软件设计目标是计算错配度。计算方法有两种。

一是通过选择物质和温度得到相应的晶格常数和晶体类型，进而计算错配度。

二是用户直接输入晶格常数和晶体类型计算。

程序设计中我用了Combox控件来供用户下拉选择物质和温度，然后用程序自动从数据库得到相应的数据，显示在界面上。点击计算即可得出结果。

在界面上直接输入晶格常数和温度后可以直接计算。

软件设计过程中其实遇到了不少的问题，在设计中逐渐解决了。我印象最深的是下面亮点。

1. 关于如何导入数据的问题

数据给我的时候是excel表的形式。横坐标是物质和晶体类型，纵坐标是温度，表中是对应的晶格常数。这种表看起来清晰明了，但给导入带来了麻烦。

因此我首先将excel表重新整理了。每一行有四列，分别为物质，晶体类型，温度和晶格常数。然后把表以csv的格式保存。

之后用将这些数据导入了Sqlite数据中，将调用他们的方法封装在c语言中，之后在c#程序中调用。

1. 设计计算的函数

计算公式带入的参数是两个物质的晶格，而决定带入哪个公式的是两个物质的晶体类型。为了既能选择常见的物质求错配度，又能直接输入晶格常数和物质类型求错配度。我把计算错配度函数的参数定为两个物质的晶格常数和晶体类型。

另外设计了一个函数find()和type()专门根据用户的选择求出物质的晶格常数和晶体类型。