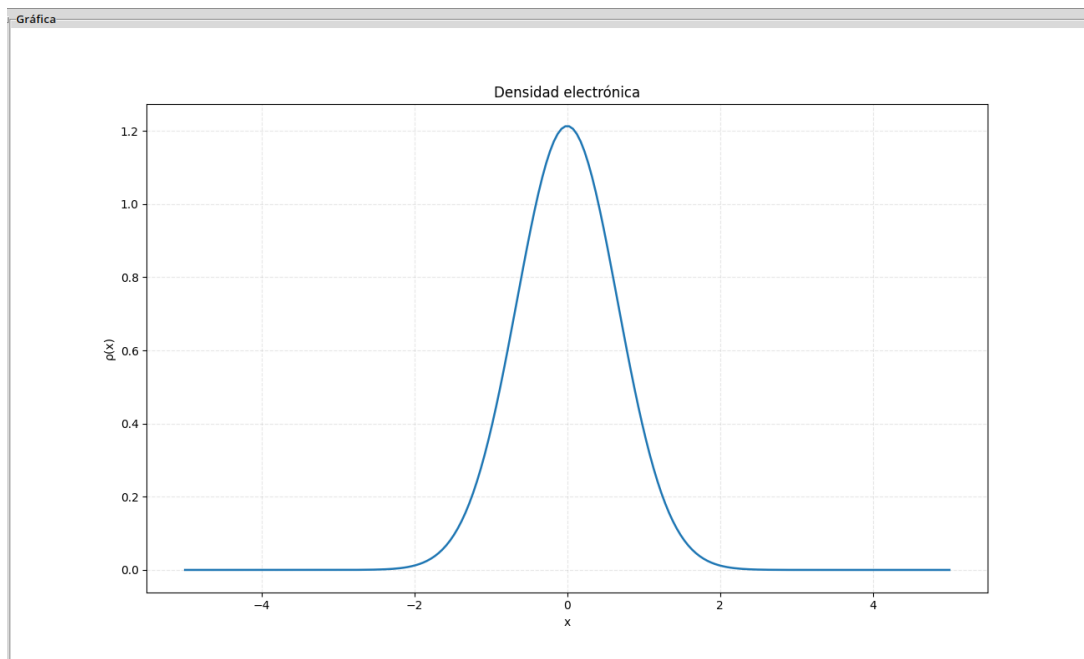
Ubicada en la parte izquierda de la GUI, en ella se pueden dar valores a todos los parámetros y seleccionar el tipo de potencial externo y tipo de densidad inicial que se desea usar.

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

- Parameters with 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
- Tipo de potencial:
  - Potencial: Armónico (dropdown menu)
- Densidad inicial:
  - Tipo de densidad: Gaussiana (dropdown menu)
  - $\sigma$  (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 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'.
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:

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

Parámetros	
k (constante elástica)	1.0
m (masa)	1.0
$\rho_0$ (densidad ref.)	1.0
$\omega_{\text{ext}}$ (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
Tipo de potencial	
Potencial	Lineal  x
Densidad inicial	
Tipo de densidad	Gaussiana
$\sigma$ (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  $\mu$  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  $v_{\text{eff}}$  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  $a = 1 \text{ J}$  y  $k/m = 1 \text{ J/L}^2$ , el cálculo de DFTOY converge a:

- **Energía de estado fundamental:**  $E \approx 1,24 \times 10^{19} \text{ eV}$
- **Potencial químico del sistema:**  $\mu \approx 7,35 \times 10^{18} \text{ eV}$

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'.
 $\mu=7.35233e+18$  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](mailto:ojcoguaa@udistrital.edu.co)
- Juan Esteban Neira Diaz, email: [jueneirad@udistrital.edu.co](mailto:jueneirad@udistrital.edu.co)

## Repositorio de Github

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

## Documentación para programadores

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