

my_diary

Taichi Nichiyama

August 21, 2018

Contents

1 LPSO

1.1 目標, 一個計算を投げる

1.1.1 8/6

予定を大幅に遅れて wifi が広島 of 祖父の家についた.

1.1.2 8/7

ドンキーさんの入力ファイル四つをコピーして, 実際に計算をかけてみる...
しかし, エラーが出た.

bashrc の alias の先が csl(ドンキーファイル) を参照していた. また
vasp_submit.rb のコード文も csl のフォルダを参照するようになっていたので
nichi に変更した. 必要なファイルを csl からコピーした. これが割と時間が
かかった. 実際に 1-layer の計算を投げてみた.

1.1.3 8/9

計算を qs で確認すると終了していた. OUTCAR を実際にみる. エラーは出
ていないよう. しかし, 何がなんなのかわからないのでマニュアルを参照にし
ながら理解して行こう. もしどうしてもわからないことがあれば, 8/15or16
にドンキーさんに時間を設けていただいたので直接あってバシバシ質問しよ
う. なので, そこに向けて質問と現状を整理しておかないといけない.

1.1.4 ここまでのまとめ

なかなか通信環境が整わなかったもので, 大幅に取り組む時間が遅れてしまっ
たが, とりあえず目標の一個計算を投げて結果を得ることはできた.

これから取り組むことは、もう一度栃木さんの論文のマーカーを引いた部分を読み直すことと、マニュアルを読んで OUTCAR の見方の理解を深めること。

それらに取り組んで感じた疑問やこれからの流れを今一度まとめて、15日にドンキーさんに投げかけてみる。そして、またそこで得た情報を元に23日？のゼミで進行状況を先生に報告する。誤っている点等はそこで指摘していただこう。