SG No. 127 D_{4h}^{5} $P4/mbm$ [tetragonal]

* plus set: $+[0,\ 0,\ 0]$
* Wyckoff site: `2a`, site symmetry: `4/m..`

Table 1: Wyckoff bond: `2a@2a`

No.	vector	center	mapping
1	$[0,\ 0,\ Z]$	$[0,\ 0,\ 0]$	`[1,2,3,4,-9,-10,-11,-12]`
2	$[0,\ 0,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0\right]$	`[5,6,7,8,-13,-14,-15,-16]`

Table 2: Wyckoff bond: `4b@2a`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\ Y,\ 0]$	$[0,\ 0,\ 0]$	`[1,-2,-9,10]`
2	$[-Y,\ X,\ 0]$	$[0,\ 0,\ 0]$	`[3,-4,-11,12]`
3	$[-X,\ Y,\ 0]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0\right]$	`[5,-6,-13,14]`
4	$[Y,\ X,\ 0]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0\right]$	`[7,-8,-15,16]`

Table 3: Wyckoff bond: `8c@2a`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\ Y,\ Z]$	$[0,\ 0,\ 0]$	`[1,-9]`
2	$[-X,\ -Y,\ Z]$	$[0,\ 0,\ 0]$	`[2,-10]`
3	$[-Y,\ X,\ Z]$	$[0,\ 0,\ 0]$	`[3,-11]`
4	$[Y,\ -X,\ Z]$	$[0,\ 0,\ 0]$	`[4,-12]`
5	$[-X,\ Y,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0\right]$	`[5,-13]`
6	$[X,\ -Y,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0\right]$	`[6,-14]`
7	$[Y,\ X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0\right]$	`[7,-15]`
8	$[-Y,\ -X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0\right]$	`[8,-16]`

* Wyckoff site: `2b`, site symmetry: `4/m..`

Table 4: Wyckoff bond: `2a@2b`

No.	vector	center	mapping
1	$[0,\ 0,\ Z]$	$\left[0,\ 0,\ \frac{1}{2}\right]$	`[1,2,3,4,-9,-10,-11,-12]`
2	$[0,\ 0,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right]$	`[5,6,7,8,-13,-14,-15,-16]`

Table 5: Wyckoff bond: `4b@2b`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, 0]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-2,-9,10]`
2	$[-Y, X, 0]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-4,-11,12]`
3	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[5,-6,-13,14]`
4	$[Y, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[7,-8,-15,16]`

Table 6: Wyckoff bond: `8c@2b`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-9]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[2,-10]`
3	$[-Y, X, Z]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-11]`
4	$[Y, -X, Z]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[4,-12]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[5,-13]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[6,-14]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[7,-15]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[8,-16]`

* Wyckoff site: `2c`, site symmetry: `m.mm`

Table 7: Wyckoff bond: `2a@2c`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-2,7,-8,-9,10,-15,16]`
2	$[-X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-4,5,-6,-11,12,-13,14]`

Table 8: Wyckoff bond: `2b@2c`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, -X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-2,-7,8,-9,10,15,-16]`
2	$[X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-4,-5,6,-11,12,13,-14]`

Table 9: Wyckoff bond: `2c@2c`

No.	vector	center	mapping
1	$[0, 0, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1,2,-7,-8,-9,-10,15,16]`
2	$[0, 0, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,4,-5,-6,-11,-12,13,14]`

Table 10: Wyckoff bond: `4d@2c`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-8,-9,16]`
2	$[-X, -X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[2,-7,-10,15]`
3	$[-X, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-6,-11,14]`
4	$[X, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[4,-5,-12,13]`

Table 11: Wyckoff bond: `4e@2c`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, -X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-7,-9,15]`
2	$[-X, X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[2,-8,-10,16]`
3	$[X, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-5,-11,13]`
4	$[-X, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[4,-6,-12,14]`

Table 12: Wyckoff bond: `4f@2c`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-2,-9,10]`
2	$[-Y, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-4,-11,12]`
3	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[5,-6,-13,14]`
4	$[Y, X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[7,-8,-15,16]`

Table 13: Wyckoff bond: `8g@2c`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-9]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[2,-10]`
3	$[-Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-11]`
4	$[Y, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[4,-12]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[5,-13]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[6,-14]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[7,-15]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[8,-16]`

* Wyckoff site: `2d`, site symmetry: `m.mm`

Table 14: Wyckoff bond: `2a@2d`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[1,-2,7,-8,-9,10,-15,16]`
2	$[-X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[3,-4,5,-6,-11,12,-13,14]`

Table 15: Wyckoff bond: `2b@2d`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, -X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[1,-2,-7,8,-9,10,15,-16]`
2	$[X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[3,-4,-5,6,-11,12,13,-14]`

Table 16: Wyckoff bond: `2c@2d`

No.	vector	center	mapping
1	$[0, 0, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[1,2,-7,-8,-9,-10,15,16]`
2	$[0, 0, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[3,4,-5,-6,-11,-12,13,14]`

Table 17: Wyckoff bond: `4d@2d`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[1,-8,-9,16]`
2	$[-X, -X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[2,-7,-10,15]`
3	$[-X, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[3,-6,-11,14]`
4	$[X, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[4,-5,-12,13]`

Table 18: Wyckoff bond: `4e@2d`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, -X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[1,-7,-9,15]`
2	$[-X, X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[2,-8,-10,16]`
3	$[X, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[3,-5,-11,13]`
4	$[-X, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[4,-6,-12,14]`

Table 19: Wyckoff bond: `4f@2d`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[1,-2,-9,10]`
2	$[-Y, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[3,-4,-11,12]`
3	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[5,-6,-13,14]`
4	$[Y, X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[7,-8,-15,16]`

Table 20: Wyckoff bond: `8g@2d`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[1,-9]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[2,-10]`
3	$[-Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[3,-11]`
4	$[Y, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[4,-12]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[5,-13]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[6,-14]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[7,-15]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[8,-16]`

* Wyckoff site: `4e`, site symmetry: `4..`

Table 21: Wyckoff bond: `4a@4e`

No.	vector	center	mapping
1	$[0, 0, Z]$	$[0, 0, z]$	`[1,2,3,4]`
2	$[0, 0, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[5,6,7,8]`
3	$[0, 0, -Z]$	$[0, 0, -z]$	`[9,10,11,12]`
4	$[0, 0, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\right]$	`[13,14,15,16]`

Table 22: Wyckoff bond: `8b@4e`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, 0]$	$[0, 0, z]$	`[1,-2]`
2	$[-Y, X, 0]$	$[0, 0, z]$	`[3,-4]`
3	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[5,-6]`
4	$[Y, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[7,-8]`
5	$[-X, -Y, 0]$	$[0, 0, -z]$	`[9,-10]`
6	$[Y, -X, 0]$	$[0, 0, -z]$	`[11,-12]`
7	$[X, -Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\right]$	`[13,-14]`
8	$[-Y, -X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\right]$	`[15,-16]`

Table 23: Wyckoff bond: `16c@4e`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$[0, 0, z]$	`[1]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$[0, 0, z]$	`[2]`
3	$[-Y, X, Z]$	$[0, 0, z]$	`[3]`
4	$[Y, -X, Z]$	$[0, 0, z]$	`[4]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[5]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[6]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[7]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[8]`
9	$[-X, -Y, -Z]$	$[0, 0, -z]$	`[9]`
10	$[X, Y, -Z]$	$[0, 0, -z]$	`[10]`
11	$[Y, -X, -Z]$	$[0, 0, -z]$	`[11]`
12	$[-Y, X, -Z]$	$[0, 0, -z]$	`[12]`
13	$[X, -Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\right]$	`[13]`
14	$[-X, Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\right]$	`[14]`
15	$[-Y, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\right]$	`[15]`
16	$[Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\right]$	`[16]`

* Wyckoff site: `4f`, site symmetry: `2.mm`

Table 24: Wyckoff bond: `4a@4f`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z\right]$	`[1,-2,-15,16]`
2	$[-X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, z\right]$	`[3,-4,-13,14]`
3	$[-X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, -z\right]$	`[5,-6,-11,12]`
4	$[X, X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[7,-8,-9,10]`

Table 25: Wyckoff bond: `4b@4f`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, -X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z\right]$	`[1,-2,15,-16]`
2	$[X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, z\right]$	`[3,-4,13,-14]`
3	$[-X, -X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, -z\right]$	`[5,-6,11,-12]`
4	$[-X, X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[7,-8,9,-10]`

Table 26: Wyckoff bond: `4c@4f`

No.	vector	center	mapping
1	$[0, 0, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z\right]$	`[1,2,15,16]`

continued ...

Table 26

No.	vector	center	mapping
2	$[0,\ 0,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z\right]$	`[3,4,13,14]`
3	$[0,\ 0,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ -z\right]$	`[5,6,11,12]`
4	$[0,\ 0,\ -Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ -z\right]$	`[7,8,9,10]`

Table 27: Wyckoff bond: `8d@4f`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\ X,\ Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ z\right]$	`[1,16]`
2	$[-X,\ -X,\ Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ z\right]$	`[2,15]`
3	$[-X,\ X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z\right]$	`[3,14]`
4	$[X,\ -X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z\right]$	`[4,13]`
5	$[-X,\ X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ -z\right]$	`[5,12]`
6	$[X,\ -X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ -z\right]$	`[6,11]`
7	$[X,\ X,\ -Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ -z\right]$	`[7,10]`
8	$[-X,\ -X,\ -Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ -z\right]$	`[8,9]`

Table 28: Wyckoff bond: `8e@4f`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\ -X,\ Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ z\right]$	`[1,15]`
2	$[-X,\ X,\ Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ z\right]$	`[2,16]`
3	$[X,\ X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z\right]$	`[3,13]`
4	$[-X,\ -X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z\right]$	`[4,14]`
5	$[-X,\ -X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ -z\right]$	`[5,11]`
6	$[X,\ X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ -z\right]$	`[6,12]`
7	$[-X,\ X,\ -Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ -z\right]$	`[7,9]`
8	$[X,\ -X,\ -Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ -z\right]$	`[8,10]`

Table 29: Wyckoff bond: `8f@4f`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\ Y,\ 0]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ z\right]$	`[1,-2]`
2	$[-Y,\ X,\ 0]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z\right]$	`[3,-4]`
3	$[-X,\ Y,\ 0]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ -z\right]$	`[5,-6]`
4	$[Y,\ X,\ 0]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ -z\right]$	`[7,-8]`
5	$[-X,\ -Y,\ 0]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ -z\right]$	`[9,-10]`
6	$[Y,\ -X,\ 0]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ -z\right]$	`[11,-12]`
7	$[X,\ -Y,\ 0]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z\right]$	`[13,-14]`
8	$[-Y,\ -X,\ 0]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ z\right]$	`[15,-16]`

Table 30: Wyckoff bond: `16g@4f`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z\right]$	`[1]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z\right]$	`[2]`
3	$[-Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, z\right]$	`[3]`
4	$[Y, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, z\right]$	`[4]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, -z\right]$	`[5]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, -z\right]$	`[6]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[7]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[8]`
9	$[-X, -Y, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[9]`
10	$[X, Y, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, -z\right]$	`[10]`
11	$[Y, -X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, -z\right]$	`[11]`
12	$[-Y, X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, -z\right]$	`[12]`
13	$[X, -Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, z\right]$	`[13]`
14	$[-X, Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, z\right]$	`[14]`
15	$[-Y, -X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z\right]$	`[15]`
16	$[Y, X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z\right]$	`[16]`

* Wyckoff site: `4g`, site symmetry: `m.2m`

Table 31: Wyckoff bond: `4a@4g`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, X, 0]$	$\left[x, x + \frac{1}{2}, 0\right]$	`[1,7,10,16]`
2	$[-X, -X, 0]$	$\left[-x, \frac{1}{2} - x, 0\right]$	`[2,8,9,15]`
3	$[-X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2} - x, x, 0\right]$	`[3,5,12,14]`
4	$[X, -X, 0]$	$\left[x + \frac{1}{2}, -x, 0\right]$	`[4,6,11,13]`

Table 32: Wyckoff bond: `4b@4g`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, -X, 0]$	$\left[x, x + \frac{1}{2}, 0\right]$	`[1,-7,10,-16]`
2	$[-X, X, 0]$	$\left[-x, \frac{1}{2} - x, 0\right]$	`[2,-8,9,-15]`
3	$[X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2} - x, x, 0\right]$	`[3,-5,12,-14]`
4	$[-X, -X, 0]$	$\left[x + \frac{1}{2}, -x, 0\right]$	`[4,-6,11,-13]`

Table 33: Wyckoff bond: `4c@4g`

No.	vector	center	mapping
1	$[0, 0, Z]$	$\left[x, x + \frac{1}{2}, 0\right]$	`[1,-7,-10,16]`

continued ...

Table 33

No.	vector	center	mapping
2	$[0,\, 0,\, Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, 0\right]$	`[2,-8,-9,15]`
3	$[0,\, 0,\, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, 0\right]$	`[3,-5,-12,14]`
4	$[0,\, 0,\, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, 0\right]$	`[4,-6,-11,13]`

Table 34: Wyckoff bond: `8d@4g`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\, X,\, Z]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, 0\right]$	`[1,16]`
2	$[-X,\, -X,\, Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, 0\right]$	`[2,15]`
3	$[-X,\, X,\, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, 0\right]$	`[3,14]`
4	$[X,\, -X,\, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, 0\right]$	`[4,13]`
5	$[-X,\, X,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, 0\right]$	`[5,12]`
6	$[X,\, -X,\, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, 0\right]$	`[6,11]`
7	$[X,\, X,\, -Z]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, 0\right]$	`[7,10]`
8	$[-X,\, -X,\, -Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, 0\right]$	`[8,9]`

Table 35: Wyckoff bond: `8e@4g`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\, -X,\, Z]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, 0\right]$	`[1,-7]`
2	$[-X,\, X,\, Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, 0\right]$	`[2,-8]`
3	$[X,\, X,\, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, 0\right]$	`[3,-5]`
4	$[-X,\, -X,\, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, 0\right]$	`[4,-6]`
5	$[-X,\, X,\, -Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, 0\right]$	`[9,-15]`
6	$[X,\, -X,\, -Z]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, 0\right]$	`[10,-16]`
7	$[-X,\, -X,\, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, 0\right]$	`[11,-13]`
8	$[X,\, X,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, 0\right]$	`[12,-14]`

Table 36: Wyckoff bond: `8f@4g`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\, Y,\, 0]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, 0\right]$	`[1,10]`
2	$[-X,\, -Y,\, 0]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, 0\right]$	`[2,9]`
3	$[-Y,\, X,\, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, 0\right]$	`[3,12]`
4	$[Y,\, -X,\, 0]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, 0\right]$	`[4,11]`
5	$[-X,\, Y,\, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, 0\right]$	`[5,14]`
6	$[X,\, -Y,\, 0]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, 0\right]$	`[6,13]`
7	$[Y,\, X,\, 0]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, 0\right]$	`[7,16]`
8	$[-Y,\, -X,\, 0]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, 0\right]$	`[8,15]`

Table 37: Wyckoff bond: `16g@4g`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, 0\right]$	`[1]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, 0\right]$	`[2]`
3	$[-Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, 0\right]$	`[3]`
4	$[Y, -X, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, 0\right]$	`[4]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, 0\right]$	`[5]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, 0\right]$	`[6]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, 0\right]$	`[7]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, 0\right]$	`[8]`
9	$[-X, -Y, -Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, 0\right]$	`[9]`
10	$[X, Y, -Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, 0\right]$	`[10]`
11	$[Y, -X, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, 0\right]$	`[11]`
12	$[-Y, X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, 0\right]$	`[12]`
13	$[X, -Y, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, 0\right]$	`[13]`
14	$[-X, Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, 0\right]$	`[14]`
15	$[-Y, -X, Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, 0\right]$	`[15]`
16	$[Y, X, Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, 0\right]$	`[16]`

* Wyckoff site: `4h`, site symmetry: `m.2m`

Table 38: Wyckoff bond: `4a@4h`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, X, 0]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1,7,10,16]`
2	$[-X, -X, 0]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}\right]$	`[2,8,9,15]`
3	$[-X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, \frac{1}{2}\right]$	`[3,5,12,14]`
4	$[X, -X, 0]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, \frac{1}{2}\right]$	`[4,6,11,13]`

Table 39: Wyckoff bond: `4b@4h`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, -X, 0]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-7,10,-16]`
2	$[-X, X, 0]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}\right]$	`[2,-8,9,-15]`
3	$[X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-5,12,-14]`
4	$[-X, -X, 0]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, \frac{1}{2}\right]$	`[4,-6,11,-13]`

Table 40: Wyckoff bond: `4c@4h`

No.	vector	center	mapping
1	$[0, 0, Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-7,-10,16]`

continued ...

Table 40

No.	vector	center	mapping
2	$[0,\, 0,\, Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[2,-8,-9,15]`
3	$[0,\, 0,\, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-5,-12,14]`
4	$[0,\, 0,\, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[4,-6,-11,13]`

Table 41: Wyckoff bond: `8d@4h`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\, X,\, Z]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[1,16]`
2	$[-X,\, -X,\, Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[2,15]`
3	$[-X,\, X,\, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[3,14]`
4	$[X,\, -X,\, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[4,13]`
5	$[-X,\, X,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[5,12]`
6	$[X,\, -X,\, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[6,11]`
7	$[X,\, X,\, -Z]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[7,10]`
8	$[-X,\, -X,\, -Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[8,9]`

Table 42: Wyckoff bond: `8e@4h`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\, -X,\, Z]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-7]`
2	$[-X,\, X,\, Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[2,-8]`
3	$[X,\, X,\, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-5]`
4	$[-X,\, -X,\, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[4,-6]`
5	$[-X,\, X,\, -Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[9,-15]`
6	$[X,\, -X,\, -Z]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[10,-16]`
7	$[-X,\, -X,\, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[11,-13]`
8	$[X,\, X,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[12,-14]`

Table 43: Wyckoff bond: `8f@4h`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\, Y,\, 0]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[1,10]`
2	$[-X,\, -Y,\, 0]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[2,9]`
3	$[-Y,\, X,\, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[3,12]`
4	$[Y,\, -X,\, 0]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[4,11]`
5	$[-X,\, Y,\, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[5,14]`
6	$[X,\, -Y,\, 0]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[6,13]`
7	$[Y,\, X,\, 0]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[7,16]`
8	$[-Y,\, -X,\, 0]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[8,15]`

Table 44: Wyckoff bond: `16g@4h`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[1]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}\right]$	`[2]`
3	$[-Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, \frac{1}{2}\right]$	`[3]`
4	$[Y, -X, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, \frac{1}{2}\right]$	`[4]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, \frac{1}{2}\right]$	`[5]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, \frac{1}{2}\right]$	`[6]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[7]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}\right]$	`[8]`
9	$[-X, -Y, -Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}\right]$	`[9]`
10	$[X, Y, -Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[10]`
11	$[Y, -X, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, \frac{1}{2}\right]$	`[11]`
12	$[-Y, X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, \frac{1}{2}\right]$	`[12]`
13	$[X, -Y, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, \frac{1}{2}\right]$	`[13]`
14	$[-X, Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, \frac{1}{2}\right]$	`[14]`
15	$[-Y, -X, Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, \frac{1}{2}\right]$	`[15]`
16	$[Y, X, Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[16]`

* Wyckoff site: `8i`, site symmetry: `m..`

Table 45: Wyckoff bond: `8a@8i`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, 0]$	$[x, y, 0]$	`[1,10]`
2	$[-X, -Y, 0]$	$[-x, -y, 0]$	`[2,9]`
3	$[-Y, X, 0]$	$[-y, x, 0]$	`[3,12]`
4	$[Y, -X, 0]$	$[y, -x, 0]$	`[4,11]`
5	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x, y+\frac{1}{2}, 0\right]$	`[5,14]`
6	$[X, -Y, 0]$	$\left[x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}-y, 0\right]$	`[6,13]`
7	$[Y, X, 0]$	$\left[y+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, 0\right]$	`[7,16]`
8	$[-Y, -X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}-x, 0\right]$	`[8,15]`

Table 46: Wyckoff bond: `8b@8i`

No.	vector	center	mapping
1	$[0, 0, Z]$	$[x, y, 0]$	`[1,-10]`
2	$[0, 0, Z]$	$[-x, -y, 0]$	`[2,-9]`
3	$[0, 0, Z]$	$[-y, x, 0]$	`[3,-12]`
4	$[0, 0, Z]$	$[y, -x, 0]$	`[4,-11]`
5	$[0, 0, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, y+\frac{1}{2}, 0\right]$	`[5,-14]`
6	$[0, 0, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}-y, 0\right]$	`[6,-13]`
7	$[0, 0, -Z]$	$\left[y+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, 0\right]$	`[7,-16]`
8	$[0, 0, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}-x, 0\right]$	`[8,-15]`

Table 47: Wyckoff bond: `16c@8i`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$[x, y, 0]$	`[1]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$[-x, -y, 0]$	`[2]`
3	$[-Y, X, Z]$	$[-y, x, 0]$	`[3]`
4	$[Y, -X, Z]$	$[y, -x, 0]$	`[4]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2} - x, y + \frac{1}{2}, 0\right]$	`[5]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - y, 0\right]$	`[6]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, 0\right]$	`[7]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - x, 0\right]$	`[8]`
9	$[-X, -Y, -Z]$	$[-x, -y, 0]$	`[9]`
10	$[X, Y, -Z]$	$[x, y, 0]$	`[10]`
11	$[Y, -X, -Z]$	$[y, -x, 0]$	`[11]`
12	$[-Y, X, -Z]$	$[-y, x, 0]$	`[12]`
13	$[X, -Y, Z]$	$\left[x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - y, 0\right]$	`[13]`
14	$[-X, Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2} - x, y + \frac{1}{2}, 0\right]$	`[14]`
15	$[-Y, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - x, 0\right]$	`[15]`
16	$[Y, X, Z]$	$\left[y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, 0\right]$	`[16]`

* Wyckoff site: `8j`, site symmetry: `m..`

Table 48: Wyckoff bond: `8a@8j`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, 0]$	$\left[x, y, \frac{1}{2}\right]$	`[1,10]`
2	$[-X, -Y, 0]$	$\left[-x, -y, \frac{1}{2}\right]$	`[2,9]`
3	$[-Y, X, 0]$	$\left[-y, x, \frac{1}{2}\right]$	`[3,12]`
4	$[Y, -X, 0]$	$\left[y, -x, \frac{1}{2}\right]$	`[4,11]`
5	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2} - x, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[5,14]`
6	$[X, -Y, 0]$	$\left[x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2}\right]$	`[6,13]`
7	$[Y, X, 0]$	$\left[y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[7,16]`
8	$[-Y, -X, 0]$	$\left[\frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2}\right]$	`[8,15]`

Table 49: Wyckoff bond: `8b@8j`

No.	vector	center	mapping
1	$[0, 0, Z]$	$\left[x, y, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-10]`
2	$[0, 0, Z]$	$\left[-x, -y, \frac{1}{2}\right]$	`[2,-9]`
3	$[0, 0, Z]$	$\left[-y, x, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-12]`
4	$[0, 0, Z]$	$\left[y, -x, \frac{1}{2}\right]$	`[4,-11]`
5	$[0, 0, -Z]$	$\left[\frac{1}{2} - x, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[5,-14]`
6	$[0, 0, -Z]$	$\left[x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - y, \frac{1}{2}\right]$	`[6,-13]`

continued ...

Table 49

No.	vector	center	mapping
7	$[0,\, 0,\, -Z]$	$\left[y+\frac{1}{2},\, x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[7,-16]`
8	$[0,\, 0,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-y,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[8,-15]`

Table 50: Wyckoff bond: `16c@8j`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\, Y,\, Z]$	$\left[x,\, y,\, \frac{1}{2}\right]$	`[1]`
2	$[-X,\, -Y,\, Z]$	$\left[-x,\, -y,\, \frac{1}{2}\right]$	`[2]`
3	$[-Y,\, X,\, Z]$	$\left[-y,\, x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[3]`
4	$[Y,\, -X,\, Z]$	$\left[y,\, -x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[4]`
5	$[-X,\, Y,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, y+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[5]`
6	$[X,\, -Y,\, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}-y,\, \frac{1}{2}\right]$	`[6]`
7	$[Y,\, X,\, -Z]$	$\left[y+\frac{1}{2},\, x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[7]`
8	$[-Y,\, -X,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-y,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[8]`
9	$[-X,\, -Y,\, -Z]$	$\left[-x,\, -y,\, \frac{1}{2}\right]$	`[9]`
10	$[X,\, Y,\, -Z]$	$\left[x,\, y,\, \frac{1}{2}\right]$	`[10]`
11	$[Y,\, -X,\, -Z]$	$\left[y,\, -x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[11]`
12	$[-Y,\, X,\, -Z]$	$\left[-y,\, x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[12]`
13	$[X,\, -Y,\, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}-y,\, \frac{1}{2}\right]$	`[13]`
14	$[-X,\, Y,\, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, y+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[14]`
15	$[-Y,\, -X,\, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-y,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}\right]$	`[15]`
16	$[Y,\, X,\, Z]$	$\left[y+\frac{1}{2},\, x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[16]`

* Wyckoff site: `8k`, site symmetry: `..m`

Table 51: Wyckoff bond: `8a@8k`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\, X,\, Z]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, z\right]$	`[1,16]`
2	$[-X,\, -X,\, Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, z\right]$	`[2,15]`
3	$[-X,\, X,\, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, z\right]$	`[3,14]`
4	$[X,\, -X,\, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, z\right]$	`[4,13]`
5	$[-X,\, X,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, x,\, -z\right]$	`[5,12]`
6	$[X,\, -X,\, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, -x,\, -z\right]$	`[6,11]`
7	$[X,\, X,\, -Z]$	$\left[x,\, x+\frac{1}{2},\, -z\right]$	`[7,10]`
8	$[-X,\, -X,\, -Z]$	$\left[-x,\, \frac{1}{2}-x,\, -z\right]$	`[8,9]`

Table 52: Wyckoff bond: `8b@8k`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, -X, 0]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, z\right]$	`[1,-16]`
2	$[-X, X, 0]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, z\right]$	`[2,-15]`
3	$[X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, z\right]$	`[3,-14]`
4	$[-X, -X, 0]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, z\right]$	`[4,-13]`
5	$[-X, -X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, -z\right]$	`[5,-12]`
6	$[X, X, 0]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, -z\right]$	`[6,-11]`
7	$[-X, X, 0]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, -z\right]$	`[7,-10]`
8	$[X, -X, 0]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, -z\right]$	`[8,-9]`

Table 53: Wyckoff bond: `16c@8k`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, z\right]$	`[1]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, z\right]$	`[2]`
3	$[-Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, z\right]$	`[3]`
4	$[Y, -X, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, z\right]$	`[4]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, -z\right]$	`[5]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, -z\right]$	`[6]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, -z\right]$	`[7]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, -z\right]$	`[8]`
9	$[-X, -Y, -Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, -z\right]$	`[9]`
10	$[X, Y, -Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, -z\right]$	`[10]`
11	$[Y, -X, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, -z\right]$	`[11]`
12	$[-Y, X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, -z\right]$	`[12]`
13	$[X, -Y, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, z\right]$	`[13]`
14	$[-X, Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, z\right]$	`[14]`
15	$[-Y, -X, Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, z\right]$	`[15]`
16	$[Y, X, Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, z\right]$	`[16]`

* Wyckoff site: `16l`, site symmetry: `1`

Table 54: Wyckoff bond: `16a@16l`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$[x, y, z]$	`[1]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$[-x, -y, z]$	`[2]`
3	$[-Y, X, Z]$	$[-y, x, z]$	`[3]`
4	$[Y, -X, Z]$	$[y, -x, z]$	`[4]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, y+\frac{1}{2}, -z\right]$	`[5]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}-y, -z\right]$	`[6]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[y+\frac{1}{2}, x+\frac{1}{2}, -z\right]$	`[7]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}-x, -z\right]$	`[8]`

continued ...

Table 54

No.	vector	center	mapping
9	$[-X, -Y, -Z]$	$[-x, -y, -z]$	[9]
10	$[X, Y, -Z]$	$[x, y, -z]$	[10]
11	$[Y, -X, -Z]$	$[y, -x, -z]$	[11]
12	$[-Y, X, -Z]$	$[-y, x, -z]$	[12]
13	$[X, -Y, Z]$	$\left[x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - y, z\right]$	[13]
14	$[-X, Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2} - x, y + \frac{1}{2}, z\right]$	[14]
15	$[-Y, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2} - y, \frac{1}{2} - x, z\right]$	[15]
16	$[Y, X, Z]$	$\left[y + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z\right]$	[16]