

PFP 利用向けマニュアル

令和 6 年 7 月 23 日

株式会社クロスアビリティ

本書では Winmostar V11.8.2 を用いて、PFP 対応 LAMMPS のための入力ファイルを生成する手順を示します。本書で利用する機能はプロフェッショナル版エリートまたは無料トライアルで利用可能です。

- ① Winmostar V11.8.2 をインストールします。インストール手順は <https://winmostar.com/jp/installation/> に従います。手順 7 以降の実施は不要です。
- ② Winmostar を起動します。
- ③ **ファイル | 新規プロジェクト**をクリックし、プロジェクト名を入力し **OK** をクリックします。
- ④ PFP で計算したい初期構造を作成します。原子構造の作成方法の例は LAMMPS 各種チュートリアル <https://winmostar.com/jp/tutorials/index.html#LAMMPS> 詳細はユーザマニュアル <https://winmostar.com/jp/manual.jp/html/operation/createsystem.html> で確認できます。ひとまずサンプルデータで計算したい場合は **ファイル | インポート | Samples ファイル | Si.cif** をクリックします。
- ⑤ **ツール | 環境設定 | 計算 | MD | LAMMPS** の **pair_style**, **Potential file** の入力を許可にチェックを入れ **OK** をクリックします。
- ⑥ **MD | LAMMPS | ワークフロー設定** をクリックします。
- ⑦ **パラメータファイルを使用** にチェックを入れ **OK** をクリックします。
- ⑧ **無機物系を計算** にチェックを入れ (PFP を使う場合は有機物でもこちらを選択)、**Pair style** に「pfp_api v5.0.0 CRYSTAL_PLUS_D3」、**Potential file** に「species」と入力し **OK** をクリックします。「力場が設定されました」と表示されたら **OK** をクリックします。
- ⑨ **LAMMPS Workflow Setup** ウィンドウで適宜計算条件を設定します。計算条件の設定例は LAMMPS 各種チュートリアル <https://winmostar.com/jp/tutorials/index.html#LAMMPS> 設定の詳細はユーザマニュアル https://winmostar.com/jp/manual.jp/html/winmos/md/winmos_lammps.html#md-lammps-workflow で確認できます。
- ⑩ **LAMMPS Workflow Setup** ウィンドウでの設定が終わったら **OK** をクリックします。**ファイルの保存後ジョブを実行しない** にチェックを入れ **保存** をクリックします。「ファイルを保存しました」と表示されたら **OK** をクリックします。
- ⑪ メインウィンドウ左側の **プロジェクト表示エリアの作業フォルダ** で各作業フォルダを右クリックし、**Show in Explorer** をクリックします。表示されたファイルのうち **lmp.data**, **lmp.in** が LAMMPS の計算に必要な入力ファイルです。これらを Matlantis のサーバに転送して計算を実行します。

以上