SG No. 128 D_{4h}^{6} $P4/mnc$ [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	$[0,\ 0,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right]$	`[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	$[-X,\ Y,\ 0]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right]$	`[5,-6,-13,14]`
4	$[Y,\ X,\ 0]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right]$	`[7,-8,-15,16]`

Table 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	$[-X,\ Y,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right]$	`[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: `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	$[0,\ 0,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ 0\right]$	`[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	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[5,-6,-13,14]`
4	$[Y, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[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	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[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: `4c`, site symmetry: `2/m..`

Table 7: Wyckoff bond: `4a@4c`

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	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[5,-6,-13,14]`
4	$[Y, X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[7,-8,-15,16]`

Table 8: Wyckoff bond: `4b@4c`

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

Table 9: Wyckoff bond: `8c@4c`

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	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[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: `4d`, site symmetry: `2.22`

Table 10: Wyckoff bond: `4a@4d`

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

Table 11: Wyckoff bond: `4b@4d`

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

Table 12: Wyckoff bond: `4c@4d`

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

Table 13: Wyckoff bond: `8d@4d`

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

Table 14: Wyckoff bond: `8e@4d`

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

Table 15: Wyckoff bond: `8f@4d`

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

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

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right]$	`[1]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right]$	`[2]`
3	$[-Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}\right]$	`[3]`

continued ...

Table 16

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

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

Table 17: Wyckoff bond: `4a@4e`

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

Table 18: 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	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z\right]$	`[5,-6]`
4	$[Y, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z\right]$	`[7,-8]`
5	$[-X, -Y, 0]$	$[0, 0, -z]$	`[9,-10]`
6	$[Y, -X, 0]$	$[0, 0, -z]$	`[11,-12]`
7	$[X, -Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}\right]$	`[13,-14]`
8	$[-Y, -X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}\right]$	`[15,-16]`

Table 19: Wyckoff bond: `16c@4e`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$[0, 0, z]$	`[1]`

continued ...

Table 19

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

* Wyckoff site: `8f`, site symmetry: `2..`

Table 20: Wyckoff bond: `8a@8f`

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	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} - z\right]$	`[5,-6]`
4	$[Y, X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z\right]$	`[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	$[X, -Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, z + \frac{1}{2}\right]$	`[13,-14]`
8	$[-Y, -X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}\right]$	`[15,-16]`

Table 21: Wyckoff bond: `8b@8f`

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

Table 22: Wyckoff bond: `16c@8f`

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	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} - z\right]$	`[5]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} - z\right]$	`[6]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z\right]$	`[7]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z\right]$	`[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	$[X, -Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, z + \frac{1}{2}\right]$	`[13]`
14	$[-X, Y, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, z + \frac{1}{2}\right]$	`[14]`
15	$[-Y, -X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}\right]$	`[15]`
16	$[Y, X, Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}\right]$	`[16]`

* Wyckoff site: `8g`, site symmetry: `..2`

Table 23: Wyckoff bond: `8a@8g`

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

Table 24: Wyckoff bond: `8b@8g`

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

Table 25: Wyckoff bond: `16c@8g`

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

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

Table 26: Wyckoff bond: `8a@8h`

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	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x, y+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[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 27: Wyckoff bond: `8b@8h`

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	$[0, 0, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, y+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[5,-14]`
6	$[0, 0, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}-y, \frac{1}{2}\right]$	`[6,-13]`

continued ...

Table 27

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 28: Wyckoff bond: `16c@8h`

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	$[-X,\, Y,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, y+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}\right]$	`[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	$[-X,\, -Y,\, -Z]$	$[-x,\, -y,\, 0]$	`[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	$[X,\, -Y,\, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}-y,\, \frac{1}{2}\right]$	`[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: `16i`, site symmetry: `1`

Table 29: Wyckoff bond: `16a@16i`

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	$[-X,\, Y,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, y+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}-z\right]$	`[5]`
6	$[X,\, -Y,\, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}-y,\, \frac{1}{2}-z\right]$	`[6]`
7	$[Y,\, X,\, -Z]$	$\left[y+\frac{1}{2},\, x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}-z\right]$	`[7]`
8	$[-Y,\, -X,\, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-y,\, \frac{1}{2}-x,\, \frac{1}{2}-z\right]$	`[8]`
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	$[X,\, -Y,\, Z]$	$\left[x+\frac{1}{2},\, \frac{1}{2}-y,\, z+\frac{1}{2}\right]$	`[13]`
14	$[-X,\, Y,\, Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x,\, y+\frac{1}{2},\, z+\frac{1}{2}\right]$	`[14]`

continued ...

Table 29

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