

## 工作总结：

（1）暑假期间进行了对pymatgen（python第三方包）的了解，并且跑通了许多有关pymatgen的例子。

（2）对vasp的安装和运用，同时进行了对vasp的输入和输出的了解，输入包括Incars、K-points、Poscar和Potcar。并且对这四个文件里面的参数进行了了解和总结。同时研究自行对这四个文件的生成，和自定义化的生成。

（3）对项目的基础功能的实现，包括基本数据的分析显示，对网站的搭建，网站搭建初期使用的是java的web框架springboot，由于后期我们会对化学式的分析pymatgen的包使用，我们会涉及到python的代码，考虑到整个网站的完整和后期的测试还有运行方面，决定转换开发语言，把整个网站转移到python上来，并且决定用python的web框架django。然后为了网站的迁移，开始学习django框架的使用，由于我用的数据库是mongodb，这个数据库并不在django框架支持中，所以，我就开始找django连接mongodb的连接工具。看了华东师大的项目，决定用pymongo进行连接，但是pymongo限制了django的好多的关于数据操作的方便快捷的方法，不能够使用django的ORM和admin。直到找到了连接mongodb的最新的连接工具——djongo，才开始网站的正式迁移，并且实现了一些基本的功能。

（4）目前的工作就是对网站的部署，把网站部署到服务器中，正在进行中。。。。。