

Table 1: Wyckoff site: 4a, site symmetry: $m..1'$

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

Table 2: Wyckoff site: 8b, site symmetry: $11'$

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