

SG No. 199 T^5 $I2_13$ [cubic]

* plus set: $+ [0, 0, 0], + [\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$

* Wyckoff site: **8a**, site symmetry: $.3.$

Table 1: Wyckoff bond: **8a@8a**

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

Table 2: Wyckoff bond: **24b@8a**

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

* Wyckoff site: **12b**, site symmetry: $2..$

Table 3: Wyckoff bond: **12a@12b**

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

Table 4: Wyckoff bond: **12b@12b**

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

Table 5: Wyckoff bond: **24c@12b**

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

* Wyckoff site: **24c**, site symmetry: **1**

Table 6: Wyckoff bond: **24a@24c**

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