SG No. 132 D_{4h}^{10} $P4_2/mcm$ [tetragonal]

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Table 5: Wyckoff bond: `4e@2a`

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

Table 6: Wyckoff bond: `4f@2a`

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

Table 7: Wyckoff bond: `8g@2a`

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

* Wyckoff site: `2b`, site symmetry: `-42m`

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

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

Table 9: Wyckoff bond: `4b@2b`

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

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

No.	vector	center	mapping
1	$[X, X, 0]$	$\left[0, 0, \frac{1}{4}\right]$	`[1,-2,-15,16]`

continued ...

Table 10

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

Table 11: Wyckoff bond: `8d@2b`

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

Table 12: Wyckoff bond: `8e@2b`

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

Table 13: Wyckoff bond: `8f@2b`

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

Table 14: Wyckoff bond: `16g@2b`

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

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

Table 15: Wyckoff bond: `2a@2c`

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

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

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

Table 17: Wyckoff bond: `2c@2c`

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

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

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

Table 19: Wyckoff bond: `4e@2c`

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

Table 20: Wyckoff bond: `4f@2c`

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

Table 21: Wyckoff bond: `8g@2c`

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

* Wyckoff site: `2d`, site symmetry: `-42m`

Table 22: Wyckoff bond: `2a@2d`

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

Table 23: Wyckoff bond: `4b@2d`

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

Table 24: Wyckoff bond: `4c@2d`

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

Table 25: Wyckoff bond: `8d@2d`

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

Table 26: Wyckoff bond: `8e@2d`

No.	vector	center	mapping
1	$[X,\ X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{4}\right]$	`[1,16]`
2	$[-X,\ -X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{4}\right]$	`[2,15]`

continued ...

Table 26

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

Table 27: Wyckoff bond: 8f@2d

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

Table 28: Wyckoff bond: 16g@2d

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

* Wyckoff site: 4e, site symmetry: 222.

Table 29: Wyckoff bond: `4a@4e`

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

Table 30: Wyckoff bond: `4b@4e`

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

Table 31: Wyckoff bond: `4c@4e`

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

Table 32: Wyckoff bond: `8d@4e`

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

Table 33: Wyckoff bond: `8e@4e`

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

Table 34: Wyckoff bond: `8f@4e`

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

Table 35: Wyckoff bond: `16g@4e`

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	$[-Y,\ X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{3}{4}\right]$	`[3]`
4	$[Y,\ -X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{3}{4}\right]$	`[4]`
5	$[-X,\ Y,\ -Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{4}\right]$	`[5]`
6	$[X,\ -Y,\ -Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{4}\right]$	`[6]`
7	$[Y,\ X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{3}{4}\right]$	`[7]`
8	$[-Y,\ -X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{3}{4}\right]$	`[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	$[Y,\ -X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{1}{4}\right]$	`[11]`
12	$[-Y,\ X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{1}{4}\right]$	`[12]`
13	$[X,\ -Y,\ Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ \frac{3}{4}\right]$	`[13]`
14	$[-X,\ Y,\ Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ \frac{3}{4}\right]$	`[14]`
15	$[-Y,\ -X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{1}{4}\right]$	`[15]`
16	$[Y,\ X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{1}{4}\right]$	`[16]`

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

Table 36: Wyckoff bond: `4a@4f`

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

Table 37: Wyckoff bond: `4b@4f`

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

Table 38: Wyckoff bond: `8c@4f`

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	$[-Y, X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[3,-11]`
4	$[Y, -X, Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right]$	`[4,-12]`
5	$[-X, Y, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[5,-13]`
6	$[X, -Y, -Z]$	$\left[0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$	`[6,-14]`
7	$[Y, X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[7,-15]`
8	$[-Y, -X, -Z]$	$\left[\frac{1}{2}, 0, 0\right]$	`[8,-16]`

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

Table 39: Wyckoff bond: `4a@4g`

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

Table 40: Wyckoff bond: `4b@4g`

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

Table 41: Wyckoff bond: `8c@4g`

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

Table 42: Wyckoff bond: `8d@4g`

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

Table 43: Wyckoff bond: `16e@4g`

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

continued ...

Table 43

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

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

Table 44: Wyckoff bond: `4a@4h`

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

Table 45: Wyckoff bond: `4b@4h`

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

Table 46: Wyckoff bond: `8c@4h`

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

Table 47: Wyckoff bond: `8d@4h`

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

Table 48: Wyckoff bond: `16e@4h`

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

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

Table 49: Wyckoff bond: `4a@4i`

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

Table 50: Wyckoff bond: `4b@4i`

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

Table 51: Wyckoff bond: `4c@4i`

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

Table 52: Wyckoff bond: `8d@4i`

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

Table 53: Wyckoff bond: `8e@4i`

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

Table 54: Wyckoff bond: `8f@4i`

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

Table 55: Wyckoff bond: `16g@4i`

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

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

Table 56: Wyckoff bond: `4a@4j`

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

Table 57: Wyckoff bond: `4b@4j`

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

Table 58: Wyckoff bond: `4c@4j`

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

Table 59: Wyckoff bond: `8d@4j`

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

Table 60: Wyckoff bond: `8e@4j`

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

Table 61: Wyckoff bond: `8f@4j`

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

Table 62: Wyckoff bond: `16g@4j`

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

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

Table 63: Wyckoff bond: `8a@8k`

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

Table 64: Wyckoff bond: `8b@8k`

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

Table 65: Wyckoff bond: `16c@8k`

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	$[-Y,\ X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z+\frac{1}{2}\right]$	`[3]`
4	$[Y,\ -X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z+\frac{1}{2}\right]$	`[4]`
5	$[-X,\ Y,\ -Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}-z\right]$	`[5]`
6	$[X,\ -Y,\ -Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}-z\right]$	`[6]`
7	$[Y,\ X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ -z\right]$	`[7]`
8	$[-Y,\ -X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ -z\right]$	`[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	$[Y,\ -X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{1}{2}-z\right]$	`[11]`
12	$[-Y,\ X,\ -Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ \frac{1}{2}-z\right]$	`[12]`
13	$[X,\ -Y,\ Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ z+\frac{1}{2}\right]$	`[13]`
14	$[-X,\ Y,\ Z]$	$\left[0,\ \frac{1}{2},\ z+\frac{1}{2}\right]$	`[14]`
15	$[-Y,\ -X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z\right]$	`[15]`
16	$[Y,\ X,\ Z]$	$\left[\frac{1}{2},\ 0,\ z\right]$	`[16]`

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

Table 66: Wyckoff bond: `8a@8l`

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

continued ...

Table 66

No.	vector	center	mapping
7	$[X,\ 0,\ -Z]$	$\left[0,\ -x,\ \frac{1}{4}\right]$	`[11,-15]`
8	$[-X,\ 0,\ -Z]$	$\left[0,\ x,\ \frac{1}{4}\right]$	`[12,-16]`

Table 67: Wyckoff bond: `8b@8l`

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

Table 68: Wyckoff bond: `16c@8l`

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

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

Table 69: Wyckoff bond: `8a@8m`

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

Table 70: Wyckoff bond: `8b@8m`

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

Table 71: Wyckoff bond: `16c@8m`

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

* Wyckoff site: 8n, site symmetry: m..

Table 72: Wyckoff bond: 8a@8n

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

Table 73: Wyckoff bond: 8b@8n

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

Table 74: Wyckoff bond: 16c@8n

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

continued ...

Table 74

No.	vector	center	mapping
16	$[Y, X, Z]$	$[y, x, 0]$	`[16]`

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

Table 75: Wyckoff bond: `8a@8o`

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

Table 76: Wyckoff bond: `8b@8o`

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

Table 77: Wyckoff bond: `16c@8o`

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

continued ...

Table 77

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

* Wyckoff site: 16p, site symmetry: 1

Table 78: Wyckoff bond: 16a@16p

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