读数据流程

1. 读取新生成的5个计算文件夹中的CASTEP文件
2. 读取出来相应的数据

以GDY-Fe为例：只有一个Fe原子，所以只需要读spin 1和spin2两个数值

如果有更多的原子+U进行了微扰，则需要全部都读出来

**数据一**：SCF出来之前的spin矩阵中，读spin 1和spin2两个数值（为微扰前的数值）(只读Total：后面的数值)

显示如下：

1 1 Total: xxxxxxx

1 2 Total: xxxxxxx

**数据二**：SCF之后的第一个spin矩阵中，读spin 1和spin2两个数值（为微扰后的数值）(只读Total：后面的数值)

显示如下：

1 1 Total xxxxxxx

1 2 Total xxxxxxx

**数据三**：找Total energy has converged after 77 SCF iterations 之前的最后一组spin 矩阵，读spin 1和spin2两个数值（为微扰后的最终数值）(只读Total：后面的数值)

显示如下：

1 1 Total xxxxxxx

1 2 Total xxxxxxx

1. 将三组数据读出来后，罗列在Excel中

需要标注清楚三组数据

Data 1 Spin 1 Spin 2

Data 2 Spin 1 Spin 2

Data 3 Spin 1 Spin 2