

Output

Axes			Direction		
	α (MK ⁻¹)	$\sigma\alpha$ (MK ⁻¹)	a	b	c
X ₁	4.5968	0.2044	-0.9559	0.0000	0.2936
X ₂	55.1996	0.2278	0.0000	1.0000	-0.0000
X ₃	207.9962	0.3041	0.8505	-0.0000	0.5260
V	273.1254	0.2329			

% change in length

T	X ₁	X ₂	X ₃	X _{1,calc}	X _{2,calc}	X _{3,calc}
100.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0027	0.0000	-0.0000
300.0000	0.1102	1.1194	4.1311	0.0946	1.1040	4.1599
310.0000	0.1145	1.1571	4.3871	0.0992	1.1592	4.3679
320.0000	0.0903	1.1994	4.5864	0.1038	1.2144	4.5759
330.0000	0.0921	1.2595	4.8003	0.1084	1.2696	4.7839
340.0000	0.1126	1.3218	4.9942	0.1130	1.3248	4.9919
350.0000	0.1194	1.3948	5.1802	0.1176	1.3800	5.1999

Volume

T	V (Å ³)	V _{lin} (Å ³)
100.0000	1295.7784	1295.7616
300.0000	1366.4223	1366.5436
310.0000	1370.4089	1370.0827
320.0000	1373.3302	1373.6218
330.0000	1377.0386	1377.1609
340.0000	1380.7700	1380.7000
350.0000	1384.3615	1384.2391

Input

T	σ T	a	b	c	α	β	γ
350	2	8.5517	8.6142	18.8957	90	95.9940	90
340	2	8.5459	8.6080	18.8764	90	96.0900	90
330	2	8.5393	8.6027	18.8548	90	96.1820	90
320	2	8.5342	8.5976	18.8303	90	96.2900	90
310	2	8.5304	8.5940	18.8108	90	96.4080	90
300	2	8.5272	8.5908	18.7743	90	96.5210	90
100	2	8.4262	8.4957	18.3079	90	98.6244	90