

```
アウトライン
• %\begin{document}
▼ \section{VASPの使用法}
▶ \subsection{計算ホストへのログイン}
▼ \subsection{VASPの実行}
▶ VASPでは図\ref{FLOW}のようなプロセスで計算が実行される.
▼ \subsection{E-V曲線の作成}
▼ E-V 曲線は系のエネルギーの体積依存性を示す.
このE-V曲線を利用して、 最安定の体積を求めることや正しく緩和できているかの確認などができる.
さらに、 エネルギーを体積で一次微分して圧力を得ることができる.
また、 E-V曲線から距離とエネルギーの関係を導いて、 固体の固さを求めることもできる.
以下では、 ダイヤモンド構造をもつSiをモデルとしてE-V曲線を描く操作を示した. \\
▼ \begin{description}
▶ \item[1.]
▶ \item[2.]
▶ \item[3.]
▶ \item[4.]
▶ \item[5.]
▶ \item[6.]
▶ \item[7.]
▶ \item[8.]
▶ \item[9.]
▼ \item[10.]
• OUTCARファイルから抽出した体積をx軸に、 エネルギーをy軸にしてプロットし、 E-V曲線を作成する.
• \end{description}
▼ 以上のプロセスから図\ref{E-V}のようなダイヤモンド構造のSiのE-V曲線を作成した. この図を作成するにあたり数値計算ソフトであるMapleを使用した.
• \begin{figure}[htbp]
\begin{center}
\includegraphics[scale=0.5,bb=0 0 500 500]{./Figure/Si_EVcurve2.jpg}
\caption{SiのE-V曲線}
\label{E-V}
\end{center}
\end{figure}
\newpage
▼ \appendix %付録
▶ \section{Linuxコマンド}
▼ \section{設定ファイル}\label{inputfile}
▶ \subsection{INCAR}
▶ \subsection{POSCAR}\label{poscarfile}
▶ \subsection{KPOINTS}
▼ \subsection{POTCAR}
• 各原子のポテンシャルを明記したファイルである.
図\ref{POTCAR}にSiの簡単なPOTCARファイルを示した.
実線で示した部分では原子の種類を確認できる.
また、 破線で示した部分はファイルの終端である.
もし、 2元系以上の計算を行う場合は、 この終端直後に別の原子のポテンシャルを記述する.
注意点として、 ポテンシャルを記述する順番は、 POSCARファイルに対応させなければならない.

POTCARファイルではCut-off energyも指定できるが、 リスト構造をとるINCARファイルの方が可視性に優れているため入力が容易である.
▼ \begin{description}
▼ \item[Cut-off energy]
• Cut-off energyは、 平面波でどこまで厳密に波動関数を表現するかを制御するパラメータである.
波動関数を複数の平面波の足し合わせで考えるとき、 より複雑な形の波動関数を表現するためにはより短い波長（つまり大きいCut-off energy）の平面波を使うのが望ましい.
なお、 計算系によって最適なCut-off energyの値は異なるため、 まず系毎に精度計算を行い、 十分にエネルギーが収束する値を用いることが理想的である.
• \end{description}
▼ \begin{figure}[htbp]
• \begin{center}
\includegraphics[width=18.0cm]{./Figure/POTCAR.jpg}
\caption{SiのPOTCAR file. }
\label{POTCAR}
\end{center}
\end{figure}
• %\end{document}
```