SG No. 113 D_{2d}^{3} $P\bar{4}2_1m$ [tetragonal]

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

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

No.	vector	center	mapping
1	$[0, 0, Z]$	$[0, 0, 0]$	`[1,2,-3,-4]`
2	$[0, 0, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[5,6,-7,-8]`

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

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, 0]$	$[0, 0, 0]$	`[1,-2]`
2	$[Y, -X, 0]$	$[0, 0, 0]$	`[3,-4]`
3	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[5,-6]`
4	$[-Y, -X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[7,-8]`

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

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$[0, 0, 0]$	`[1]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$[0, 0, 0]$	`[2]`
3	$[Y, -X, -Z]$	$[0, 0, 0]$	`[3]`
4	$[-Y, X, -Z]$	$[0, 0, 0]$	`[4]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[5]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[6]`
7	$[-Y, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[7]`
8	$[Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right]$	`[8]`

* Wyckoff site: `2b`, site symmetry: `-4..`

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]`
2	$[0, 0, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[5,6,-7,-8]`

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

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, 0]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[1,-2]`
2	$[Y, -X, 0]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-4]`
3	$[-X, Y, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[5,-6]`
4	$[-Y, -X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[7,-8]`

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

No.	vector	center	mapping
1	$[X, Y, Z]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[1]`
2	$[-X, -Y, Z]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[2]`
3	$[Y, -X, -Z]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3]`
4	$[-Y, X, -Z]$	$\left[0, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[4]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[5]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[6]`
7	$[-Y, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[7]`
8	$[Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[8]`

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

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

No.	vector	center	mapping
1	$[X, X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z\right]$	`[1,-2,-7,8]`
2	$[X, -X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, -z\right]$	`[3,-4,-5,6]`

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

No.	vector	center	mapping
1	$[X, -X, 0]$	$\left[0, \frac{1}{2}, z\right]$	`[1,-2,7,-8]`
2	$[-X, -X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, -z\right]$	`[3,-4,5,-6]`

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

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

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

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

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

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

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

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]`

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

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]`

* Wyckoff site: `4d`, site symmetry: `2..`

Table 14: Wyckoff bond: `4a@4d`

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]`

Table 15: Wyckoff bond: `4b@4d`

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

Table 16: Wyckoff bond: `8c@4d`

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]`

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

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

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

Table 18: Wyckoff bond: `4b@4e`

No.	vector	center	mapping
1	$[X, -X, 0]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, z\right]$	`[1,-8]`
2	$[-X, X, 0]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, z\right]$	`[2,-7]`
3	$[-X, -X, 0]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, -z\right]$	`[3,-6]`
4	$[X, X, 0]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, -z\right]$	`[4,-5]`

Table 19: Wyckoff bond: `8c@4e`

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	$[Y, -X, -Z]$	$\left[x+\frac{1}{2}, -x, -z\right]$	`[3]`
4	$[-Y, X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}-x, x, -z\right]$	`[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	$[-Y, -X, Z]$	$\left[-x, \frac{1}{2}-x, z\right]$	`[7]`
8	$[Y, X, Z]$	$\left[x, x+\frac{1}{2}, z\right]$	`[8]`

* Wyckoff site: `8f`, site symmetry: `1`

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

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