

- date: 2025-12-11 # 작성 날짜 (YYYY-MM-DD)
- project: PROJECT_NAME # 프로젝트 이름
- topic: SHORT_TOPIC # 오늘의 세부 주제 (예: "IL forcefield validation")
- author: YOUR_NAME # 작성자
- env: # 사용 환경 (예: WS, 서버, 클러스터 등)
 - machine: # 예: "DESKTOP-3IBJ11D"
 - os: # 예: "Windows 10 / WSL2 Ubuntu 22.04"
 - main_software: # 예: "Materials Studio 2025, GROMACS 2023.3"
 - main_env: # 예: "conda env: md_pore"
- tags: [simulation, DFT, analysis] # 자유롭게

Daily Research Note – {{PROJECT_NAME}}

1. 오늘의 목표 (Daily Objectives)

- ☐ 목표 1
- ☐ 목표 2
- ☐ 목표 3

어제/이전까지의 상태에서 오늘 무엇을 끝내면 “진행됨/완료”라고 할지를 간단히 적기.

2. 배경 & 어제까지 진행 상황 (Context / Previous State)

- 어제/이전까지 한 일 요약 (핵심만 3~5줄)
- 현재까지 나온 주요 결과/이슈
- 오늘 계획에 영향을 주는 제약사항 (컴퓨팅 자원, 시간, 실험 장비 등)

3. 오늘의 상세 계획 (Plan & Checklist)

3.1 작업 리스트

- ☐ Task A – 설명
- ☐ Task B – 설명
- ☐ Task C – 설명

3.2 타임라인 (선택)

Time Block	Work Item	비고
09:00–11:00	NVT 시뮬레이션 세팅/제출	서버 큐 상태 확인
11:00–13:00	이전 결과 분석 (RDF, MSD 등)	
14:00–17:00	새 파라미터 스캔 / 정리	

4. 실험 / 시뮬레이션 실행 기록 (Runs / Experiments)

4.1 Run 요약 테이블

Run ID	목적 (Goal)	입력 데이터 / 구조	스크립트/설정 파일	주요 파라미터	상태
R001	EMIM-TFSI bulk NVT 평형 확인	EMIM_TFSI_50_50_packmol.mol2	nvt_300K_2ns.msJ	300 K, 1 fs, 2 ns	☑
R002	NPT로 밀도 수렴 확인	R001 최종 구조	npt_300K_1atm_4ns.msJ	300 K, 1 atm, 4 ns	⌚
R003	Forcefield 비교 (UFF vs COMPASS)	IL_bulk_100_100.mol2	ff_compare.py	UFF, COMPASS; same init structure	➡ SOON

4.2 개별 Run 상세 (필요한 것만 작성)

Run R001 – EMIM-TFSI NVT (300 K, 2 ns)

- 목적
 - 초기 Packmol bulk가 물리적으로 타당한 구조인지, 에너지/온도 안정화 여부 확인
- 입력 / 초기 구조
 - 구조: path/to/EMIM_TFSI_50_50_packmol.mol2
 - Forcefield: COMPASS II
 - 초기 조건: random velocities, density ~0.9 g/cm³
- 설정 / 스크립트
 - Forcite .msj / .xtd: ...
 - 메인 파라미터:
 - Ensemble: NVT (Nosé-Hoover)
 - T: 300 K
 - timestep: 1 fs
 - total steps: 2,000,000 (2 ns)
 - thermostat relaxation time: 0.1 ps
- 실행 정보
 - 시작: 2025-12-11 10:20
 - 종료: 2025-12-11 11:45
 - 수행 환경: DESKTOP-3IBJ11D / MS Forcite
- 관측 (raw)

- 초반 200 ps 동안 온도 overshoot, 이후 안정
- potential energy 1.2 ns 이후부터 plateau
- 압력은 NVT라 변동 크지만 평균 $\sim X$ bar 수준

• 해석 (Interpretation)

- 구조 붕괴/분해 없음 → 초기 packmol 안정
- RDF, MSD 추가 분석 필요

• 결과 파일 경로

- traj/mol2: `.../R001/EMIM_TFSI_NVT_2ns.mol2`
- log: `.../R001/forcite_nvt.log`
- 분석 스크립트: `.../scripts/analyze_R001.py`

5. 데이터 분석 / 결과 정리 (Analysis & Results)

5.1 주요 플롯 / 결과 요약

- (예시) RDF 결과:
 - cation-anion peak at ~ 4 Å, second peak at ~ 8 Å
 - bulk 구조가 문헌 보고와 대략 일치
- (예시) MSD 결과:
 - 1 ns 기준 diffusion coefficient $\sim X \times 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$ (T = 300 K)

필요하면 여기 아래에 그림/표 링크:

- `figs/2025-12-11_R001_rdf.png`
- `figs/2025-12-11_R002_density_vs_time.png`

5.2 해석 및 인사이트 (Interpretation)

- 기존 가설과 일치/불일치 여부
- 문헌 값과 비교 (reference 논문 간단히 언급)
- 후속 실험/시물에 대한 아이디어

6. 문제 / 이슈 로그 (Issues & Bugs)

시간	이슈 내용	원인 추정	임시 해결/Workaround	최종 해결 여부
10:35	NVT 도중 구조 일부가 터지는 현상	초기 packing density 과도, cutoff 설정 문제?	density 낮춰 재시도, timestep 줄임	⌚ 조사 중
13:10	Zeo++ 실행 시 segmentation fault	xyz→cif 변환 스크립트 오류	변환 파이프라인 수정, 에러 로그 분석	☑ 해결

7. 의사결정 & 가설 (Decisions & Hypotheses)

- 오늘 새롭게 세운 가설
 - 예: "IL bulk cohesive energy는 forcefield X가 Y보다 실험값과 더 근접할 것이다."
 - 오늘 내린 주요 의사결정
 - NPT 시간은 최소 4 ns로 늘리기로 결정
 - 앞으로는 packmol tolerance를 2.0 → 2.5 Å로 완화
-

8. 내일/다음 작업 계획 (Next Actions)

- ☐ R002 NPT 결과 density 수렴 여부 확인 후 정리
 - ☐ R003 forcefield 비교 러닝 (UFF vs COMPASS)
 - ☐ Zeo++ 기반 기공 분석 파이프라인 재시도 및 자동화 스크립트 정리
 - ☐ 오늘 노트 기반으로 주간 보고 초안에 반영
-

9. 사용한 데이터 / 코드 버전 (Reproducibility)

- **Git / 코드**
 - Repo: `git@...:MOF_IL_MD.git`
 - Branch: `feature/202512_forcefield_compare`
 - Commit: `abc1234` (메시지: "Add NVT/NPT pipeline for EMIM-TFSI")
 - **데이터 스냅샷**
 - raw traj: `/data/md/IL_bulk/2025-12-11/raw/`
 - processed: `/data/md/IL_bulk/2025-12-11/processed/`
 - 분석 노트북: `notebooks/2025-12-11_IL_bulk_analysis.ipynb`
-

10. 메모 / 아이디어 (Free Notes)

- 떠오른 아이디어, 향후 연구 주제, 협업 필요 사항 등 자유롭게 적기
- 예: "Zeo++ 결과를 descriptor로 써서 간단한 ML surrogate 만들어볼 것"