

Table 1: Wyckoff site: **8a**, site symmetry:  $\dots 2'$ 

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

Table 2: Wyckoff site: **16b**, site symmetry:  $1$ 

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