

No. 123 *P 4/m m m* CONTINUED

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

16	<i>u</i>	1	(1) x, y, z	(2) \bar{x}, \bar{y}, z	(3) \bar{y}, x, z	(4) y, \bar{x}, z
			(5) \bar{x}, y, \bar{z}	(6) x, \bar{y}, \bar{z}	(7) y, x, \bar{z}	(8) $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z}$
			(9) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	(10) x, y, \bar{z}	(11) y, \bar{x}, \bar{z}	(12) \bar{y}, x, \bar{z}
			(13) x, \bar{y}, z	(14) \bar{x}, y, z	(15) \bar{y}, \bar{x}, z	(16) y, x, z
8	<i>t</i>	<i>m</i> .	$x, \frac{1}{2}, z$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, x, z$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, z$
			$\bar{x}, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$x, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$\frac{1}{2}, x, \bar{z}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, \bar{z}$
8	<i>s</i>	<i>m</i> .	$x, 0, z$	$\bar{x}, 0, z$	$0, x, z$	$0, \bar{x}, z$
			$\bar{x}, 0, \bar{z}$	$x, 0, \bar{z}$	$0, x, \bar{z}$	$0, \bar{x}, \bar{z}$
8	<i>r</i>	<i>m</i>	x, x, z	\bar{x}, \bar{x}, z	\bar{x}, x, z	x, \bar{x}, z
			\bar{x}, x, \bar{z}	x, \bar{x}, \bar{z}	x, x, \bar{z}	$\bar{x}, \bar{x}, \bar{z}$
8	<i>q</i>	<i>m</i> ..	$x, y, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2}$	$\bar{y}, x, \frac{1}{2}$	$y, \bar{x}, \frac{1}{2}$
			$\bar{x}, y, \frac{1}{2}$	$x, \bar{y}, \frac{1}{2}$	$y, x, \frac{1}{2}$	$\bar{y}, \bar{x}, \frac{1}{2}$
8	<i>p</i>	<i>m</i> ..	$x, y, 0$	$\bar{x}, \bar{y}, 0$	$\bar{y}, x, 0$	$y, \bar{x}, 0$
			$\bar{x}, y, 0$	$x, \bar{y}, 0$	$y, x, 0$	$\bar{y}, \bar{x}, 0$
4	<i>o</i>	<i>m 2m</i> .	$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{2}$
4	<i>n</i>	<i>m 2m</i> .	$x, \frac{1}{2}, 0$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, x, 0$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, 0$
4	<i>m</i>	<i>m 2m</i> .	$x, 0, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, 0, \frac{1}{2}$	$0, x, \frac{1}{2}$	$0, \bar{x}, \frac{1}{2}$
4	<i>l</i>	<i>m 2m</i> .	$x, 0, 0$	$\bar{x}, 0, 0$	$0, x, 0$	$0, \bar{x}, 0$
4	<i>k</i>	<i>m . 2m</i>	$x, x, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, x, \frac{1}{2}$	$x, \bar{x}, \frac{1}{2}$
4	<i>j</i>	<i>m . 2m</i>	$x, x, 0$	$\bar{x}, \bar{x}, 0$	$\bar{x}, x, 0$	$x, \bar{x}, 0$
4	<i>i</i>	<i>2m m</i> .	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$	$0, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z}$
2	<i>h</i>	<i>4m m</i>	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z}$		
2	<i>g</i>	<i>4m m</i>	$0, 0, z$	$0, 0, \bar{z}$		
2	<i>f</i>	<i>m m m</i> .	$0, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, 0$		
2	<i>e</i>	<i>m m m</i> .	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$		
1	<i>d</i>	<i>4/m m m</i>	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			
1	<i>c</i>	<i>4/m m m</i>	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$			
1	<i>b</i>	<i>4/m m m</i>	$0, 0, \frac{1}{2}$			
1	<i>a</i>	<i>4/m m m</i>	$0, 0, 0$			