

Table 1: Wyckoff site: **8a**, site symmetry: $m..$

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

Table 2: Wyckoff site: **8b**, site symmetry: $m'..$

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

Table 3: Wyckoff site: **16c**, site symmetry: 1

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

continued ...

Table 3

No.	position	mapping
16	$[x, \frac{1}{2} - y, z + \frac{1}{2}]$	[16]