

Manual de Usuario

DFToy

Julian Cogua & Juan Esteban Neira

Índice

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

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:

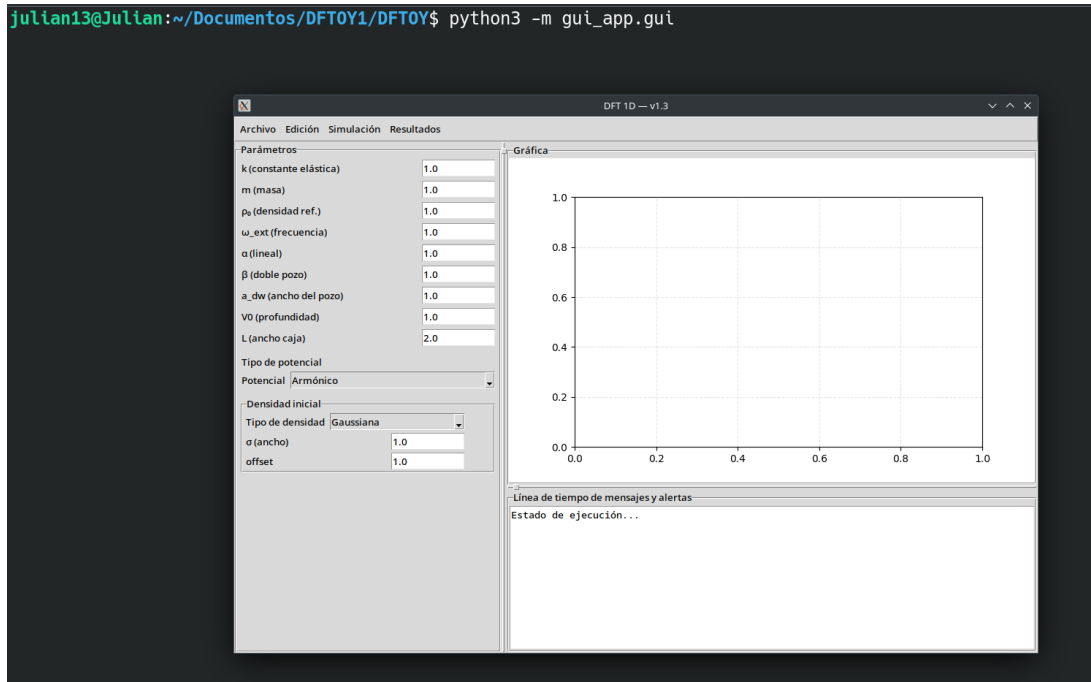
```
pip install .
```

4. Uso de la aplicación

4.1. Ejecución

- Ejecutar el archivo `main.py` o abrir la GUI.

```
julian13@Julian:~/Documentos/DFTOY1/DFTOY$ python3 main.py
```



- 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. $v(x) = 0,5m\omega_{\text{ext}}^2 x^2$ (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

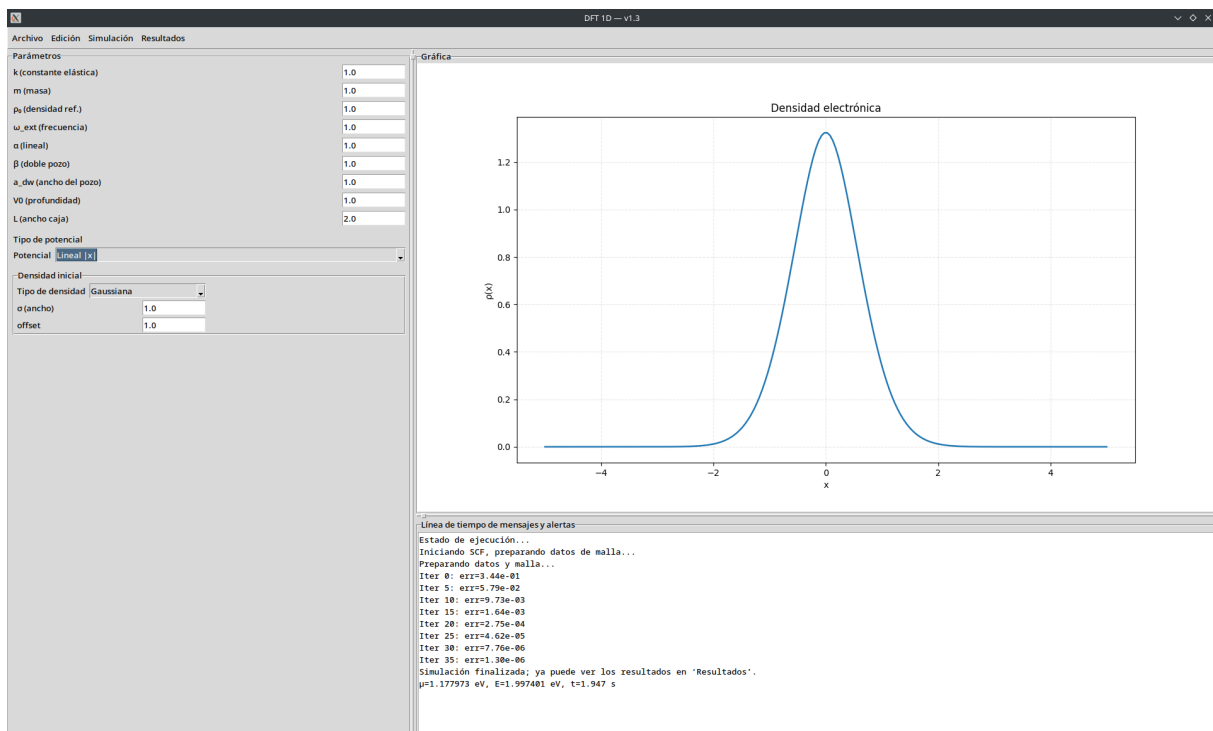
- El programa prepara la malla espacial y la densidad inicial.
- Calcula iterativamente la densidad autoconsistente usando SCF.
- Muestra en consola la energía química μ , la energía del estado fundamental E y el tiempo de cálculo.

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

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*.

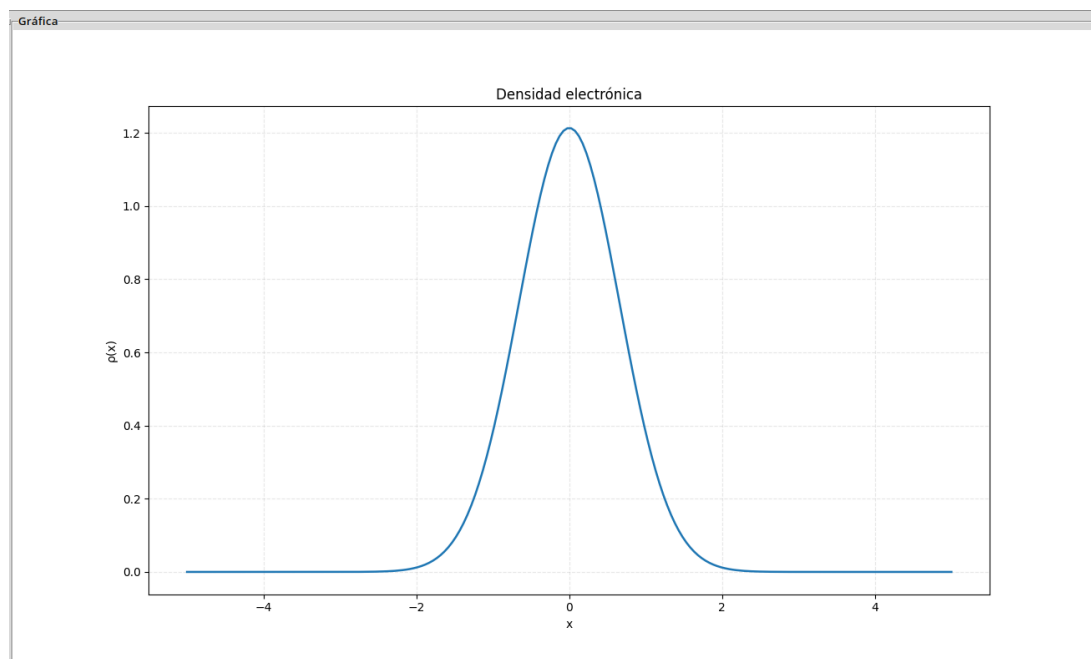
5.5. Ventana *Parámetros*

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

5.6. Ventana *Gráfica*

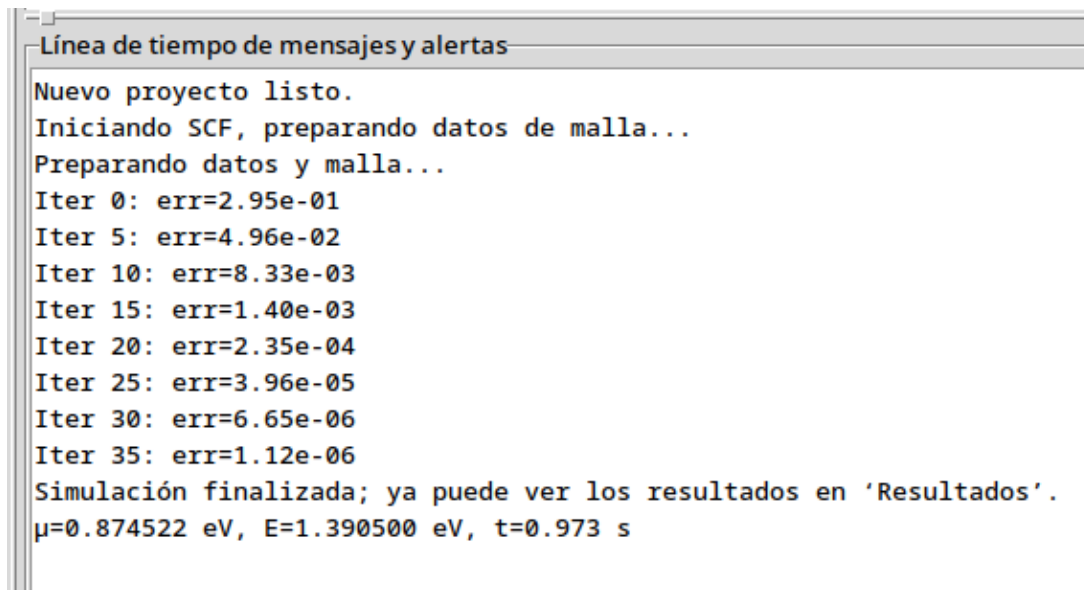
Ubicada en la parte superior derecha, en ella se pueden visualizar las diferentes gráficas que genera el programa y que se pueden cambiar en el menú *Resultados*, como ya se mencionó anteriormente.



5.7. 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
```

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: ojcoguaaa@udistrital.edu.co
- Juan Esteban Neira Diaz, email: jueneirad@udistrital.edu.co