

```

\documentclass[12pt,a4j]{jarticle}
\usepackage{amsmath,amsthm,amssymb}
\usepackage{graphicx}
\topmargin -15mm
\oddsidemargin -4mm
\evensidemargin
\oddsidemargin
\textwidth 170mm
\textheight 257mm
\columnsep 7mm

\begin{document}

\if0
\title{『はじめてのVASP~原理から使用法、適用例まで~』}
\author{関西学院大学・理工学部 西谷滋人}
\maketitle

```

第一原理計算は計算結果の信頼性と、ユーザインターフェースが
 近年格段に向上したことから、
 一般の研究者、技術者がちょっとしたアイデアを試すことができる
 手軽な計算ツールとなりつつある。
 どれだけお手軽で、どれだけ有用かをこの講演でお伝えすることを目的としている。
 また、実際の材料開発においてモデルをどのように作るか、
 起こりがちなトラブル・間違いへの対策をいくつかの具体的な事例で紹介する。

\fi
 %第一原理計算法(9/30)

%¥include{CalcPrinciple} %計算原理とその特徴（西谷）
 \include{CalcPrinciple2} %電子構造とエネルギーポテンシャル（西谷）
 %%化学結合,sum,積分,電子エネルギー（格子エネルギー），phonon-electron相互作用
 %%構造緩和（真嶋）
 %%E-V曲線，堅い柔らかい，外部・内部緩和，軸（自由度），断熱ポテンシャル平面
 %%材料開発におけるエネルギーの重要性（西谷）
 %%状態図，組織，振動・（原子）配置エントロピー，各個撃破，自由エネルギー，温度，

%具体的な適用例(10/7)

%化合物半導体の安定性と積層欠陥エネルギー（西谷->正木）

\include{SiO}%Si中の酸素の侵入位置（塚原，谷口）

%Si積層欠陥へのP,Bの侵入効果（西谷）

%ZrCr₂? Laves相のphonon計算による高温安定性（山本）

%SiCの表面エネルギー（紫垣）

%Fe中のCu析出物の活性化エネルギー（西谷）

%VASPの使用法(10/14)

%ネットワーク設営(坂本ほか)

%計算の検証としてのE-V曲線（大坪）

%linuxの基本（八幡）

%設定ファイル（坂本）

%GUIでVASPを実行，MedeAの利用（正木）

%特殊な例,他(10/21)

%磁性材料でのspin計算（大坪）

%電子状態密度の表示（谷口）