SG No. 129 D_{4h}^{7} $P4/nmm$ [tetragonal]

* plus set: $+[0, 0, 0]$
* Wyckoff site: `2a`, site symmetry: `-4m2`

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

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

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

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

Table 3: Wyckoff bond: `4c@2a`

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

Table 4: Wyckoff bond: `8d@2a`

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

Table 5: Wyckoff bond: `8e@2a`

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

Table 6: Wyckoff bond: `8f@2a`

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

Table 7: Wyckoff bond: `16g@2a`

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

* Wyckoff site: 2b, site symmetry: -4m2

Table 8: Wyckoff bond: 2a@2b

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

Table 9: Wyckoff bond: 4b@2b

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

Table 10: Wyckoff bond: 4c@2b

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

Table 11: Wyckoff bond: 8d@2b

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

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

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

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

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

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

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

* Wyckoff site: 2c, site symmetry: 4mm

Table 15: Wyckoff bond: 2a@2c

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

Table 16: Wyckoff bond: 4b@2c

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

Table 17: Wyckoff bond: 4c@2c

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

Table 18: Wyckoff bond: 8d@2c

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

Table 19: Wyckoff bond: `8e@2c`

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

Table 20: Wyckoff bond: `8f@2c`

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

Table 21: Wyckoff bond: `16g@2c`

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

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

Table 22: Wyckoff bond: `4a@4d`

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

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

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

Table 24: Wyckoff bond: `8c@4d`

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

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

Table 25: Wyckoff bond: `4a@4e`

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

Table 26: Wyckoff bond: `4b@4e`

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

Table 27: Wyckoff bond: `8c@4e`

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

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

Table 28: Wyckoff bond: `4a@4f`

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

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

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

Table 30: Wyckoff bond: `8c@4f`

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

Table 31: Wyckoff bond: `8d@4f`

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

Table 32: Wyckoff bond: `16e@4f`

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

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

Table 33: Wyckoff bond: 8a@8g

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

Table 34: Wyckoff bond: 8b@8g

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

Table 35: Wyckoff bond: 16c@8g

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

continued ...

Table 35

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

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

Table 36: Wyckoff bond: `8a@8h`

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

Table 37: Wyckoff bond: `8b@8h`

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

Table 38: Wyckoff bond: `16c@8h`

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

continued ...

Table 38

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

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

Table 39: Wyckoff bond: `8a@8i`

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

Table 40: Wyckoff bond: `8b@8i`

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

Table 41: Wyckoff bond: `16c@8i`

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

continued ...

Table 41

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

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

Table 42: Wyckoff bond: `8a@8j`

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

Table 43: Wyckoff bond: `8b@8j`

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

Table 44: Wyckoff bond: `16c@8j`

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

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

Table 45: Wyckoff bond: `16a@16k`

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