

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

In the case of a Weissenberg complex (*cf.* Section 3.4.1.5.2; Weissenberg, 1925; Fischer *et al.*, 1973), the central part of the descriptive symbol always consists of two (or more) symbols of invariant lattice complexes belonging to the same crystal family and forming limiting complexes of the Weissenberg complex under consideration. The shift vector then refers to the first limiting complex. The corresponding site-set symbols are distinguished by containing the number 1 as the only number, *i.e.* each site set consists of only one point.

Example

In $\frac{1}{4}00$.2. P_aB1z ($Pmma$ $2e \frac{1}{4}, 0, z$), each of the two points $\frac{1}{4}, 0, 0$ and $\frac{3}{4}, 0, 0$, represented by $\frac{1}{4}00 P_a$, is replaced by a site set $1z$ containing only one point, *i.e.* the points of $\frac{1}{4}00 P_a$ are shifted along the z axis. The shifts of the two points are related by a twofold rotation .2., *i.e.* are running in opposite directions. The point configurations of the two limiting complexes P_a and B refer to the special parameter values $z = 0$ and $z = \frac{1}{4}$, respectively.

The central parts of some lattice complexes with two or three degrees of freedom are formed by the descriptive symbol of a univariant Weissenberg complex instead of that of an invariant lattice complex. This is the case only if the corresponding characteristic space-group type does not refer to a suitable invariant lattice complex.

Example

In $\frac{1}{4}00$.2. P_aB1z2y ($Pmma$ $4k \frac{1}{4}, y, z$), each of the two points $\frac{1}{4}, 0, z$ and $\frac{3}{4}, 0, \bar{z}$, represented by $\frac{1}{4}00$.2. P_aB1z , is replaced by a site set $2y$ of two points forming a dumbbell. These dumbbells are oriented parallel to the y axis.

The symbol of a non-characteristic Wyckoff position is deduced from that of the characteristic position. The four parts of the descriptive symbol are subjected to the transformation necessary to map the characteristic Wyckoff position onto the Wyckoff position under consideration.

Example

The lattice complex with characteristic Wyckoff position $Imma$ $8h$ $0, y, z$ has the descriptive symbol .2. B_b2yz for this position. Another Wyckoff position of this lattice complex is $Imma$ $8i$ $x, \frac{1}{4}, z$. The corresponding point configurations are mapped onto each other by interchanging positive x and negative y directions and shifting by $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$. Therefore, the descriptive symbol for Wyckoff position $Imma$ i is $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ 2.. A_a2xz .

In some cases, the Wyckoff position described by a lattice-complex symbol has more degrees of freedom than the lattice complex (see Section 3.4.1.5.1). In such cases, a letter (or a string of letters) in brackets is added to the symbol.

Examples

$tP[z]$ for $P4$ a , $aP[xyz]$ for $P1$ a .

3.4.3.1.4. Properties of the descriptive symbols

Different kinds of relations between lattice complexes are brought out.

Examples

$P \leftrightarrow P4x \leftrightarrow P4x2z$, $I4xxx \leftrightarrow$.2. $I4xxx$, $P4x \leftrightarrow I4x$.

In many cases, limiting-complex relations can be deduced from the symbols. This applies to limiting complexes due either to

special metrical parameters (*e.g.* $cP \leftrightarrow rP$ *etc.*) or to special values of coordinates (*e.g.* both $P4x$ and $P4xx$ are limiting complexes of $P4xy$). If the site set consists of only one point, the central part of the symbol specifies all corresponding limiting complexes without degrees of freedom that are due to special values of the coordinates (*e.g.* 2_12_1 . $FA_aB_bC_cI_aI_bI_c1xyz$ for the general position of $P2_12_12_1$).

3.4.3.2. Assignment of Wyckoff positions to Wyckoff sets and to lattice complexes

In Tables 3.4.3.2 and 3.4.3.3, the Wyckoff positions of all plane and space groups, respectively, are listed. Each Wyckoff position is identified by its Wyckoff letter together with its oriented site-symmetry symbol. It is assigned to its lattice complex by means of the reference symbol (*cf.* Section 3.4.1.3). Characteristic Wyckoff positions are marked by asterisks (*e.g.* $2e$ in $P2/c$). If in a particular space group several Wyckoff positions belong to the same Wyckoff set (*cf.* Sections 1.4.4.3 and 3.4.1.2; Koch & Fischer, 1975), the reference symbol is given only once (*e.g.* Wyckoff positions $4l$ to $4o$ in $P4/mmm$). To enable this, the usual sequence of Wyckoff positions had to be changed in a few cases (*e.g.* in $P4_2/mcm$). For Wyckoff positions assigned to the same lattice complex but belonging to different Wyckoff sets, the reference symbol is repeated. In $I4/m$, for example, Wyckoff positions $4c$ and $4d$ are both assigned to the lattice complex $P4/mmm$ a . They do not belong, however, to the same Wyckoff set because the site-symmetry groups $2/m..$ of $4c$ and $\bar{4}..$ of $4d$ are different.

The last columns of Tables 3.4.3.2 and 3.4.3.3 show the descriptive lattice-complex symbol for each Wyckoff position.

3.4.4. Applications of the lattice-complex concept

3.4.4.1. Geometrical properties of point configurations

To study the geometrical properties of all point configurations in three-dimensional space, it is not necessary to consider all Wyckoff positions of the space groups or all 1128 types of Wyckoff set. Instead, one may restrict the investigations to the characteristic Wyckoff positions of the 402 lattice complexes. The results can then be transferred to all non-characteristic Wyckoff positions of the lattice complexes, as listed in Tables 3.4.3.2 and 3.4.3.3.

The determination of all types of sphere packings with cubic and tetragonal symmetry forms an example for this kind of procedure (Fischer, 1973, 1974, 1991a,b, 1993). The cubic lattice complex $I4xxx$, for example, allows two types of sphere packings within its characteristic Wyckoff position $\bar{I}43m$ $8c$. $3m$. x, x, x . Sphere packings with three-membered rings and nine contacts per sphere are formed if $x = 3/16$. The parameter region $3/16 < x < \frac{1}{4}$ corresponds to sphere packings with four-membered rings and six contacts per sphere (*cf.* Fischer, 1973). Ag_3PO_4 crystallizes with symmetry $P43n$ (Deschizeaux-Cheruy *et al.*, 1982) and the oxygen atoms occupy Wyckoff position $8e$. 3 . x, x, x , which also belongs to lattice complex $I4xxx$. Comparison of the coordinate parameter $x = 0.1491$ for the oxygen atoms with the sphere-packing parameters listed for $\bar{I}43m$ c shows directly that the oxygen arrangement in this crystal structure does not form a sphere packing.

Other examples for this approach are the derivation of crystal potentials (Naor, 1958), of coordinate restrictions in

(continued on page 823)

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.2

Plane groups: assignment of Wyckoff positions to Wyckoff sets and to lattice complexes

Wyckoff positions of the same Wyckoff set can be recognized by their consecutive listing without repetition of the reference symbol. Characteristic Wyckoff sets are marked by asterisks.

1 p1					10 p4					
1	a	1		$P[xy]$	1	a	4..	$p4mm\ a$	P	
					1	b			$\frac{1}{2}P$	
2 p2					2	c	2..	$p4mm\ a$	$0\frac{1}{2}C$	
1	a	2	*	$p2\ a$	4	d	1	* $p4\ d$	$P4xy$	
1	b			$0\frac{1}{2}P$	11 p4mm					
1	c			$\frac{1}{2}P$	1	a	4mm	* $p4mm\ a$	P	
1	d			$\frac{1}{2}P$	1	b			$\frac{1}{2}P$	
2	e	1	*	$p2\ e$	2	c	2mm.	$p4mm\ a$	$0\frac{1}{2}C$	
				$P2xy$	4	d	.m.	* $p4mm\ d$	$P4x$	
3 pm					4	e			$\frac{1}{2}P4x$	
1	a	.m.		$P[y]$	4	f	.m	* $p4mm\ f$	$P4xx$	
1	b			$\frac{1}{2}P[y]$	8	g	1	* $p4mm\ g$	$P4x2y$	
2	c	1		$P2x[y]$	12 p4gm					
4 pg					2	a	4..	$p4mm\ a$	C	
2	a	1		$p2mg\ c$	2	b	2.mm	$p4mm\ a$	$0\frac{1}{2}C$	
				$2.. P_b C1x[y]$	4	c	.m	* $p4gm\ c$	$0\frac{1}{2}.g. C2xx$	
5 cm					8	d	1	* $p4gm\ d$	$.m\ C4xy$	
2	a	.m.		$c2mm\ a$	$C[y]$	13 p3				
4	b	1		$c2mm\ d$	$C2x[y]$	1	a	3..	$p6mm\ a$	P
6 p2mm					1	b			$\frac{1}{3}P$	
1	a	2mm	*	$p2mm\ a$	P	1	c			$\frac{2}{3}P$
1	b			$0\frac{1}{2}P$	3	d	1	* $p3\ d$	$P3xy$	
1	c			$\frac{1}{2}P$	14 p3m1					
1	d			$\frac{1}{2}P$	1	a	3m.	$p6mm\ a$	P	
2	e	.m	*	$p2mm\ e$	$P2x$	1	b			$\frac{1}{3}P$
2	f			$0\frac{1}{2}P2x$	1	c			$\frac{2}{3}P$	
2	g	.m.		$P2y$	3	d	.m.	* $p3m1\ d$	$P3x\bar{x}$	
2	h			$\frac{1}{2}P2y$	6	e	1	* $p3m1\ e$	$P3x\bar{x}2y$	
4	i	1	*	$p2mm\ i$	$P2x2y$	15 p31m				
7 p2mg					1	a	3.m	$p6mm\ a$	P	
2	a	2..		$p2mm\ a$	P_a	2	b	3..	$p6mm\ b$	G
2	b			$0\frac{1}{2}P_a$	3	c	.m	* $p31m\ c$	$P3x$	
2	c	.m.	*	$p2mg\ c$	$\frac{1}{4}0\ 2.. P_a C1y$	6	d	1	* $p31m\ d$	$P3x2y$
4	d	1	*	$p2mg\ d$	$.m. P_a 2xy$	16 p6				
8 p2gg					1	a	6..	$p6mm\ a$	P	
2	a	2..		$c2mm\ a$	C	2	b	3..	$p6mm\ b$	G
2	b			$\frac{1}{2}C$	3	c	2..	$p6mm\ c$	N	
4	c	1	*	$p2gg\ c$	$.g. C2xy$	6	d	1	* $p6\ d$	$P6xy$
9 c2mm					17 p6mm					
2	a	2mm	*	$c2mm\ a$	C	1	a	6mm	* $p6mm\ a$	P
2	b			$0\frac{1}{2}C$	2	b	3m.	* $p6mm\ b$	G	
4	c	2..		$\frac{1}{4}P_{ab}$	3	c	2mm	* $p6mm\ c$	N	
4	d	.m	*	$c2mm\ d$	$C2x$	6	d	.m	* $p6mm\ d$	$P6x$
4	e	.m.		$C2y$	6	e	.m.	* $p6mm\ e$	$P6x\bar{x}$	
8	f	1	*	$c2mm\ f$	$C2x2y$	12	f	1	* $p6mm\ f$	$P6x2y$

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3

Space groups: assignment of Wyckoff positions to Wyckoff sets and to lattice complexes

Wyckoff positions of the same Wyckoff set can be recognized by their consecutive listing without repetition of the reference symbol. Characteristic Wyckoff sets are marked by asterisks.

1 P1					1	<i>h</i>			$\frac{111}{222} P$
1	<i>a</i>	1	$P\bar{1} a$	$P[xyz]$	2	<i>i</i>	2	* $P2/m i$	$P2y$
2 P$\bar{1}$					2	<i>j</i>			$\frac{1}{2}00 P2y$
1	<i>a</i>	$\bar{1}$	$P\bar{1} a$	P	2	<i>k</i>			$00\frac{1}{2} P2y$
1	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} P$	2	<i>l</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2} P2y$
1	<i>c</i>			$0\frac{1}{2}0 P$	2	<i>m</i>	<i>m</i>	* $P2/m m$	$P2xz$
1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}00 P$	2	<i>n</i>			$0\frac{1}{2}0 P2xz$
1	<i>e</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P$	4	<i>o</i>	1	* $P2/m o$	$P2xz2y$
1	<i>f</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2} P$	11 P$2_1/m$				
1	<i>g</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$	2	<i>a</i>	$\bar{1}$	$P2/m a$	P_b
1	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$	2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}00 P_b$
2	<i>i</i>	1	* $P\bar{1} i$	$P2xyz$	2	<i>c</i>			$00\frac{1}{2} P_b$
3 P2					2	<i>d</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2} P_b$
1	<i>a</i>	2	$P2/m a$	$P[y]$	2	<i>e</i>	<i>m</i>	* $P2_1/m e$	$0\frac{1}{4}0 2_1P_bACI1xz$
1	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} P[y]$	4	<i>f</i>	1	* $P2_1/m f$	$m P_b2xyz$
1	<i>c</i>			$\frac{1}{2}00 P[y]$	12 C$2/m$				
1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2} P[y]$	2	<i>a</i>	$2/m$	* $C2/m a$	C
2	<i>e</i>	1	$P2/m m$	$P2xz[y]$	2	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}0 C$
4 P2_1					2	<i>c</i>			$00\frac{1}{2} C$
2	<i>a</i>	1	$P2_1/m e$	$2_1 P_bACI1xz[y]$	2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2} C$
5 C2					4	<i>e</i>	$\bar{1}$	$P2/m a$	$\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_{ab}$
2	<i>a</i>	2	$C2/m a$	$C[y]$	4	<i>f</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2} P_{ab}$
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} C[y]$	4	<i>g</i>	2	* $C2/m g$	$C2y$
4	<i>c</i>	1	$C2/m i$	$C2xz[y]$	4	<i>h</i>			$00\frac{1}{2} C2y$
6 Pm					4	<i>i</i>	<i>m</i>	* $C2/m i$	$C2xz$
1	<i>a</i>	<i>m</i>	$P2/m a$	$P[xz]$	8	<i>j</i>	1	* $C2/m j$	$C2xz2y$
1	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}0 P[xz]$	13 P$2/c$				
2	<i>c</i>	1	$P2/m i$	$P2y[xz]$	2	<i>a</i>	$\bar{1}$	$P2/m a$	P_c
7 Pc					2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P_c$
2	<i>a</i>	1	$P2/c e$	$c P_cA1y[xz]$	2	<i>c</i>			$0\frac{1}{2}0 P_c$
8 Cm					2	<i>d</i>			$\frac{1}{2}00 P_c$
2	<i>a</i>	<i>m</i>	$C2/m a$	$C[xz]$	2	<i>e</i>	2	* $P2/c e$	$00\frac{1}{4} c P_cA1y$
4	<i>b</i>	1	$C2/m g$	$C2y[xz]$	2	<i>f</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{4} c P_cA1y$
9 Cc					4	<i>g</i>	1	* $P2/c g$	$2 P_c2xyz$
4	<i>a</i>	1	$C2/c e$	$\bar{1} C_cF1y[xz]$	14 P$2_1/c$				
10 P$2/m$					2	<i>a</i>	$\bar{1}$	$C2/m a$	A
1	<i>a</i>	$2/m$	* $P2/m a$	P	2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}00 A$
1	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}0 P$	2	<i>c</i>			$00\frac{1}{2} A$
1	<i>c</i>			$00\frac{1}{2} P$	2	<i>d</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2} A$
1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}00 P$	4	<i>e</i>	1	* $P2_1/c e$	$c A2xyz$
1	<i>e</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P$	15 C$2/c$				
1	<i>f</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$	4	<i>a</i>	$\bar{1}$	$C2/m a$	C_c
1	<i>g</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2} P$	4	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}0 C_c$
11 P$2_1/m$					4	<i>c</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0 F$
2	<i>a</i>	$\bar{1}$	$P2/m a$	P_b	4	<i>d</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2} F$
2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}00 P_b$	4	<i>e</i>	2	* $C2/c e$	$00\frac{1}{4} \bar{1} C_cF1y$
2	<i>c</i>			$00\frac{1}{2} P_b$	8	<i>f</i>	1	* $C2/c f$	$2_1 C_c2xyz$
2	<i>d</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2} P_b$					
2	<i>e</i>	<i>m</i>	* $P2_1/m e$	$0\frac{1}{4}0 2_1P_bACI1xz$					
4	<i>f</i>	1	* $P2_1/m f$	$m P_b2xyz$					

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.3 (continued)

16 P222					4	<i>k</i>	..2	<i>Cmme g</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0$ 2.. $P_{ab}F1z$
1	<i>a</i>	222	<i>Pmmm a</i>	<i>P</i>	8	<i>l</i>	1	* <i>C222 l</i>	$C2x2yz$
1	<i>b</i>			$\frac{1}{2}00$ <i>P</i>					
1	<i>c</i>			$0\frac{1}{2}0$ <i>P</i>	22 F222				
1	<i>d</i>			$00\frac{1}{2}$ <i>P</i>	4	<i>a</i>	222	<i>Fmmm a</i>	<i>F</i>
1	<i>e</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ <i>P</i>	4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}$ <i>F</i>
1	<i>f</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ <i>P</i>	4	<i>c</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ <i>F</i>
1	<i>g</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ <i>P</i>	4	<i>d</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}$ <i>F</i>
1	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ <i>P</i>	8	<i>e</i>	2..	<i>Fmmm g</i>	$F2x$
2	<i>i</i>	2..	<i>Pmmm i</i>	$P2x$	8	<i>j</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ $F2x$
2	<i>j</i>			$00\frac{1}{2}$ $P2x$	8	<i>f</i>	..2.		$F2y$
2	<i>k</i>			$0\frac{1}{2}0$ $P2x$	8	<i>i</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ $F2y$
2	<i>l</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ $P2x$	8	<i>g</i>	..2		$F2z$
2	<i>m</i>	..2.		$P2y$	8	<i>h</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ $F2z$
2	<i>n</i>			$00\frac{1}{2}$ $P2y$	16	<i>k</i>	1	* <i>F222 k</i>	$F2x2yz$
2	<i>o</i>			$\frac{1}{2}00$ $P2y$					
2	<i>p</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ $P2y$	23 I222				
2	<i>q</i>	..2		$P2z$	2	<i>a</i>	222	<i>Immm a</i>	<i>I</i>
2	<i>r</i>			$\frac{1}{2}00$ $P2z$	2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}00$ <i>I</i>
2	<i>s</i>			$0\frac{1}{2}0$ $P2z$	2	<i>c</i>			$00\frac{1}{2}$ <i>I</i>
2	<i>t</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ $P2z$	2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}0$ <i>I</i>
4	<i>u</i>	1	* <i>P222 u</i>	$P2x2yz$	4	<i>e</i>	2..	<i>Immm e</i>	$I2x$
17 P222₁					4	<i>f</i>			$00\frac{1}{2}$ $I2x$
2	<i>a</i>	2..	<i>Pmma e</i>	..2. P_cB1x	4	<i>g</i>	..2.		$I2y$
2	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}0$..2. P_cB1x	4	<i>h</i>			$\frac{1}{2}00$ $I2y$
2	<i>c</i>	..2.		$00\frac{1}{4}$ 2.. P_cA1y	4	<i>i</i>	..2		$I2z$
2	<i>d</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{4}$ 2.. P_cA1y	4	<i>j</i>			$0\frac{1}{2}0$ $I2z$
4	<i>e</i>	1	* <i>P222₁ e</i>	..2. $P_cB1x2yz$	8	<i>k</i>	1	* <i>I222 k</i>	$I2x2yz$
18 P2₁2₁2					24 I2₁2₁2₁				
2	<i>a</i>	..2	<i>Pmnm a</i>	2 ₁ .. $CI1z$	4	<i>a</i>	2..	<i>Imma e</i>	$\frac{1}{4}0\frac{1}{4}$..2 C_cB_b1x
2	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}0$ 2 ₁ .. $CI1z$	4	<i>b</i>	..2.		$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0$ 2.. A_aC_c1y
4	<i>c</i>	1	* <i>P2₁2₁2 c</i>	2 ₁ .. $CI1z2xy$	4	<i>c</i>	..2		$0\frac{1}{4}\frac{1}{4}$..2. B_bA_a1z
19 P2₁2₁2₁					8	<i>d</i>	1	* <i>I2₁2₁2₁ d</i>	$\frac{1}{4}0\frac{1}{4}$..2 C_cB_b1x2yz
4	<i>a</i>	1	* <i>P2₁2₁2₁ a</i>	2 ₁ 2 ₁ .. $FA_aB_bC_cI_aI_bI_c1xyz$	25 Pmm2				
20 C222₁					1	<i>a</i>	<i>mm2</i>	<i>Pmmm a</i>	$P[z]$
4	<i>a</i>	2..	<i>Cmcm c</i>	..2 ₁ .. C_cF1x	1	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}0$ $P[z]$
4	<i>b</i>	..2.		$00\frac{1}{4}$ 2 ₁ .. C_cF1y	1	<i>c</i>			$\frac{1}{2}00$ $P[z]$
8	<i>c</i>	1	* <i>C222₁ c</i>	..2 ₁ .. $C_cF1x2yz$	1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ $P[z]$
21 C222					2	<i>e</i>	<i>m.</i>	<i>Pmmm i</i>	$P2x[z]$
2	<i>a</i>	222	<i>Cmmm a</i>	<i>C</i>	2	<i>f</i>	<i>m..</i>		$0\frac{1}{2}0$ $P2x[z]$
2	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}0$ <i>C</i>	2	<i>g</i>			$P2y[z]$
2	<i>c</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$ <i>C</i>	2	<i>h</i>			$\frac{1}{2}00$ $P2y[z]$
2	<i>d</i>			$00\frac{1}{2}$ <i>C</i>	4	<i>i</i>	1	<i>Pmmm u</i>	$P2x2y[z]$
4	<i>e</i>	2..	<i>Cmmm g</i>	$C2x$	26 Pmc2₁				
4	<i>f</i>			$00\frac{1}{2}$ $C2x$	2	<i>a</i>	<i>m..</i>	<i>Pmma e</i>	2.. $P_cA1y[z]$
4	<i>g</i>	..2.		$C2y$	2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}00$ 2.. $P_cA1y[z]$
4	<i>h</i>			$00\frac{1}{2}$ $C2y$	4	<i>c</i>	1	<i>Pmma k</i>	2.. $P_cA1y2x[z]$
4	<i>i</i>	..2	<i>Cmmm k</i>	$C2z$	27 Pcc2				
4	<i>j</i>			$0\frac{1}{2}0$ $C2z$	2	<i>a</i>	..2	<i>Pmmm a</i>	$P_c[z]$
					2	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}0$ $P_c[z]$

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3 (continued)

2	<i>c</i>		$\frac{1}{2}00 P_c[z]$	38 <i>Amm2</i>			
2	<i>d</i>		$\frac{1}{2}0 P_c[z]$	2	<i>a</i>	<i>mm2</i>	<i>Cmmm a</i> $A[z]$
4	<i>e</i>	1	$2.. P_c2xy[z]$	2	<i>b</i>		$\frac{1}{2}00 A[z]$
28 <i>Pma2</i>				4	<i>c</i>	<i>.m.</i>	<i>Cmmm k</i> $A2x[z]$
2	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Pmmm a</i> $P_a[z]$	4	<i>d</i>	<i>m..</i>	<i>Cmmm g</i> $A2y[z]$
2	<i>b</i>		$0\frac{1}{2}0 P_a[z]$	4	<i>e</i>		$\frac{1}{2}00 A2y[z]$
2	<i>c</i>	<i>m..</i>	<i>Pmma e</i> $\frac{1}{4}00 ..2 P_a C1y[z]$	8	<i>f</i>	1	<i>Cmmm n</i> $A2x2y[z]$
4	<i>d</i>	1	<i>Pmma i</i> $m.. P_a2xy[z]$	39 <i>Aem2</i>			
29 <i>Pca2₁</i>				4	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Pmmm a</i> $P_{bc}[z]$
4	<i>a</i>	1	<i>Pbcm d</i> $.2\bar{1} P_{ac}B_aC_cF1xy[z]$	4	<i>b</i>		$\frac{1}{2}00 P_{bc}[z]$
30 <i>Pnc2</i>				4	<i>c</i>	<i>.m.</i>	<i>Cmme g</i> $0\frac{1}{4}0 ..2 P_{bc}F1x[z]$
2	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Cmmm a</i> $A[z]$	8	<i>d</i>	1	<i>Cmme m</i> $.m. P_{bc}2xy[z]$
2	<i>b</i>		$\frac{1}{2}00 A[z]$	40 <i>Ama2</i>			
4	<i>c</i>	1	<i>Pmna h</i> $2.. A2xy[z]$	4	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Cmmm a</i> $A_a[z]$
31 <i>Pmn2₁</i>				4	<i>b</i>	<i>m..</i>	<i>Cmcm c</i> $\frac{1}{4}00 ..2_1 A_a F1y[z]$
2	<i>a</i>	<i>m..</i>	<i>Pmnn a</i> $..2_1 B11y[z]$	8	<i>c</i>	1	<i>Cmcm f</i> $.n. A_a2xy[z]$
4	<i>b</i>	1	<i>Pmnn e</i> $..2_1 B11y2x[z]$	41 <i>Aea2</i>			
32 <i>Pba2</i>				4	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Fmmm a</i> $F[z]$
2	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Cmmm a</i> $C[z]$	8	<i>b</i>	1	<i>Cmce f</i> $.2. F2xy[z]$
2	<i>b</i>		$0\frac{1}{2}0 C[z]$	42 <i>Fmm2</i>			
4	<i>c</i>	1	<i>Pbam g</i> $b.. C2xy[z]$	4	<i>a</i>	<i>mm2</i>	<i>Fmmm a</i> $F[z]$
33 <i>Pna2₁</i>				8	<i>b</i>	<i>..2</i>	<i>Pmmm a</i> $\frac{1}{4}\frac{1}{4}0 P_2[z]$
4	<i>a</i>	1	<i>Pnma c</i> $\bar{1}2_1. C_cA_aF1_a1xy[z]$	8	<i>c</i>	<i>m..</i>	<i>Fmmm g</i> $F2y[z]$
34 <i>Pnn2</i>				8	<i>d</i>	<i>.m.</i>	$F2x[z]$
2	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Immm a</i> $I[z]$	16	<i>e</i>	1	<i>Fmmm m</i> $F2x2y[z]$
2	<i>b</i>		$0\frac{1}{2}0 I[z]$	43 <i>Fdd2</i>			
4	<i>c</i>	1	<i>Pnnm g</i> $n.. I2xy[z]$	8	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Fddd a</i> $D[z]$
35 <i>Cmm2</i>				16	<i>b</i>	1	* <i>Fdd2 b</i> $d.. D2xy[z]$
2	<i>a</i>	<i>mm2</i>	<i>Cmmm a</i> $C[z]$	44 <i>Imm2</i>			
2	<i>b</i>		$0\frac{1}{2}0 C[z]$	2	<i>a</i>	<i>mm2</i>	<i>Immm a</i> $I[z]$
4	<i>c</i>	<i>..2</i>	<i>Pmnm a</i> $\frac{1}{4}\frac{1}{4}0 P_{ab}[z]$	2	<i>b</i>		$0\frac{1}{2}0 I[z]$
4	<i>d</i>	<i>.m.</i>	<i>Cmmm g</i> $C2x[z]$	4	<i>c</i>	<i>.m.</i>	<i>Immm e</i> $I2x[z]$
4	<i>e</i>	<i>m..</i>	$C2y[z]$	4	<i>d</i>	<i>m..</i>	$I2y[z]$
8	<i>f</i>	1	<i>Cmmm p</i> $C2x2y[z]$	8	<i>e</i>	1	<i>Immm l</i> $I2x2y[z]$
36 <i>Cmc2₁</i>				45 <i>Iba2</i>			
4	<i>a</i>	<i>m..</i>	<i>Cmcm c</i> $2_1.. C_cF1y[z]$	4	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Cmmm a</i> $C_c[z]$
8	<i>b</i>	1	<i>Cmcm g</i> $2_1.. C_cF1y2x[z]$	4	<i>b</i>		$0\frac{1}{2}0 C_c[z]$
37 <i>Ccc2</i>				8	<i>c</i>	1	<i>Ibam j</i> $b.. C_c2xy[z]$
4	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Cmmm a</i> $C_c[z]$	46 <i>Ima2</i>			
4	<i>b</i>		$0\frac{1}{2}0 C_c[z]$	4	<i>a</i>	<i>..2</i>	<i>Cmmm a</i> $A_a[z]$
4	<i>c</i>	<i>..2</i>	<i>Fmmm a</i> $\frac{1}{4}\frac{1}{4}0 F[z]$	4	<i>b</i>	<i>m..</i>	<i>Imma e</i> $\frac{1}{4}00 2.. A_a C_c1y[z]$
8	<i>d</i>	1	<i>Cccm l</i> $n.. C_c2xy[z]$	8	<i>c</i>	1	<i>Imma h</i> $2.. A_a2xy[z]$
38 <i>Amm2</i>				47 <i>Pmmm</i>			
2	<i>a</i>	<i>mm2</i>	<i>Cmmm a</i> $A[z]$	1	<i>a</i>	<i>mmm</i>	* <i>Pmmm a</i> P
2	<i>b</i>		$\frac{1}{2}00 A[z]$	1	<i>b</i>		$\frac{1}{2}00 P$
4	<i>c</i>	<i>.m.</i>	<i>Cmmm k</i> $A2x[z]$				
4	<i>d</i>	<i>m..</i>	<i>Cmmm g</i> $A2y[z]$				
4	<i>e</i>		$\frac{1}{2}00 A2y[z]$				
8	<i>f</i>	1	<i>Cmmm n</i> $A2x2y[z]$				

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.3 (continued)

1	<i>c</i>			$00\frac{1}{2}P$	4	<i>m</i>	..2	<i>Pmmm i</i>	P_c2z
1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}P$	4	<i>n</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}P_c2z$
1	<i>e</i>			$0\frac{1}{2}0P$	4	<i>o</i>			$0\frac{1}{2}0P_c2z$
1	<i>f</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P$	4	<i>p</i>			$\frac{1}{2}00P_c2z$
1	<i>g</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}P$	4	<i>q</i>	.. <i>m</i>	* <i>Pccm q</i>	2.. P_c2xy
1	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$	8	<i>r</i>	1	* <i>Pccm r</i>	c.. P_c2xy2z
2	<i>i</i>	2 <i>mm</i>	* <i>Pmnm i</i>	$P2x$					
2	<i>j</i>			$00\frac{1}{2}P2x$					
2	<i>k</i>			$0\frac{1}{2}0P2x$					
2	<i>l</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}P2x$					
2	<i>m</i>	<i>m2m</i>		$P2y$					
2	<i>n</i>			$00\frac{1}{2}P2y$					
2	<i>o</i>			$\frac{1}{2}00P2y$					
2	<i>p</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}P2y$					
2	<i>q</i>	<i>mm2</i>		$P2z$					
2	<i>r</i>			$0\frac{1}{2}0P2z$					
2	<i>s</i>			$\frac{1}{2}00P2z$					
2	<i>t</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P2z$					
4	<i>u</i>	<i>m..</i>	* <i>Pmnm u</i>	$P2y2z$					
4	<i>v</i>			$\frac{1}{2}00P2y2z$					
4	<i>w</i>	.. <i>m</i>		$P2x2z$					
4	<i>x</i>			$0\frac{1}{2}0P2x2z$					
4	<i>y</i>	.. <i>m</i>		$P2x2y$					
4	<i>z</i>			$00\frac{1}{2}P2x2y$					
8	α	1	* <i>Pmnm α</i>	$P2x2y2z$					
48 Pnnn									
2	<i>a</i>	222	<i>Immm a</i>	I					
2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}00I$					
2	<i>c</i>			$00\frac{1}{2}I$					
2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}0I$					
4	<i>e</i>	$\bar{1}$	<i>Fmmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}F$					
4	<i>f</i>			$\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}F$					
4	<i>g</i>	2..	<i>Immm e</i>	$I2x$					
4	<i>h</i>			$00\frac{1}{2}I2x$					
4	<i>i</i>	..		$I2y$					
4	<i>j</i>			$\frac{1}{2}00I2y$					
4	<i>k</i>	..2		$I2z$					
4	<i>l</i>			$0\frac{1}{2}0I2z$					
8	<i>m</i>	1	* <i>Pnnn m</i>	$n.. I2x2y2z$					
49 Pccm									
2	<i>a</i>	..2/ <i>m</i>	<i>Pmmm a</i>	P_c					
2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P_c$					
2	<i>c</i>			$0\frac{1}{2}0P_c$					
2	<i>d</i>			$\frac{1}{2}00P_c$					
2	<i>e</i>	222	<i>Pmmm a</i>	$00\frac{1}{4}P_c$					
2	<i>f</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{4}P_c$					
2	<i>g</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}P_c$					
2	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4}P_c$					
4	<i>i</i>	2..	<i>Pmmm i</i>	$00\frac{1}{4}P_c2x$					
4	<i>j</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}P_c2x$					
4	<i>k</i>	..		$00\frac{1}{4}P_c2y$					
4	<i>l</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{4}P_c2y$					
					50 Pban				
2	<i>a</i>	222	<i>Cmmm a</i>	C					
2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}00C$					
2	<i>c</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2}C$					
2	<i>d</i>			$00\frac{1}{2}C$					
4	<i>e</i>	$\bar{1}$	<i>Pmmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0P_{ab}$					
4	<i>f</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2}P_{ab}$					
4	<i>g</i>	2..	<i>Cmmm g</i>	$C2x$					
4	<i>h</i>			$00\frac{1}{2}C2x$					
4	<i>i</i>	..		$C2y$					
4	<i>j</i>			$00\frac{1}{2}C2y$					
4	<i>k</i>	..2	<i>Cmmm k</i>	$C2z$					
4	<i>l</i>			$0\frac{1}{2}0C2z$					
8	<i>m</i>	1	* <i>Pban m</i>	$b.. C2x2yz$					
					51 Pmma				
2	<i>a</i>	..2/ <i>m</i>	<i>Pmmm a</i>	P_a					
2	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}0P_a$					
2	<i>c</i>			$00\frac{1}{2}P_a$					
2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}P_a$					
2	<i>e</i>	<i>mm2</i>	* <i>Pmma e</i>	$\frac{1}{4}00..2.P_aB1z$					
2	<i>f</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{2}0..2.P_aB1z$					
4	<i>g</i>	..	<i>Pmmm i</i>	P_a2y					
4	<i>h</i>			$00\frac{1}{2}P_a2y$					
4	<i>i</i>	.. <i>m</i>	* <i>Pmma i</i>	$m.. P_a2xz$					
4	<i>j</i>			$0\frac{1}{2}0m.. P_a2xz$					
4	<i>k</i>	<i>m..</i>	* <i>Pmma k</i>	$\frac{1}{4}00..2.P_aB1z2y$					
8	<i>l</i>	1	* <i>Pmma l</i>	$m.. P_a2xz2y$					
					52 Pnna				
4	<i>a</i>	$\bar{1}$	<i>Cmmm a</i>	A_a					
4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}A_a$					
4	<i>c</i>	..2	<i>Imma e</i>	$\frac{1}{4}0\frac{1}{4}..2.B_bA_a1z$					
4	<i>d</i>	2..	<i>Cmcm c</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}..2_1B_bF1x$					
8	<i>e</i>	1	* <i>Pnna e</i>	$2.2 A_a2xyz$					
					53 Pmna				
2	<i>a</i>	2/ <i>m</i> ..	<i>Cmmm a</i>	B					
2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}00B$					
2	<i>c</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0B$					
2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}0B$					
4	<i>e</i>	2..	<i>Cmmm g</i>	$B2x$					
4	<i>f</i>			$0\frac{1}{2}0B2x$					
4	<i>g</i>	..	<i>Pmma e</i>	$\frac{1}{4}0\frac{1}{4}(2.. P_cA1y)_a$					
4	<i>h</i>	<i>m..</i>	* <i>Pmna h</i>	$..2.B2yz$					
8	<i>i</i>	1	* <i>Pmna i</i>	$..2.B2yz2x$					

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3 (continued)

54 Pcca					4	<i>c</i>	.2.	<i>Cmcm c</i>	$00\frac{1}{4} 2_1.. C_c F1y$
4	<i>a</i>	$\bar{1}$	<i>Pmmm a</i>	P_{ac}	8	<i>d</i>	1	* <i>Pbcn d</i>	$b2. C_c 2xyz$
4	<i>b</i>			$0\frac{1}{2} P_{ac}$					
4	<i>c</i>	.2.	<i>Cmme g</i>	$00\frac{1}{4} ..2 P_{ac} F1y$	61 Pbca				
4	<i>d</i>	..2	<i>Pmma e</i>	$\frac{1}{4} 00 (.2. P_a B1z)_c$	4	<i>a</i>	$\bar{1}$	<i>Fmmm a</i>	<i>F</i>
4	<i>e</i>			$\frac{1}{4} \frac{1}{2} 0 (.2. P_a B1z)_c$	4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} F$
8	<i>f</i>	1	* <i>Pcca f</i>	$..22 P_{ac} 2xyz$	8	<i>c</i>	1	* <i>Pbca c</i>	$bc. F2xyz$
55 Pbam					62 Pnma				
2	<i>a</i>	..2/m	<i>Cmmm a</i>	<i>C</i>	4	<i>a</i>	$\bar{1}$	<i>Cmmm a</i>	<i>B_b</i>
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} C$	4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} B_b$
2	<i>c</i>			$0\frac{1}{2} 0 C$	4	<i>c</i>	.m.	* <i>Pnma c</i>	$0\frac{1}{4} 0 \bar{1}.2_1 B_b A_a F1_a 1xz$
2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2} \frac{1}{2} C$	8	<i>d</i>	1	* <i>Pnma d</i>	$.ma B_b 2xyz$
4	<i>e</i>	..2	<i>Cmmm k</i>	<i>C2z</i>	63 Cmcm				
4	<i>f</i>			$0\frac{1}{2} 0 C2z$	4	<i>a</i>	2/m..	<i>Cmmm a</i>	<i>C_c</i>
4	<i>g</i>	.m	* <i>Pbam g</i>	$b.. C2xy$	4	<i>b</i>			$0\frac{1}{2} 0 C_c$
4	<i>h</i>			$00\frac{1}{2} b.. C2xy$	4	<i>c</i>	m2m	* <i>Cmcm c</i>	$00\frac{1}{4} 2_1.. C_c F1y$
8	<i>i</i>	1	* <i>Pbam i</i>	$b.. C2xy2z$	8	<i>d</i>	$\bar{1}$	<i>Pmmm a</i>	$\frac{1}{4} \frac{1}{4} P_2$
56 Pccn					8	<i>e</i>	2..	<i>Cmmm g</i>	<i>C_c 2x</i>
4	<i>a</i>	$\bar{1}$	<i>Fmmm a</i>	<i>F</i>	8	<i>f</i>	m..	* <i>Cmcm f</i>	$.n. C_c 2yz$
4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} F$	8	<i>g</i>	..m	* <i>Cmcm g</i>	$00\frac{1}{4} 2_1.. C_c F1y2x$
4	<i>c</i>	..2	<i>Pmnm a</i>	$\frac{1}{4} \frac{1}{4} 0 (2_1.. C11z)_c$	16	<i>h</i>	1	* <i>Cmcm h</i>	$.n. C_c 2yz2x$
4	<i>d</i>			$\frac{1}{4} \frac{3}{4} 0 (2_1.. C11z)_c$	64 Cmce				
8	<i>e</i>	1	* <i>Pccn e</i>	$c.2 F2xyz$	4	<i>a</i>	2/m..	<i>Fmmm a</i>	<i>F</i>
57 Pbcm					4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} F$
4	<i>a</i>	$\bar{1}$	<i>Pmmm a</i>	P_{bc}	8	<i>c</i>	$\bar{1}$	<i>Pmmm a</i>	$\frac{1}{4} \frac{1}{4} P_2$
4	<i>b</i>			$\frac{1}{2} 00 P_{bc}$	8	<i>d</i>	2..	<i>Fmmm g</i>	<i>F2x</i>
4	<i>c</i>	2..	<i>Pmma e</i>	$0\frac{1}{4} 0 (.2 P_b C1x)_c$	8	<i>e</i>	.2.	<i>Pmma e</i>	$\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4} (2.. P_c A1y)_{ab}$
4	<i>d</i>	.m	* <i>Pbcm d</i>	$00\frac{1}{4} 2.\bar{1} P_{bc} A_b C_c F1xy$	8	<i>f</i>	m..	* <i>Cmce f</i>	$.2. F2yz$
8	<i>e</i>	1	* <i>Pbcm e</i>	$2.m P_{bc} 2xyz$	16	<i>g</i>	1	* <i>Cmce g</i>	$.2. F2yz2x$
58 Pnnm					65 Cmmm				
2	<i>a</i>	..2/m	<i>Immm a</i>	<i>I</i>	2	<i>a</i>	mmm	* <i>Cmmm a</i>	<i>C</i>
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} I$	2	<i>b</i>			$\frac{1}{2} 00 C$
2	<i>c</i>			$0\frac{1}{2} 0 I$	2	<i>c</i>			$\frac{1}{2} 0\frac{1}{2} C$
2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2} \frac{1}{2} I$	2	<i>d</i>			$00\frac{1}{2} C$
4	<i>e</i>	..2	<i>Immm e</i>	<i>I2z</i>	4	<i>e</i>	..2/m	<i>Pmmm a</i>	$\frac{1}{4} \frac{1}{4} 0 P_{ab}$
4	<i>f</i>			$0\frac{1}{2} 0 I2z$	4	<i>f</i>			$\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{2} P_{ab}$
4	<i>g</i>	.m	* <i>Pnnm g</i>	$n.. I2xy$	4	<i>g</i>	2mm	* <i>Cmmm g</i>	<i>C2x</i>
8	<i>h</i>	1	* <i>Pnnm h</i>	$n.. I2xy2z$	4	<i>h</i>			$00\frac{1}{2} C2x$
59 Pmnn					4	<i>i</i>	m2m		<i>C2y</i>
2	<i>a</i>	mm2	* <i>Pmnn a</i>	$2_1.. C11z$	4	<i>j</i>			$00\frac{1}{2} C2y$
2	<i>b</i>			$0\frac{1}{2} 0 2_1.. C11z$	4	<i>k</i>	mm2	* <i>Cmmm k</i>	<i>C2z</i>
4	<i>c</i>	$\bar{1}$	<i>Pmnm a</i>	$\frac{1}{4} \frac{1}{4} 0 P_{ab}$	4	<i>l</i>			$0\frac{1}{2} 0 C2z$
4	<i>d</i>			$\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{2} P_{ab}$	8	<i>m</i>	..2	<i>Pmmm i</i>	$\frac{1}{4} \frac{1}{4} 0 P_{ab} 2z$
4	<i>e</i>	m..	* <i>Pmnn e</i>	$2_1.. C11z2y$	8	<i>n</i>	m..	* <i>Cmmm n</i>	<i>C2y2z</i>
4	<i>f</i>	.m.		$.2_1. C11z2x$	8	<i>o</i>	.m.		<i>C2x2z</i>
8	<i>g</i>	1	* <i>Pmnn g</i>	$\frac{1}{4} \frac{1}{4} 0 mm. P_{ab} 2xyz$	8	<i>p</i>	..m	* <i>Cmmm p</i>	<i>C2x2y</i>
60 Pbcn					8	<i>q</i>			$00\frac{1}{2} C2x2y$
4	<i>a</i>	$\bar{1}$	<i>Cmmm a</i>	<i>C_c</i>	16	<i>r</i>	1	* <i>Cmmm r</i>	<i>C2x2y2z</i>
4	<i>b</i>			$0\frac{1}{2} 0 C_c$					

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.3 (continued)

66 Cccm				16	<i>k</i>	.2.		$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2 2y$
4	<i>a</i>	222	<i>Cmmm a</i>	$00\frac{1}{4} C_c$	16	<i>l</i>	2..	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2 2x$
4	<i>b</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} C_c$	16	<i>m</i>	<i>m</i> ..	* <i>Fmmm m</i> $F2y2z$
4	<i>c</i>	..2/ <i>m</i>	<i>Cmmm a</i>	C_c	16	<i>n</i>	. <i>m</i> .	$F2x2z$
4	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}0 C_c$	16	<i>o</i>	.. <i>m</i>	$F2x2y$
4	<i>e</i>	..2/ <i>m</i>	<i>Fmmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0 F$	32	<i>p</i>	1	* <i>Fmmm p</i> $F2x2y2z$
4	<i>f</i>			$\frac{1}{4}\frac{3}{4}0 F$				
8	<i>g</i>	2..	<i>Cmmm g</i>	$00\frac{1}{4} C_c 2x$	70 Fddd			
8	<i>h</i>	.2.		$00\frac{1}{4} C_c 2y$	8	<i>a</i>	222	* <i>Fddd a</i> D
8	<i>i</i>	..2	<i>Cmmm k</i>	$C_c 2z$	8	<i>b</i>		$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} D$
8	<i>j</i>			$0\frac{1}{2}0 C_c 2z$	16	<i>c</i>	$\bar{1}$	* <i>Fddd c</i> T
8	<i>k</i>	..2	<i>Fmmm g</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0 F2z$	16	<i>d</i>		$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} T$
8	<i>l</i>	.. <i>m</i>	* <i>Cccm l</i>	<i>c</i> .. $C_c 2xy$	16	<i>e</i>	2..	* <i>Fddd e</i> $D2x$
16	<i>m</i>	1	* <i>Cccm m</i>	<i>c</i> .. $C_c 2xy 2z$	16	<i>f</i>	.2.	$D2y$
					16	<i>g</i>	..2	$D2z$
					32	<i>h</i>	1	* <i>Fddd h</i> $d.. D2x2yz$
67 Cmme								
4	<i>a</i>	222	<i>Pmmm a</i>	$\frac{1}{4}00 P_{ab}$	71 Immm			
4	<i>b</i>			$\frac{1}{4}0\frac{1}{2} P_{ab}$	2	<i>a</i>	<i>mmm</i>	* <i>Immm a</i> I
4	<i>c</i>	2/ <i>m</i> ..	<i>Pmmm a</i>	P_{ab}	2	<i>b</i>		$0\frac{1}{2}\frac{1}{2} I$
4	<i>d</i>			$00\frac{1}{2} P_{ab}$	2	<i>c</i>		$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 I$
4	<i>e</i>	.2/ <i>m</i> .		$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0 P_{ab}$	2	<i>d</i>		$\frac{1}{2}0\frac{1}{2} I$
4	<i>f</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2} P_{ab}$	4	<i>e</i>	2 <i>mm</i>	* <i>Immm e</i> $I2x$
4	<i>g</i>	<i>mm</i> 2	* <i>Cmme g</i>	$0\frac{1}{4}0 2.. P_{ab} F1z$	4	<i>f</i>		$0\frac{1}{2}0 I2x$
8	<i>h</i>	2..	<i>Pmmm i</i>	$P_{ab} 2x$	4	<i>g</i>	<i>m</i> 2 <i>m</i>	$I2y$
8	<i>i</i>			$00\frac{1}{2} P_{ab} 2x$	4	<i>h</i>		$00\frac{1}{2} I2y$
8	<i>j</i>	.2.		$\frac{1}{4}00 P_{ab} 2y$	4	<i>i</i>	<i>mm</i> 2	$I2z$
8	<i>k</i>			$\frac{1}{4}0\frac{1}{2} P_{ab} 2y$	4	<i>j</i>		$\frac{1}{2}00 I2z$
8	<i>l</i>	..2	<i>Pmmm i</i>	$\frac{1}{4}00 P_{ab} 2z$	8	<i>k</i>	$\bar{1}$	<i>Pmmm a</i> $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$
8	<i>m</i>	<i>m</i> ..	* <i>Cmme m</i>	. <i>m</i> . $P_{ab} 2yz$	8	<i>l</i>	<i>m</i> ..	* <i>Immm l</i> $I2y2z$
8	<i>n</i>	. <i>m</i> .		$0\frac{1}{4}0 m.. P_{ab} 2xz$	8	<i>m</i>	. <i>m</i> .	$I2x2z$
16	<i>o</i>	1	* <i>Cmme o</i>	. <i>m</i> . $P_{ab} 2yz 2x$	8	<i>n</i>	.. <i>m</i>	$I2x2y$
					16	<i>o</i>	1	* <i>Immm o</i> $I2x2y2z$
68 Ccce								
4	<i>a</i>	222	<i>Fmmm a</i>	F	72 Ibam			
4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} F$	4	<i>a</i>	222	<i>Cmmm a</i> $00\frac{1}{4} C_c$
8	<i>c</i>	$\bar{1}$	<i>Pmmm a</i>	$\frac{1}{4}0\frac{1}{4} P_2$	4	<i>b</i>		$\frac{1}{2}0\frac{1}{4} C_c$
8	<i>d</i>			$0\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$	4	<i>c</i>	..2/ <i>m</i>	<i>Cmmm a</i> C_c
8	<i>e</i>	2..	<i>Fmmm g</i>	$F2x$	4	<i>d</i>		$\frac{1}{2}00 C_c$
8	<i>f</i>	.2.		$F2y$	8	<i>e</i>	$\bar{1}$	<i>Pmmm a</i> $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$
8	<i>g</i>	..2	<i>Fmmm g</i>	$F2z$	8	<i>f</i>	2..	<i>Cmmm g</i> $00\frac{1}{4} C_c 2x$
8	<i>h</i>	..2	<i>Cmme g</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0 (2.. P_{ab} F1z)_c$	8	<i>g</i>	.2.	$00\frac{1}{4} C_c 2y$
16	<i>i</i>	1	* <i>Ccce i</i>	<i>c</i> .. $F2x2yz$	8	<i>h</i>	..2	<i>Cmmm k</i> $C_c 2z$
					8	<i>i</i>		$0\frac{1}{2}0 C_c 2z$
69 Fmmm								
4	<i>a</i>	<i>mmm</i>	* <i>Fmmm a</i>	F	8	<i>j</i>	.. <i>m</i>	* <i>Ibam j</i> <i>c</i> .. $C_c 2xy$
4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} F$	16	<i>k</i>	1	* <i>Ibam k</i> <i>c</i> .. $C_c 2xy 2z$
8	<i>c</i>	2/ <i>m</i> ..	<i>Pmmm a</i>	$0\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$	73 Ibca			
8	<i>d</i>	.2/ <i>m</i> .		$\frac{1}{4}0\frac{1}{4} P_2$	8	<i>a</i>	$\bar{1}$	<i>Pmmm a</i> P_2
8	<i>e</i>	..2/ <i>m</i>		$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0 P_2$	8	<i>b</i>		$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$
8	<i>f</i>	222	<i>Pmmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$	8	<i>c</i>	2..	<i>Cmme g</i> $00\frac{1}{4} (.2. P_{bc} F1x)_a$
8	<i>g</i>	2 <i>mm</i>	* <i>Fmmm g</i>	$F2x$	8	<i>d</i>	.2.	$\frac{1}{4}00 (.2. P_{ac} F1y)_b$
8	<i>h</i>	<i>m</i> 2 <i>m</i>		$F2y$	8	<i>e</i>	..2	$0\frac{1}{4}0 (2.. P_{ab} F1z)_c$
8	<i>i</i>	<i>mm</i> 2		$F2z$	16	<i>f</i>	1	* <i>Ibca f</i> $22. P_2 2xyz$
16	<i>j</i>	..2	<i>Pmmm i</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2 2z$				

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3 (continued)

74 Imma				4	<i>e</i>	2..	<i>I4/mmm e</i>	<i>I2z</i>	
4	<i>a</i>	2/m..	<i>Cmnm a</i>	B_b	4	<i>f</i>		$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} I2z$	
4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} B_b$	8	<i>g</i>	1	* $I\bar{4} g$	<i>I4xyz</i>
4	<i>c</i>	.2/m.		$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} A_a$	83 P4/m				
4	<i>d</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4} A_a$	1	<i>a</i>	4/m..	<i>P4/mmm a</i>	<i>P</i>
4	<i>e</i>	<i>mm2</i>	* <i>Imma e</i>	$0\frac{1}{4}0 .2. B_b A_a 1z$	1	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} P$
8	<i>f</i>	2..	<i>Cmmm g</i>	$B_b 2x$	1	<i>c</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P$
8	<i>g</i>	.2.		$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} A_a 2y$	1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$
8	<i>h</i>	<i>m..</i>	* <i>Imma h</i>	.2. $B_b 2yz$	2	<i>e</i>	2/m..	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0 C$
8	<i>i</i>	. <i>m.</i>		$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} 2.. A_a 2xz$	2	<i>f</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2} C$
16	<i>j</i>	1	* <i>Imma j</i>	.2. $B_b 2yz 2x$	2	<i>g</i>	4..	<i>P4/mmm g</i>	<i>P2z</i>
75 P4				2	<i>h</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P2z$
1	<i>a</i>	4..	<i>P4/mmm a</i>	<i>P[z]</i>	4	<i>i</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	$0\frac{1}{2}0 C2z$
1	<i>b</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P[z]$	4	<i>j</i>	<i>m..</i>	* <i>P4/m j</i>	<i>P4xy</i>
2	<i>c</i>	2..	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0 C[z]$	4	<i>k</i>			$00\frac{1}{2} P4xy$
4	<i>d</i>	1	<i>P4/m j</i>	<i>P4xy[z]</i>	8	<i>l</i>	1	* <i>P4/m l</i>	<i>P4xy2z</i>
76 P4₁				84 P4₂/m					
4	<i>a</i>	1	* <i>P4₃ a</i>	$4_{1..} P_{cc} {}^v DI_c 1xy[z]$	2	<i>a</i>	2/m..	<i>P4/mmm a</i>	<i>P_c</i>
77 P4₂				2	<i>b</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P_c$
2	<i>a</i>	2..	<i>P4/mmm a</i>	<i>P_c[z]</i>	2	<i>c</i>	2/m..	<i>I4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0 I$
2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P_c[z]$	2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2} I$
2	<i>c</i>	2..	<i>I4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0 I[z]$	2	<i>e</i>	$\bar{4}..$	<i>P4/mmm a</i>	$00\frac{1}{4} P_c$
4	<i>d</i>	1	<i>P4₂/m j</i>	$\bar{4}.. P_c 2xy[z]$	2	<i>f</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4} P_c$
78 P4₃				4	<i>g</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>		<i>P_c2z</i>
4	<i>a</i>		* <i>P4₃ a</i>	$4_{3..} P_{cc} {}^v DI_c 1xy[z]$	4	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P_c 2z$
79 I4				4	<i>i</i>	2..	<i>I4/mmm e</i>		$0\frac{1}{2}0 I2z$
2	<i>a</i>	4..	<i>I4/mmm a</i>	<i>I[z]</i>	4	<i>j</i>	<i>m..</i>	* <i>P4₂/m j</i>	$\bar{4}.. P_c 2xy$
4	<i>b</i>	2..	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c[z]$	8	<i>k</i>	1	* <i>P4₂/m k</i>	$\bar{4}.. P_c 2xy 2z$
8	<i>c</i>	1	<i>I4/m h</i>	<i>I4xy[z]</i>	85 P4/n				
80 I4₁				2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	<i>P4/mmm a</i>		<i>C</i>
4	<i>a</i>	2..	<i>I4₁/amd a</i>	${}^v D[z]$	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} C$
8	<i>b</i>	1	* <i>I4₁ b</i>	$4_{1..} {}^v D 2xy[z]$	2	<i>c</i>	4..	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0 ..2 CI1z$
81 P$\bar{4}$				4	<i>d</i>	$\bar{1}$	<i>P4/mmm a</i>		$\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_{ab}$
1	<i>a</i>	$\bar{4}..$	<i>P4/mmm a</i>	<i>P</i>	4	<i>e</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2} P_{ab}$
1	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} P$	4	<i>f</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>C2z</i>
1	<i>c</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P$	8	<i>g</i>	1	* <i>P4/n g</i>	$\bar{1} C4xyz$
1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$	86 P4₂/n				
2	<i>e</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>P2z</i>	2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>
2	<i>f</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P2z$	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} I$
2	<i>g</i>	2..	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0 ..2 CI1z$	4	<i>c</i>	$\bar{1}$	<i>I4/mmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} F$
4	<i>h</i>	1	* <i>P$\bar{4}$ h</i>	<i>P4xyz</i>	4	<i>d</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4} F$
82 I$\bar{4}$				4	<i>e</i>	2..	<i>P4/nmm c</i>		$0\frac{1}{2}0 (..2 CI1z)_c$
2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>	4	<i>f</i>	2..	<i>I4/mmm e</i>	<i>I2z</i>
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} I$	8	<i>g</i>	1	* <i>P4₂/n g</i>	<i>n.. I4xyz</i>
2	<i>c</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} I$	87 I4/m				
2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}\frac{3}{4} I$	2	<i>a</i>	4/m..	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>
83 P4/m				2	<i>b</i>				$00\frac{1}{2} I$
1	<i>a</i>	4/m..	<i>P4/mmm a</i>	<i>P</i>	4	<i>c</i>	2/m..	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c$
1	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} P$	4	<i>d</i>	$\bar{4}..$	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} C_c$
1	<i>c</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P$					
1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$					
2	<i>e</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>P2z</i>					
2	<i>f</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P2z$					
2	<i>g</i>	2..	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0 ..2 CI1z$					
4	<i>h</i>	1	* <i>P$\bar{4}$ h</i>	<i>P4xyz</i>					
82 I$\bar{4}$				85 P4/n					
2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>	2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	<i>P4/mmm a</i>	<i>C</i>
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} I$	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} C$
2	<i>c</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} I$	2	<i>c</i>	4..	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0 ..2 CI1z$
2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}\frac{3}{4} I$	4	<i>d</i>	$\bar{1}$	<i>P4/mmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_{ab}$
83 P4/m				4	<i>e</i>				$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2} P_{ab}$
1	<i>a</i>	4/m..	<i>P4/mmm a</i>	<i>P</i>	4	<i>f</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>C2z</i>
1	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} P$	8	<i>g</i>	1	* <i>P4/n g</i>	$\bar{1} C4xyz$
1	<i>c</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P$	86 P4₂/n				
1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$	2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>
2	<i>e</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>P2z</i>	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} I$
2	<i>f</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P2z$	4	<i>c</i>	$\bar{1}$	<i>I4/mmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} F$
2	<i>g</i>	2..	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0 ..2 CI1z$	4	<i>d</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4} F$
4	<i>h</i>	1	* <i>P$\bar{4}$ h</i>	<i>P4xyz</i>	4	<i>e</i>	2..	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0 (..2 CI1z)_c$
82 I$\bar{4}$				4	<i>f</i>	2..	<i>I4/mmm e</i>		<i>I2z</i>
2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>	8	<i>g</i>	1	* <i>P4₂/n g</i>	<i>n.. I4xyz</i>
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} I$	87 I4/m				
2	<i>c</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} I$	2	<i>a</i>	4/m..	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>
2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}\frac{3}{4} I$	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} I$
83 P4/m				4	<i>c</i>	2/m..	<i>P4/mmm a</i>		$0\frac{1}{2}0 C_c$
1	<i>a</i>	4/m..	<i>P4/mmm a</i>	<i>P</i>	4	<i>d</i>	$\bar{4}..$	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} C_c$
1	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} P$					
1	<i>c</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P$					
1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$					
2	<i>e</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>P2z</i>					
2	<i>f</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P2z$					
2	<i>g</i>	2..	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0 ..2 CI1z$					
4	<i>h</i>	1	* <i>P$\bar{4}$ h</i>	<i>P4xyz</i>					

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.3 (continued)

4	<i>e</i>	4..	<i>I4/mmm e</i>	<i>I2z</i>	2	<i>c</i>	222.	<i>I4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0 I$
8	<i>f</i>	$\bar{1}$	<i>P4/mmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$	2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2} I$
8	<i>g</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c 2z$	2	<i>e</i>	2.22	<i>P4/mmm a</i>	$00\frac{1}{4} P_c$
8	<i>h</i>	<i>m</i> ..	* <i>I4/m h</i>	<i>I4xy</i>	2	<i>f</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4} P_c$
16	<i>i</i>	1	* <i>I4/m i</i>	<i>I4xy2z</i>	4	<i>g</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>P_c 2z</i>
88 <i>I4₁/a</i>									
4	<i>a</i>	$\bar{4}$..	<i>I4₁/amd a</i>	${}^v D$	4	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P_c 2z$
4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} {}^v D$	4	<i>i</i>	2..	<i>I4/mmm e</i>	$0\frac{1}{2}0 I2z$
8	<i>c</i>	$\bar{1}$	<i>I4₁/amd c</i>	${}^v T$	4	<i>j</i>	.2.	<i>P4₂/mmc j</i>	$..2 P_c 2x$
8	<i>d</i>			$00\frac{1}{2} {}^v T$	4	<i>k</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} ..2 P_c 2x$
8	<i>e</i>	2..	<i>I4₁/amd e</i>	${}^v D2z$	4	<i>l</i>			$00\frac{1}{2} ..2 P_c 2x$
16	<i>f</i>	1	* <i>I4₁/a f</i>	$a.. {}^v D4xyz$	4	<i>m</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 ..2 P_c 2x$
89 <i>P422</i>									
1	<i>a</i>	422	<i>P4/mmm a</i>	<i>P</i>	94 <i>P4₂2₁2</i>				
1	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} P$	2	<i>a</i>	2.22	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>
1	<i>c</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P$	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} I$
1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$	4	<i>c</i>	2..	<i>I4/mmm e</i>	<i>I2z</i>
2	<i>e</i>	222.	<i>P4/mmm a</i>	$\frac{1}{2}00 C$	4	<i>d</i>	2..	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0 (..2 C11z)_c$
2	<i>f</i>			$\frac{1}{2}0\frac{1}{2} C$	4	<i>e</i>	..2	<i>P4₂/mnm f</i>	$.n. I2xx$
2	<i>g</i>	4..	<i>P4/mmm g</i>	<i>P2z</i>	4	<i>f</i>			$00\frac{1}{2}.n. I2xx$
2	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P2z$	8	<i>g</i>	1	* <i>P4₂2₁2 g</i>	$.2_1. I2xx2yz$
4	<i>i</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	$0\frac{1}{2}0 C2z$	95 <i>P4₃22</i>				
4	<i>j</i>	..2	<i>P4/mmm j</i>	<i>P4xx</i>	4	<i>a</i>	.2.	* <i>P4₃22 a</i>	$00\frac{1}{4} 4_3.. P_{cc} I_c 1x$
4	<i>k</i>			$00\frac{1}{2} P4xx$	4	<i>b</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4} 4_3.. P_{cc} I_c 1x$
4	<i>l</i>	.2.	<i>P4/mmm l</i>	<i>P4x</i>	4	<i>c</i>	..2	* <i>P4₃22 c</i>	$00\frac{5}{8} 4_3.. P_{cc} {}^v D1xx$
4	<i>m</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P4x$	8	<i>d</i>	1	* <i>P4₃22 d</i>	$00\frac{1}{4} 4_3.. P_{cc} I_c 1x2yz$
4	<i>n</i>			$00\frac{1}{2} P4x$	96 <i>P4₃2₁2</i>				
4	<i>o</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P4x$	4	<i>a</i>	..2	* <i>P4₃2₁2 a</i>	$4_3.. I_c {}^v D1xx$
8	<i>p</i>	1	* <i>P422 p</i>	<i>P4x2yz</i>	8	<i>b</i>	1	* <i>P4₃2₁2 b</i>	$4_3.. I_c {}^v D1xx2yz$
90 <i>P42₁2</i>									
2	<i>a</i>	2.22	<i>P4/mmm a</i>	<i>C</i>	97 <i>I422</i>				
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} C$	2	<i>a</i>	422	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>
2	<i>c</i>	4..	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0 ..2 C11z$	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} I$
4	<i>d</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>C2z</i>	4	<i>c</i>	222.	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c$
4	<i>e</i>	..2	<i>P4/mbm g</i>	$.b. C2xx$	4	<i>d</i>	2.22	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} C_c$
4	<i>f</i>			$00\frac{1}{2}.b. C2xx$	4	<i>e</i>	4..	<i>I4/mmm e</i>	<i>I2z</i>
8	<i>g</i>	1	* <i>P42₁2 g</i>	$.2_1. C2xx2yz$	8	<i>f</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c 2z$
91 <i>P4₁22</i>									
4	<i>a</i>	.2.	* <i>P4₃22 a</i>	$00\frac{3}{4} 4_1.. P_{cc} I_c 1x$	8	<i>g</i>	..2	<i>I4/mmm h</i>	<i>I4xx</i>
4	<i>b</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{3}{4} 4_1.. P_{cc} I_c 1x$	8	<i>h</i>	.2.	<i>I4/mmm i</i>	<i>I4x</i>
4	<i>c</i>	..2	* <i>P4₃22 c</i>	$00\frac{3}{8} 4_1.. P_{cc} {}^v D1xx$	8	<i>i</i>			$00\frac{1}{2} I4x$
8	<i>d</i>	1	* <i>P4₃22 d</i>	$00\frac{3}{4} 4_1.. P_{cc} I_c 1x2yz$	8	<i>j</i>	..2	<i>I4/mcm h</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}.b. C_c 2xx$
92 <i>P4₁2₁2</i>									
4	<i>a</i>	..2	* <i>P4₃2₁2 a</i>	$4_1.. I_c {}^v D1xx$	16	<i>k</i>	1	* <i>I422 k</i>	<i>I4x2yz</i>
8	<i>b</i>	1	* <i>P4₃2₁2 b</i>	$4_1.. I_c {}^v D1xx2yz$	98 <i>I4₁22</i>				
93 <i>P4₂22</i>									
2	<i>a</i>	222.	<i>P4/mmm a</i>	<i>P_c</i>	4	<i>a</i>	2.22	<i>I4₁/amd a</i>	${}^v D$
2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P_c$	4	<i>b</i>			$00\frac{1}{2} {}^v D$
94 <i>P4₂22</i>									
8	<i>c</i>	2..	<i>I4₁/amd e</i>	${}^v D2z$	8	<i>c</i>	2..	<i>I4₁22 d</i>	$.2. {}^v D2xx$
8	<i>d</i>	..2	* <i>I4₁22 d</i>	$.2. {}^v D2xx$	8	<i>d</i>	..2		$.2. {}^v D2x\bar{x}$
8	<i>e</i>			$.2. {}^v D2x\bar{x}$		<i>e</i>			

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3 (continued)

8	<i>f</i>	.2.	*	$I4_122$	<i>f</i>	$\cdot 22 \nu TC_{cc}1x$			
16	<i>g</i>	1	*	$I4_122$	<i>g</i>	$\cdot 2. \nu D2xx2yz$			
99 $P4mm$									
1	<i>a</i>	4 <i>mm</i>		$P4/mmm$	<i>a</i>	$P[z]$			
1	<i>b</i>					$\frac{1}{2}0 P[z]$			
2	<i>c</i>	2 <i>mm.</i>		$P4/mmm$	<i>a</i>	$\frac{1}{2}00 C[z]$			
4	<i>d</i>	$\cdot m$		$P4/mmm$	<i>j</i>	$P4xx[z]$			
4	<i>e</i>	$\cdot m$.		$P4/mmm$	<i>l</i>	$P4x[z]$			
4	<i>f</i>					$\frac{1}{2}0 P4x[z]$			
8	<i>g</i>	1		$P4/mmm$	<i>p</i>	$P4x2y[z]$			
100 $P4bm$									
2	<i>a</i>	4 \cdot .		$P4/mmm$	<i>a</i>	$C[z]$			
2	<i>b</i>	2 <i>mm</i>		$P4/mmm$	<i>a</i>	$\frac{1}{2}00 C[z]$			
4	<i>c</i>	$\cdot m$		$P4/mbm$	<i>g</i>	$0\frac{1}{2}0 \cdot b. C2xx[z]$			
8	<i>d</i>	1		$P4/mbm$	<i>i</i>	$\cdot m C4xy[z]$			
101 $P4_2cm$									
2	<i>a</i>	2 <i>mm</i>		$P4/mmm$	<i>a</i>	$P_c[z]$			
2	<i>b</i>					$\frac{1}{2}0 P_c[z]$			
4	<i>c</i>	2 \cdot .		$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c[z]$			
4	<i>d</i>	$\cdot m$		$P4_2/mcm$	<i>i</i>	$\cdot 2. P_c2xx[z]$			
8	<i>e</i>	1		$P4_2/mcm$	<i>n</i>	$\cdot 2. P_c2xx2y[z]$			
102 $P4_2nm$									
2	<i>a</i>	2 <i>mm</i>		$I4/mmm$	<i>a</i>	$I[z]$			
4	<i>b</i>	2 \cdot .		$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c[z]$			
4	<i>c</i>	$\cdot m$		$P4_2/mnm$	<i>f</i>	$\cdot n. I2xx[z]$			
8	<i>d</i>	1		$P4_2/mnm$	<i>i</i>	$\cdot n. I2xx2y[z]$			
103 $P4cc$									
2	<i>a</i>	4 \cdot .		$P4/mmm$	<i>a</i>	$P_c[z]$			
2	<i>b</i>					$\frac{1}{2}0 P_c[z]$			
4	<i>c</i>	2 \cdot .		$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c[z]$			
8	<i>d</i>	1		$P4/mcc$	<i>m</i>	$\cdot c. P_c4xy[z]$			
104 $P4nc$									
2	<i>a</i>	4 \cdot .		$I4/mmm$	<i>a</i>	$I[z]$			
4	<i>b</i>	2 \cdot .		$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c[z]$			
8	<i>c</i>	1		$P4/mnc$	<i>h</i>	$\cdot 2 I4xy[z]$			
105 $P4_2mc$									
2	<i>a</i>	2 <i>mm.</i>		$P4/mmm$	<i>a</i>	$P_c[z]$			
2	<i>b</i>					$\frac{1}{2}0 P_c[z]$			
2	<i>c</i>	2 <i>mm.</i>		$I4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0 I[z]$			
4	<i>d</i>	$\cdot m$.		$P4_2/mmc$	<i>j</i>	$\cdot 2 P_c2x[z]$			
4	<i>e</i>					$\frac{1}{2}0 \cdot 2 P_c2x[z]$			
8	<i>f</i>	1		$P4_2/mmc$	<i>q</i>	$\cdot 2 P_c2x2y[z]$			
106 $P4_2bc$									
4	<i>a</i>	2 \cdot .		$P4/mmm$	<i>a</i>	$C_c[z]$			
4	<i>b</i>	2 \cdot .		$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c[z]$			
8	<i>c</i>	1		$P4_2/mbc$	<i>h</i>	$\cdot b2 C_c2xy[z]$			
107 $I4mm$									
2	<i>a</i>	4 <i>mm</i>		$I4/mmm$	<i>a</i>	$I[z]$			
4	<i>b</i>	2 <i>mm.</i>		$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c[z]$			
8	<i>c</i>	$\cdot m$		$I4/mmm$	<i>h</i>	$I4xx[z]$			
8	<i>d</i>	$\cdot m$.		$I4/mmm$	<i>i</i>	$I4x[z]$			
16	<i>e</i>	1		$I4/mmm$	<i>l</i>	$I4x2y[z]$			
108 $I4cm$									
4	<i>a</i>	4 \cdot .		$P4/mmm$	<i>a</i>	$C_c[z]$			
4	<i>b</i>	2 <i>mm</i>		$P4/mmm$	<i>a</i>	$\frac{1}{2}00 C_c[z]$			
8	<i>c</i>	$\cdot m$		$I4/mcm$	<i>h</i>	$\frac{1}{2}00 \cdot b. C_c2xx[z]$			
16	<i>d</i>	1		$I4/mcm$	<i>k</i>	$\cdot m C_c4xy[z]$			
109 $I4_1md$									
4	<i>a</i>	2 <i>mm.</i>		$I4_1/amd$	<i>a</i>	$\nu D[z]$			
8	<i>b</i>	$\cdot m$.		*	$I4_1md$	<i>b</i>	$\cdot \cdot d \nu D2x[z]$		
16	<i>c</i>	1		*	$I4_1md$	<i>c</i>	$\cdot \cdot d \nu D2x2y[z]$		
110 $I4_1cd$									
8	<i>a</i>	2 \cdot .		$I4/mmm$	<i>a</i>	$F_c[z]$			
16	<i>b</i>	1		*	$I4_1cd$	<i>b</i>	$\cdot bd F_c2xy[z]$		
111 $P\bar{4}2m$									
1	<i>a</i>	$\bar{4}2m$		$P4/mmm$	<i>a</i>	P			
1	<i>b</i>					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$			
1	<i>c</i>					$00\frac{1}{2} P$			
1	<i>d</i>					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P$			
2	<i>e</i>	222.		$P4/mmm$	<i>a</i>	$\frac{1}{2}00 C$			
2	<i>f</i>					$\frac{1}{2}0\frac{1}{2} C$			
2	<i>g</i>	2 <i>mm</i>		$P4/mmm$	<i>g</i>	$P2z$			
2	<i>h</i>					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P2z$			
4	<i>i</i>	2.		$P4/mmm$	<i>l</i>	$P4x$			
4	<i>j</i>					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P4x$			
4	<i>k</i>					$00\frac{1}{2} P4x$			
4	<i>l</i>					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P4x$			
4	<i>m</i>	2 \cdot .		$P4/mmm$	<i>g</i>	$0\frac{1}{2}0 C2z$			
4	<i>n</i>	$\cdot m$		*	$P\bar{4}2m$	<i>n</i>	$P4xxz$		
8	<i>o</i>	1		*	$P\bar{4}2m$	<i>o</i>	$P4xxz2y$		
112 $P\bar{4}2c$									
2	<i>a</i>	222.		$P4/mmm$	<i>a</i>	$00\frac{1}{4} P_c$			
2	<i>c</i>					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4} P_c$			
2	<i>b</i>	222.		$I4/mmm$	<i>a</i>	$\frac{1}{2}0\frac{1}{4} I$			
2	<i>d</i>					$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} I$			
2	<i>e</i>	$\bar{4}\cdot$.		$P4/mmm$	<i>a</i>	P_c			
2	<i>f</i>					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P_c$			
4	<i>g</i>	2.		$P4_2/mmc$	<i>j</i>	$00\frac{1}{4} \cdot 2 P_c2x$			
4	<i>h</i>					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{3}{4} \cdot 2 P_c2x$			
4	<i>i</i>					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4} \cdot 2 P_c2x$			
4	<i>j</i>					$00\frac{3}{4} \cdot 2 P_c2x$			
4	<i>k</i>	2 \cdot .		$P4/mmm$	<i>g</i>	P_c2z			
4	<i>l</i>					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 P_c2z$			
4	<i>m</i>	2 \cdot .		$I4/mmm$	<i>e</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} I2z$			
8	<i>n</i>	1		*	$P\bar{4}2c$	<i>n</i>	$\cdot 2. P_c4xyz$		

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.3 (continued)

113 $P\bar{4}2_1m$

2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	$P4/mmm$	<i>a</i>	<i>C</i>
2	<i>b</i>				$00\frac{1}{2}C$
2	<i>c</i>	$2.mm$	$P4/nmm$	<i>c</i>	$0\frac{1}{2}0..2CI1z$
4	<i>d</i>	$2..$	$P4/mmm$	<i>g</i>	$C2z$
4	<i>e</i>	$..m$	*	$P\bar{4}2_1m$	<i>e</i> $0\frac{1}{2}0..2_1.CI1z2xx$
8	<i>f</i>	1	*	$P\bar{4}2_1m$	<i>f</i> $..mC4xyz$

114 $P\bar{4}2_1c$

2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	$I4/mmm$	<i>a</i>	<i>I</i>
2	<i>b</i>				$00\frac{1}{2}I$
4	<i>c</i>	$2..$	$I4/mmm$	<i>e</i>	$I2z$
4	<i>d</i>	$2..$	$P4/nmm$	<i>c</i>	$0\frac{1}{2}0(..2CI1z)_c$
8	<i>e</i>	1	*	$P\bar{4}2_1c$	<i>e</i> $..cI4xyz$

115 $P\bar{4}m2$

1	<i>a</i>	$\bar{4}m2$	$P4/mmm$	<i>a</i>	<i>P</i>
1	<i>b</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P$
1	<i>c</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}P$
1	<i>d</i>				$00\frac{1}{2}P$
2	<i>e</i>	$2mm.$	$P4/mmm$	<i>g</i>	$P2z$
2	<i>f</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P2z$
2	<i>g</i>	$2mm.$	$P4/nmm$	<i>c</i>	$0\frac{1}{2}0..2CI1z$
4	<i>h</i>	$..2$	$P4/mmm$	<i>j</i>	$P4xx$
4	<i>i</i>				$00\frac{1}{2}P4xx$
4	<i>j</i>	$..m$	*	$P\bar{4}m2$	<i>j</i> $P4xz$
4	<i>k</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P4xz$
8	<i>l</i>	1	*	$P\bar{4}m2$	<i>l</i> $P4xz2y$

116 $P\bar{4}c2$

2	<i>a</i>	2.22	$P4/mmm$	<i>a</i>	$00\frac{1}{4}P_c$
2	<i>b</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4}P_c$
2	<i>c</i>	$\bar{4}..$	$P4/mmm$	<i>a</i>	P_c
2	<i>d</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P_c$
4	<i>e</i>	$..2$	$P4_2/mcm$	<i>i</i>	$00\frac{1}{4}..2.P_c2xx$
4	<i>f</i>				$00\frac{3}{4}..2.P_c2xx$
4	<i>g</i>	$2..$	$P4/mmm$	<i>g</i>	P_c2z
4	<i>h</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P_c2z$
4	<i>i</i>	$2..$	$P4/nmm$	<i>c</i>	$0\frac{1}{2}0(..2CI1z)_c$
8	<i>j</i>	1	*	$P\bar{4}c2$	<i>j</i> $..2P_c4xyz$

117 $P\bar{4}b2$

2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	$P4/mmm$	<i>a</i>	<i>C</i>
2	<i>b</i>				$00\frac{1}{2}C$
2	<i>c</i>	2.22	$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0C$
2	<i>d</i>				$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}C$
4	<i>e</i>	$2..$	$P4/mmm$	<i>g</i>	$C2z$
4	<i>f</i>	$2..$	$P4/mmm$	<i>g</i>	$0\frac{1}{2}0C2z$
4	<i>g</i>	$..2$	$P4/mbm$	<i>g</i>	$0\frac{1}{2}0..b.C2xx$
4	<i>h</i>				$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}..b.C2xx$
8	<i>i</i>	1	*	$P\bar{4}b2$	<i>i</i> $..2C4xyz$

118 $P\bar{4}n2$

2	<i>a</i>	$\bar{4}..$	$I4/mmm$	<i>a</i>	<i>I</i>
2	<i>b</i>				$00\frac{1}{2}I$
2	<i>c</i>	2.22	$I4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}I$
2	<i>d</i>				$0\frac{1}{2}\frac{3}{4}I$
4	<i>e</i>	$2..$	$I4/mmm$	<i>e</i>	$I2z$
4	<i>f</i>	$..2$	$P4_2/mnm$	<i>f</i>	$\frac{1}{2}0\frac{3}{4}..n.I2xx$
4	<i>g</i>				$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}..n.I2xx$
4	<i>h</i>	$2..$	$I4/mmm$	<i>e</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}I2z$
8	<i>i</i>	1	*	$P\bar{4}n2$	<i>i</i> $..2I4xyz$

119 $I\bar{4}m2$

2	<i>a</i>	$\bar{4}m2$	$I4/mmm$	<i>a</i>	<i>I</i>
2	<i>b</i>				$00\frac{1}{2}I$
2	<i>c</i>				$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}I$
2	<i>d</i>				$0\frac{1}{2}\frac{3}{4}I$
4	<i>e</i>	$2mm.$	$I4/mmm$	<i>e</i>	$I2z$
4	<i>f</i>				$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}I2z$
8	<i>g</i>	$..2$	$I4/mmm$	<i>h</i>	$I4xx$
8	<i>h</i>				$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}I4xx$
8	<i>i</i>	$..m$	*	$I\bar{4}m2$	<i>i</i> $I4xz$
16	<i>j</i>	1	*	$I\bar{4}m2$	<i>j</i> $I4xz2y$

120 $I\bar{4}c2$

4	<i>a</i>	2.22	$P4/mmm$	<i>a</i>	$00\frac{1}{4}C_c$
4	<i>d</i>				$0\frac{1}{2}0C_c$
4	<i>b</i>	$\bar{4}..$	$P4/mmm$	<i>a</i>	C_c
4	<i>c</i>				$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}C_c$
8	<i>e</i>	$..2$	$I4/mcm$	<i>h</i>	$00\frac{1}{4}..b.C_c2xx$
8	<i>h</i>				$0\frac{1}{2}0..b.C_c2xx$
8	<i>f</i>	$2..$	$P4/mmm$	<i>g</i>	C_c2z
8	<i>g</i>				$0\frac{1}{2}0C_c2z$
16	<i>i</i>	1	*	$I\bar{4}c2$	<i>i</i> $..2C_c4xyz$

121 $I\bar{4}2m$

2	<i>a</i>	$\bar{4}2m$	$I4/mmm$	<i>a</i>	<i>I</i>
2	<i>b</i>				$00\frac{1}{2}I$
4	<i>c</i>	$222.$	$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0C_c$
4	<i>d</i>	$\bar{4}..$	$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}C_c$
4	<i>e</i>	$2.mm$	$I4/mmm$	<i>e</i>	$I2z$
8	<i>f</i>	$..2$	$I4/mmm$	<i>i</i>	$I4x$
8	<i>g</i>				$00\frac{1}{2}I4x$
8	<i>h</i>	$2..$	$P4/mmm$	<i>g</i>	$0\frac{1}{2}0C_c2z$
8	<i>i</i>	$..m$	*	$I\bar{4}2m$	<i>i</i> $I4xxz$
16	<i>j</i>	1	*	$I\bar{4}2m$	<i>j</i> $I4xxz2y$

122 $I\bar{4}2d$

4	<i>a</i>	$\bar{4}..$	$I4_1/amd$	<i>a</i>	vD
4	<i>b</i>				$00\frac{1}{2}{}^vD$
8	<i>c</i>	$2..$	$I4_1/amd$	<i>e</i>	vD2z
8	<i>d</i>	$..2$	*	$I\bar{4}2d$	<i>d</i> $\bar{4}..{}^vTF_c1x$
16	<i>e</i>	1	*	$I\bar{4}2d$	<i>e</i> $..2{}^vD4xyz$

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3 (continued)

123 P4/mmm				126 P4/nnc					
1	<i>a</i>	4/mmm	* P4/mmm <i>a</i>	<i>P</i>	2	<i>a</i>	422	I4/mmm <i>a</i>	<i>I</i>
1	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}P$	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}I$
1	<i>c</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P$	4	<i>c</i>	222.	P4/mmm <i>a</i>	$\frac{1}{2}00C_c$
1	<i>d</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}P$	4	<i>d</i>	$\bar{4}..$	P4/mmm <i>a</i>	$\frac{1}{2}0\frac{1}{4}C_c$
2	<i>e</i>	mmm.	P4/mmm <i>a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}C$	4	<i>e</i>	4..	I4/mmm <i>e</i>	<i>I2z</i>
2	<i>f</i>			$0\frac{1}{2}0C$	8	<i>f</i>	$\bar{1}$	P4/mmm <i>a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}P_2$
2	<i>g</i>	4mm	* P4/mmm <i>g</i>	<i>P2z</i>	8	<i>g</i>	2..	P4/mmm <i>g</i>	$\frac{1}{2}00C_c2z$
2	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P2z$	8	<i>h</i>	..2	I4/mmm <i>h</i>	<i>I4xx</i>
4	<i>i</i>	2mm.	P4/mmm <i>g</i>	$0\frac{1}{2}0C2z$	8	<i>i</i>	.2.	I4/mmm <i>i</i>	<i>I4x</i>
4	<i>j</i>	m.2m	* P4/mmm <i>j</i>	<i>P4xx</i>	8	<i>j</i>			$00\frac{1}{2}I4x$
4	<i>k</i>			$00\frac{1}{2}P4xx$	16	<i>k</i>	1	* P4/nnc <i>k</i>	..c <i>I4x2yz</i>
4	<i>l</i>	m2m.	* P4/mmm <i>l</i>	<i>P4x</i>					
4	<i>m</i>			$00\frac{1}{2}P4x$	127 P4/mbm				
4	<i>n</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P4x$	2	<i>a</i>	4/m..	P4/mmm <i>a</i>	<i>C</i>
4	<i>o</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}P4x$	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}C$
8	<i>p</i>	m..	* P4/mmm <i>p</i>	<i>P4x2y</i>	2	<i>c</i>	m.mm	P4/mmm <i>a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}C$
8	<i>q</i>			$00\frac{1}{2}P4x2y$	2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}0C$
8	<i>r</i>	..m	* P4/mmm <i>r</i>	<i>P4xx2z</i>	4	<i>e</i>	4..	P4/mmm <i>g</i>	<i>C2z</i>
8	<i>s</i>	..m.	* P4/mmm <i>s</i>	<i>P4x2z</i>	4	<i>f</i>	2.mm	P4/mmm <i>g</i>	$0\frac{1}{2}0C2z$
8	<i>t</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P4x2z$	4	<i>g</i>	m.2m	* P4/mbm <i>g</i>	$0\frac{1}{2}0.b.C2xx$
16	<i>u</i>	1	* P4/mmm <i>u</i>	<i>P4x2y2z</i>	4	<i>h</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}.b.C2xx$
124 P4/mcc									
2	<i>a</i>	422	P4/mmm <i>a</i>	$00\frac{1}{4}P_c$	8	<i>i</i>	m..	* P4/mbm <i>i</i>	..m <i>C4xy</i>
2	<i>c</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4}P_c$	8	<i>j</i>			$00\frac{1}{2}.m.C4xy$
2	<i>b</i>	4/m..	P4/mmm <i>a</i>	<i>P_c</i>	8	<i>k</i>	..m	* P4/mbm <i>k</i>	$0\frac{1}{2}0.b.C2xx2z$
2	<i>d</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P_c$	16	<i>l</i>	1	* P4/mbm <i>l</i>	..m <i>C4xy2z</i>
4	<i>e</i>	2/m..	P4/mmm <i>a</i>	$0\frac{1}{2}0C_c$	128 P4/mnc				
4	<i>f</i>	222.	P4/mmm <i>a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}C_c$	2	<i>a</i>	4/m..	I4/mmm <i>a</i>	<i>I</i>
4	<i>g</i>	4..	P4/mmm <i>g</i>	<i>P_c2z</i>	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}I$
4	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0P_c2z$	4	<i>c</i>	2/m..	P4/mmm <i>a</i>	$0\frac{1}{2}0C_c$
8	<i>i</i>	2..	P4/mmm <i>g</i>	$0\frac{1}{2}0C_c2z$	4	<i>d</i>	2.22	P4/mmm <i>a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}C_c$
8	<i>j</i>	..2	P4/mmm <i>j</i>	$00\frac{1}{4}P_c4xx$	4	<i>e</i>	4..	I4/mmm <i>e</i>	<i>I2z</i>
8	<i>k</i>	.2.	P4/mmm <i>l</i>	$00\frac{1}{4}P_c4x$	8	<i>f</i>	2..	P4/mmm <i>g</i>	$0\frac{1}{2}0C_c2z$
8	<i>l</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4}P_c4x$	8	<i>g</i>	..2	P4/mbm <i>g</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}(.b.C2xx)_c$
8	<i>m</i>	m..	* P4/mcc <i>m</i>	..c. <i>P_c4xy</i>	8	<i>h</i>	m..	* P4/mnc <i>h</i>	..2 <i>I4xy</i>
16	<i>n</i>	1	* P4/mcc <i>n</i>	..c. <i>P_c4xy2z</i>	16	<i>i</i>	1	* P4/mnc <i>i</i>	..2 <i>I4xy2z</i>
125 P4/nbm									
2	<i>a</i>	422	P4/mmm <i>a</i>	<i>C</i>	129 P4/nmm				
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}C$	2	<i>a</i>	$\bar{4}m2$	P4/mmm <i>a</i>	<i>C</i>
2	<i>c</i>	$\bar{4}2m$	P4/mmm <i>a</i>	$0\frac{1}{2}0C$	2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}C$
2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}C$	2	<i>c</i>	4mm	* P4/nmm <i>c</i>	$0\frac{1}{2}0..2CI1z$
4	<i>e</i>	..2/m	P4/mmm <i>a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0P_{ab}$	4	<i>d</i>	..2/m	P4/mmm <i>a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0P_{ab}$
4	<i>f</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2}P_{ab}$	4	<i>e</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{2}P_{ab}$
4	<i>g</i>	4..	P4/mmm <i>g</i>	<i>C2z</i>	4	<i>f</i>	2mm.	P4/nmm <i>g</i>	<i>C2z</i>
4	<i>h</i>	2.mm	P4/mmm <i>g</i>	$0\frac{1}{2}0C2z$	8	<i>g</i>	..2	P4/mmm <i>l</i>	<i>C4xx</i>
8	<i>i</i>	..2	P4/mmm <i>l</i>	<i>C4xx</i>	8	<i>h</i>			$00\frac{1}{2}C4xx$
8	<i>j</i>			$00\frac{1}{2}C4xx$	8	<i>i</i>	..m.	* P4/nmm <i>i</i>	..m <i>C4xz</i>
8	<i>k</i>	.2.	P4/mmm <i>j</i>	<i>C4x</i>	8	<i>j</i>	..m	* P4/nmm <i>j</i>	$0\frac{1}{2}0..2CI1z4xx$
8	<i>l</i>			$00\frac{1}{2}C4x$	16	<i>k</i>	1	* P4/nmm <i>k</i>	..m <i>C4xz2y</i>
8	<i>m</i>	..m	* P4/nbm <i>m</i>	$0\frac{1}{2}0..2C4xxz$	130 P4/ncc				
16	<i>n</i>	1	* P4/nbm <i>n</i>	..m <i>C4x2yz</i>	4	<i>a</i>	2.22	P4/mmm <i>a</i>	$00\frac{1}{4}C_c$
					4	<i>b</i>	$\bar{4}..$	P4/mmm <i>a</i>	<i>C_c</i>

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.3 (continued)

4	<i>c</i>	4..	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0$ (..2 <i>CI1z</i>) _c	8	<i>j</i>	..2	<i>I4/mcm h</i>	$0\frac{1}{2}0$.b. <i>C_c2xx</i>
8	<i>d</i>	$\bar{1}$	<i>P4/mmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}0$ <i>P₂</i>	16	<i>k</i>	1	* <i>P4₂/nbc k</i>	.22 <i>C_c4xyz</i>
8	<i>e</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>C_c2z</i>					
8	<i>f</i>	..2	<i>I4/mcm h</i>	$00\frac{1}{4}$.b. <i>C_c2xx</i>					
16	<i>g</i>	1	* <i>P4/ncc g</i>	..c2 <i>C_c4xyz</i>					
131 <i>P4₂/mmm</i>									
2	<i>a</i>	<i>mmm.</i>	<i>P4/mmm a</i>	<i>P_c</i>					
2	<i>b</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ <i>P_c</i>					
2	<i>c</i>	<i>mmm.</i>	<i>I4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>I</i>					
2	<i>d</i>			$0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ <i>I</i>					
2	<i>e</i>	$\bar{4}m2$	<i>P4/mmm a</i>	$00\frac{1}{4}$ <i>P_c</i>					
2	<i>f</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4}$ <i>P_c</i>					
4	<i>g</i>	<i>2mm.</i>	<i>P4/mmm g</i>	<i>P_c2z</i>					
4	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ <i>P_c2z</i>					
4	<i>i</i>	<i>2mm.</i>	<i>I4/mmm e</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>I2z</i>					
4	<i>j</i>	<i>m2m.</i>	* <i>P4₂/mmc j</i>	..2 <i>P_c2x</i>					
4	<i>k</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$..2 <i>P_c2x</i>					
4	<i>l</i>			$00\frac{1}{2}$..2 <i>P_c2x</i>					
4	<i>m</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$..2 <i>P_c2x</i>					
8	<i>n</i>	..2	<i>P4/mmm j</i>	$00\frac{1}{4}$ <i>P_c4xx</i>					
8	<i>o</i>	. <i>m.</i>	* <i>P4₂/mmc o</i>	..c <i>P_c2x2z</i>					
8	<i>p</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$..c <i>P_c2x2z</i>					
8	<i>q</i>	<i>m..</i>	* <i>P4₂/mmc q</i>	..2 <i>P_c2x2y</i>					
16	<i>r</i>	1	* <i>P4₂/mmc r</i>	..c <i>P_c2x2y2z</i>					
132 <i>P4₂/mcm</i>									
2	<i>a</i>	<i>m.mm</i>	<i>P4/mmm a</i>	<i>P_c</i>					
2	<i>c</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ <i>P_c</i>					
2	<i>b</i>	$\bar{4}2m$	<i>P4/mmm a</i>	$00\frac{1}{4}$ <i>P_c</i>					
2	<i>d</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4}$ <i>P_c</i>					
4	<i>e</i>	222.	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}$ <i>C_c</i>					
4	<i>f</i>	<i>2/m..</i>	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>C_c</i>					
4	<i>g</i>	<i>2mm</i>	<i>P4/mmm g</i>	<i>P_c2z</i>					
4	<i>h</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ <i>P_c2z</i>					
4	<i>i</i>	<i>m.2m</i>	* <i>P4₂/mcm i</i>	..2. <i>P_c2xx</i>					
4	<i>j</i>			$00\frac{1}{2}$..2. <i>P_c2xx</i>					
8	<i>k</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>C_c2z</i>					
8	<i>l</i>	..2.	<i>P4/mmm l</i>	$00\frac{1}{4}$ <i>P_c4x</i>					
8	<i>m</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{4}$ <i>P_c4x</i>					
8	<i>n</i>	<i>m..</i>	* <i>P4₂/mcm n</i>	..2. <i>P_c2xx2y</i>					
8	<i>o</i>	. <i>m</i>	* <i>P4₂/mcm o</i>	..c. <i>P_c2xx2z</i>					
16	<i>p</i>	1	* <i>P4₂/mcm p</i>	..c. <i>P_c2xx2y2z</i>					
133 <i>P4₂/nbc</i>									
4	<i>a</i>	222.	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}$ <i>C_c</i>					
4	<i>b</i>	222.	<i>P4/mmm a</i>	$00\frac{1}{4}$ <i>C_c</i>					
4	<i>c</i>	2.22	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>C_c</i>					
4	<i>d</i>	$\bar{4}..$	<i>P4/mmm a</i>	<i>C_c</i>					
8	<i>e</i>	$\bar{1}$	<i>P4/mmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ <i>P₂</i>					
8	<i>f</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>C_c2z</i>					
8	<i>g</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>C_c2z</i>					
8	<i>h</i>	..2.	<i>P4₂/mcm i</i>	$00\frac{1}{4}$..2 <i>C_c2x</i>					
8	<i>i</i>			$00\frac{3}{4}$..2 <i>C_c2x</i>					
134 <i>P4₂/nnm</i>									
2	<i>a</i>	$\bar{4}2m$	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>					
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}$ <i>I</i>					
4	<i>c</i>	222.	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>C_c</i>					
4	<i>d</i>	2.22	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}$ <i>C_c</i>					
4	<i>e</i>	..2/ <i>m</i>	<i>I4/mmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ <i>F</i>					
4	<i>f</i>			$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}$ <i>F</i>					
4	<i>g</i>	<i>2.mm</i>	<i>I4/mmm e</i>	<i>I2z</i>					
8	<i>h</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>C_c2z</i>					
8	<i>i</i>	..2.	<i>I4/mmm i</i>	<i>I4x</i>					
8	<i>j</i>			$00\frac{1}{2}$ <i>I4x</i>					
8	<i>k</i>	..2	<i>P4₂/mmc j</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}$..2. <i>C_c2xx</i>					
8	<i>l</i>			$0\frac{1}{2}\frac{3}{4}$..2. <i>C_c2xx</i>					
8	<i>m</i>	.. <i>m</i>	* <i>P4₂/nnm m</i>	..2 <i>I4xxz</i>					
16	<i>n</i>	1	* <i>P4₂/nnm n</i>	..2 <i>I4xxz2y</i>					
135 <i>P4₂/mbc</i>									
4	<i>a</i>	<i>2/m..</i>	<i>P4/mmm a</i>	<i>C_c</i>					
4	<i>b</i>	$\bar{4}..$	<i>P4/mmm a</i>	$00\frac{1}{4}$ <i>C_c</i>					
4	<i>c</i>	<i>2/m..</i>	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>C_c</i>					
4	<i>d</i>	2.22	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}$ <i>C_c</i>					
8	<i>e</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	<i>C_c2z</i>					
8	<i>f</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>C_c2z</i>					
8	<i>g</i>	..2	<i>P4/mbm g</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}$ (.b. <i>C2xx</i>) _c					
8	<i>h</i>	<i>m..</i>	* <i>P4₂/mbc h</i>	.b2 <i>C_c2xy</i>					
16	<i>i</i>	1	* <i>P4₂/mbc i</i>	.b2 <i>C_c2xy2z</i>					
136 <i>P4₂/mnm</i>									
2	<i>a</i>	<i>m.mm</i>	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>					
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}$ <i>I</i>					
4	<i>c</i>	<i>2/m..</i>	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>C_c</i>					
4	<i>d</i>	$\bar{4}..$	<i>P4/mmm a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}$ <i>C_c</i>					
4	<i>e</i>	<i>2.mm</i>	<i>I4/mmm e</i>	<i>I2z</i>					
4	<i>f</i>	<i>m.2m</i>	* <i>P4₂/mnm f</i>	..n. <i>I2xx</i>					
4	<i>g</i>			$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$..n. <i>I2xx</i>					
8	<i>h</i>	2..	<i>P4/mmm g</i>	$0\frac{1}{2}0$ <i>C_c2z</i>					
8	<i>i</i>	<i>m..</i>	* <i>P4₂/mnm i</i>	..n. <i>I2xx2y</i>					
8	<i>j</i>	.. <i>m</i>	* <i>P4₂/mnm j</i>	..n. <i>I2xx2z</i>					
16	<i>k</i>	1	* <i>P4₂/mnm k</i>	..n. <i>I2xx2y2z</i>					
137 <i>P4₂/nmc</i>									
2	<i>a</i>	$\bar{4}m2$	<i>I4/mmm a</i>	<i>I</i>					
2	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}$ <i>I</i>					
4	<i>c</i>	<i>2mm.</i>	<i>I4/mmm e</i>	<i>I2z</i>					
4	<i>d</i>	<i>2mm.</i>	<i>P4/nmm c</i>	$0\frac{1}{2}0$ (..2 <i>CI1z</i>) _c					
8	<i>e</i>	$\bar{1}$	<i>P4/mmm a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ <i>P₂</i>					
8	<i>f</i>	..2	<i>I4/mmm h</i>	<i>I4xx</i>					
8	<i>g</i>	. <i>m.</i>	* <i>P4₂/nmc g</i>	..c <i>I4xz</i>					
16	<i>h</i>	1	* <i>P4₂/nmc h</i>	..c <i>I4xz2y</i>					

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3 (continued)

138 $P4_2/ncm$

4	<i>a</i>	2.22	$P4/mmm$	<i>a</i>	$00\frac{1}{4} C_c$
4	<i>b</i>	$\bar{4}..$	$P4/mmm$	<i>a</i>	C_c
4	<i>c</i>	$..2/m$	$I4/mmm$	<i>a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} F$
4	<i>d</i>				$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4} F$
4	<i>e</i>	2. <i>mm</i>	$P4/nmm$	<i>c</i>	$0\frac{1}{2}0$ ($..2$ $CI1z$) _c
8	<i>f</i>	2..	$P4/mmm$	<i>g</i>	C_c2z
8	<i>g</i>	$..2$	$P4_2/mmc$	<i>j</i>	$00\frac{1}{4}.2. C_c2xx$
8	<i>h</i>				$00\frac{3}{4}.2. C_c2xx$
8	<i>i</i>	$..m$	* $P4_2/ncm$	<i>i</i>	$\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}\bar{4}.. F2xxz$
16	<i>j</i>	1	* $P4_2/ncm$	<i>j</i>	$..m2 C_4xyz$

139 $I4/mmm$

2	<i>a</i>	4/ <i>mmm</i>	* $I4/mmm$	<i>a</i>	I
2	<i>b</i>				$00\frac{1}{2} I$
4	<i>c</i>	<i>mmm.</i>	$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c$
4	<i>d</i>	$\bar{4}m2$	$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} C_c$
4	<i>e</i>	4 <i>mm</i>	* $I4/mmm$	<i>e</i>	$I2z$
8	<i>f</i>	$..2/m$	$P4/mmm$	<i>a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$
8	<i>g</i>	2 <i>mm.</i>	$P4/mmm$	<i>g</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c2z$
8	<i>h</i>	<i>m.2m</i>	* $I4/nmm$	<i>h</i>	$I4xx$
8	<i>i</i>	<i>m2m.</i>	* $I4/mmm$	<i>i</i>	$I4x$
8	<i>j</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}0 I4x$
16	<i>k</i>	$..2$	$P4/mmm$	<i>l</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} C_c4xx$
16	<i>l</i>	<i>m..</i>	* $I4/nmm$	<i>l</i>	$I4x2y$
16	<i>m</i>	$..m$	* $I4/mmm$	<i>m</i>	$I4xx2z$
16	<i>n</i>	$..m$	* $I4/mmm$	<i>n</i>	$I4x2z$
32	<i>o</i>	1	* $I4/mmm$	<i>o</i>	$I4x2y2z$

140 $I4/mcm$

4	<i>a</i>	422	$P4/mmm$	<i>a</i>	$00\frac{1}{4} C_c$
4	<i>b</i>	$\bar{4}2m$	$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4} C_c$
4	<i>c</i>	4/ <i>m.</i>	$P4/mmm$	<i>a</i>	C_c
4	<i>d</i>	<i>m.mm</i>	$P4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c$
8	<i>e</i>	$..2/m$	$P4/mmm$	<i>a</i>	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$
8	<i>f</i>	4..	$P4/mmm$	<i>g</i>	C_c2z
8	<i>g</i>	2. <i>mm</i>	$P4/mmm$	<i>g</i>	$0\frac{1}{2}0 C_c2z$
8	<i>h</i>	<i>m.2m</i>	* $I4/mcm$	<i>h</i>	$0\frac{1}{2}0 .b. C_c2xx$
16	<i>i</i>	$..2$	$P4/mmm$	<i>l</i>	$00\frac{1}{4} C_c4xx$
16	<i>j</i>	$..2$	$P4/mmm$	<i>j</i>	$00\frac{1}{4} C_c4x$
16	<i>k</i>	<i>m..</i>	* $I4/mcm$	<i>k</i>	$..m C_c4xy$
16	<i>l</i>	$..m$	* $I4/mcm$	<i>l</i>	$0\frac{1}{2}\frac{1}{4}.b. C_c4xxz$
32	<i>m</i>	1	* $I4/mcm$	<i>m</i>	$.c. C_c4xy2z$

141 $I4_1/amd$

4	<i>a</i>	$\bar{4}m2$	* $I4_1/amd$	<i>a</i>	vD
4	<i>b</i>				$00\frac{1}{2} {}^vD$
8	<i>c</i>	$..2/m.$	* $I4_1/amd$	<i>c</i>	vT
8	<i>d</i>				$00\frac{1}{2} {}^vT$
8	<i>e</i>	2 <i>mm.</i>	* $I4_1/amd$	<i>e</i>	vD2z
16	<i>f</i>	$..2$	* $I4_1/amd$	<i>f</i>	$..2 {}^vT2x$
16	<i>g</i>	$..2$	* $I4_1/amd$	<i>g</i>	vD4xx
16	<i>h</i>	$..m$	* $I4_1/amd$	<i>h</i>	$..2. {}^vD4xz$
32	<i>i</i>	1	* $I4_1/amd$	<i>i</i>	$..2. {}^vD4xz2y$

142 $I4_1/acd$

8	<i>a</i>	$\bar{4}..$	$I4/mmm$	<i>a</i>	F_c
8	<i>b</i>	2.22	$I4/mmm$	<i>a</i>	$00\frac{1}{4} F_c$
16	<i>c</i>	$\bar{1}$	$I4/mmm$	<i>a</i>	$0\frac{1}{4}\frac{1}{8} I_2$
16	<i>d</i>	2..	$I4/mmm$	<i>e</i>	F_c2z
16	<i>e</i>	$..2$	* $I4_1/acd$	<i>e</i>	$0\frac{1}{4}\frac{3}{8}\bar{4}.. I_2P_{c2}1x$
16	<i>f</i>	$..2$	* $I4_1/acd$	<i>f</i>	$00\frac{1}{4}.2. F_c2xx$
32	<i>g</i>	1	* $I4_1/acd$	<i>g</i>	$..22 F_c4xyz$

143 $P3$

1	<i>a</i>	3..	$P6/mmm$	<i>a</i>	$P[z]$
1	<i>b</i>				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}0 P[z]$
1	<i>c</i>				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}0 P[z]$
3	<i>d</i>	1	$P\bar{6}$	<i>j</i>	$P3xy[z]$

144 $P3_1$

3	<i>a</i>	1	* $P3_2$	<i>a</i>	$3_1.. P_C R^- Q1xy[z]$
---	----------	---	----------	----------	-------------------------

145 $P3_2$

3	<i>a</i>	1	* $P3_2$	<i>a</i>	$3_2.. P_C R^+ Q1xy[z]$
---	----------	---	----------	----------	-------------------------

146 $R3$ (Hexagonal axes)

3	<i>a</i>	3.	$R\bar{3}m$	<i>a</i>	$R[z]$
9	<i>b</i>	1	* $R3$	<i>b</i>	$R3xy[z]$

146 $R3$ (Rhombohedral axes)

1	<i>a</i>	3.	$R\bar{3}m$	<i>a</i>	$P[xxx]$
3	<i>b</i>	1	* $R3$	<i>b</i>	$P3yz[xxx]$

147 $P\bar{3}$

1	<i>a</i>	$\bar{3}..$	$P6/mmm$	<i>a</i>	P
1	<i>b</i>				$00\frac{1}{2} P$
2	<i>c</i>	3..	$P6/mmm$	<i>e</i>	$P2z$
2	<i>d</i>	3..	$P\bar{3}m1$	<i>d</i>	$..2. GE1z$
3	<i>e</i>	$\bar{1}$	$P6/mmm$	<i>f</i>	N
3	<i>f</i>				$00\frac{1}{2} N$
6	<i>g</i>	1	* $P\bar{3}$	<i>g</i>	$P6xyz$

148 $R\bar{3}$ (Hexagonal axes)

3	<i>a</i>	$\bar{3}.$	$R\bar{3}m$	<i>a</i>	R
3	<i>b</i>				$00\frac{1}{2} R$
6	<i>c</i>	3.	$R\bar{3}m$	<i>c</i>	$R2z$
9	<i>d</i>	$\bar{1}$	$R\bar{3}m$	<i>e</i>	$00\frac{1}{2} M$
9	<i>e</i>				M
18	<i>f</i>	1	* $R\bar{3}$	<i>f</i>	$R6xyz$

148 $R\bar{3}$ (Rhombohedral axes)

1	<i>a</i>	$\bar{3}.$	$R\bar{3}m$	<i>a</i>	P
1	<i>b</i>				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$
2	<i>c</i>	3.	$R\bar{3}m$	<i>c</i>	$P2xxx$
3	<i>d</i>	$\bar{1}$	$R\bar{3}m$	<i>e</i>	$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} J$
3	<i>e</i>				J
6	<i>f</i>	1	* $R\bar{3}$	<i>f</i>	$P6xyz$

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.3 (continued)

149 P312				2	c	3.	$R\bar{3}m$	c	$P2xxx$		
1	a	3.2	$P6/mmm$	a	\bar{P}		*	$R32$	d	$P3x\bar{x}$	
1	b				$00\frac{1}{2}P$					$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}P3x\bar{x}$	
1	c				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}P$			*	$R32$	f	$P3x\bar{x}2yz$
1	d				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}\frac{1}{2}P$						
1	e				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}P$						
1	f				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2}P$						
2	g	3..	$P6/mmm$	e	$P2z$						
2	h				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}P2z$						
2	i				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}P2z$						
3	j	..2	$P\bar{6}m2$	j	$P3x\bar{x}$						
3	k				$00\frac{1}{2}P3x\bar{x}$						
6	l	1	*	$P312$	l	$P3x\bar{x}2yz$					
150 P321											
1	a	32.	$P6/mmm$	a	P						
1	b				$00\frac{1}{2}P$						
2	c	3..	$P6/mmm$	e	$P2z$						
2	d	3..	$P\bar{3}m1$	d	..2. $GE1z$						
3	e	..2	$P\bar{6}2m$	f	$P3x$						
3	f				$00\frac{1}{2}P3x$						
6	g	1	*	$P321$	g	$P3x2yz$					
151 P312											
3	a	..2	*	$P3_212$	a	$00\frac{1}{3}3_1.. P_C^- Q1x\bar{x}$					
3	b				$00\frac{2}{6}3_1.. P_C^- Q1x\bar{x}$						
6	c	1	*	$P3_212$	c	$00\frac{1}{3}3_1.. P_C^- Q1x\bar{x}2yz$					
152 P3121											
3	a	..2	*	$P3_221$	a	$00\frac{1}{3}3_1.. P_C R^- Q1x$					
3	b				$00\frac{2}{6}3_1.. P_C R^- Q1x$						
6	c	1	*	$P3_221$	c	$00\frac{1}{3}3_1.. P_C R^- Q1x2yz$					
153 P3212											
3	a	..2	*	$P3_212$	a	$00\frac{2}{3}3_2.. P_C^+ Q1x\bar{x}$					
3	b				$00\frac{1}{6}3_2.. P_C^+ Q1x\bar{x}$						
6	c	1	*	$P3_212$	c	$00\frac{2}{3}3_2.. P_C^+ Q1x\bar{x}2yz$					
154 P321											
3	a	..2	*	$P3_221$	a	$00\frac{2}{3}3_2.. P_C R^+ Q1x$					
3	b				$00\frac{1}{6}3_2.. P_C R^+ Q1x$						
6	c	1	*	$P3_221$	c	$00\frac{2}{3}3_2.. P_C R^+ Q1x2yz$					
155 R32 (Hexagonal axes)											
3	a	32		$R\bar{3}m$	a	R					
3	b				$00\frac{1}{2}R$						
6	c	3.		$R\bar{3}m$	c	$R2z$					
9	d	..2	*	$R32$	d	$R3x$					
9	e				$00\frac{1}{2}R3x$						
18	f	1	*	$R32$	f	$R3x2yz$					
155 R32 (Rhombohedral axes)											
1	a	32		$R\bar{3}m$	a	P					
1	b				$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}P$						
2	c	3.		$R\bar{3}m$	c	$P2z$					
3	d	..2	*	$R32$	d	$R3x$					
3	e				$00\frac{1}{2}R3x$						
6	f	1	*	$R32$	f	$R3x2yz$					
156 P3m1											
1	a	3m.		$P6/mmm$	a	$P[z]$					
1	b				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}P[z]$						
1	c				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}P[z]$						
3	d	.m.		$P\bar{6}m2$	j	$P3x\bar{x}[z]$					
6	e	1		$P\bar{6}m2$	l	$P3x\bar{x}2y[z]$					
157 P31m											
1	a	3m		$P6/mmm$	a	$P[z]$					
2	b	3..		$P6/mmm$	c	$G[z]$					
3	c	..m		$P\bar{6}2m$	f	$P3x[z]$					
6	d	1		$P\bar{6}2m$	j	$P3x2y[z]$					
158 P3c1											
2	a	3..		$P6/mmm$	a	$P_c[z]$					
2	b				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}P_c[z]$						
2	c				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}P_c[z]$						
6	d	1		$P\bar{6}c2$	k	..2 $P_c3xy[z]$					
159 P31c											
2	a	3..		$P6/mmm$	a	$P_c[z]$					
2	b	3..		$P6_3/mmc$	c	$E[z]$					
6	c	1		$P\bar{6}2c$	h	..2 $P_c3xy[z]$					
160 R3m (Hexagonal axes)											
3	a	3m		$R\bar{3}m$	a	$R[z]$					
9	b	.m		*	$R3m$	b	$R3x\bar{x}[z]$				
18	c	1		*	$R3m$	c	$R3x\bar{x}2y[z]$				
160 R3m (Rhombohedral axes)											
1	a	3m		$R\bar{3}m$	a	$P[xxx]$					
3	b	.m		*	$R3m$	b	$P3z[xxx]$				
6	c	1		*	$R3m$	c	$P3z2y[xxx]$				
161 R3c (Hexagonal axes)											
6	a	3.		$R\bar{3}m$	a	$R_c[z]$					
18	b	1		*	$R3c$	b	.c $R_c3xy[z]$				
161 R3c (Rhombohedral axes)											
2	a	3.		$R\bar{3}m$	a	$I[xxx]$					
6	b	1		*	$R3c$	b	.n $I3yz[xxx]$				
162 P31m											
1	a	$\bar{3}.m$		$P6/mmm$	a	P					
1	b				$00\frac{1}{2}P$						
2	c	3.2		$P6/mmm$	c	G					
2	d				$00\frac{1}{2}G$						
2	e	3.m		$P6/mmm$	e	$P2z$					
3	f	..2/m		$P6/mmm$	f	N					

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3 (continued)

3	<i>g</i>			$00\frac{1}{2}N$	3	<i>e</i>	$.2/m$	*	$R\bar{3}m$	<i>e</i>	<i>J</i>		
4	<i>h</i>	$3..$	$P6/mmm$	<i>h</i>	$G2z$	3	<i>d</i>				$\frac{111}{222}J$		
6	<i>i</i>	$..2$	$P6/mmm$	<i>l</i>	$P6x\bar{x}$	6	<i>f</i>	$.2$	*	$R\bar{3}m$	<i>f</i>	$P6x\bar{x}$	
6	<i>j</i>			$00\frac{1}{2}P6x\bar{x}$	6	<i>g</i>					$\frac{111}{222}P6x\bar{x}$		
6	<i>k</i>	$..m$	*	$P\bar{3}1m$	<i>k</i>	$P6xz$			*	$R\bar{3}m$	<i>h</i>	$P6xxz$	
12	<i>l</i>	1	*	$P\bar{3}1m$	<i>l</i>	$P6xz2y$			*	$R\bar{3}m$	<i>i</i>	$P6xxz2y$	
163 $P\bar{3}1c$													
2	<i>a</i>	3.2	$P6/mmm$	<i>a</i>	$00\frac{1}{4}P_c$	6	<i>a</i>	32		$R\bar{3}m$	<i>a</i>	$00\frac{1}{4}'R_c$	
2	<i>b</i>	$\bar{3}..$	$P6/mmm$	<i>a</i>	P_c	6	<i>b</i>	$\bar{3}.$		$R\bar{3}m$	<i>a</i>	$'R_c$	
2	<i>c</i>	3.2	$P6_3/mmc$	<i>c</i>	E	12	<i>c</i>	$3.$		$R\bar{3}m$	<i>c</i>	$'R_c2z$	
2	<i>d</i>			$00\frac{1}{2}E$	18	<i>d</i>	$\bar{1}$			$R\bar{3}m$	<i>e</i>	$'M_c$	
4	<i>e</i>	$3..$	$P6/mmm$	<i>e</i>	P_c2z	18	<i>e</i>	$.2$	*	$R\bar{3}c$	<i>e</i>	$00\frac{1}{4}.c'R_c3x$	
4	<i>f</i>	$3..$	$P6_3/mmc$	<i>f</i>	$E2z$	36	<i>f</i>	1	*	$R\bar{3}c$	<i>f</i>	$.c'R_c6xyz$	
6	<i>g</i>	$\bar{1}$	$P6/mmm$	<i>f</i>	N_c	167 $R\bar{3}c$ (Hexagonal axes)							
6	<i>h</i>	$..2$	$P6_3/mmc$	<i>h</i>	$00\frac{1}{4}.2.P_c3x\bar{x}$	2	<i>a</i>	32		$R\bar{3}m$	<i>a</i>	$\frac{111}{444}I$	
12	<i>i</i>	1	*	$P\bar{3}1c$	<i>i</i>	$..cP_c6xyz$	2	<i>b</i>	$\bar{3}.$	$R\bar{3}m$	<i>a</i>	I	
164 $P\bar{3}m1$													
1	<i>a</i>	$\bar{3}m.$	$P6/mmm$	<i>a</i>	P	4	<i>c</i>	$3.$		$R\bar{3}m$	<i>c</i>	$I2xxx$	
1	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}P$	6	<i>d</i>	$\bar{1}$			$R\bar{3}m$	<i>e</i>	J^*	
2	<i>c</i>	$3m.$	$P6/mmm$	<i>e</i>	$P2z$	6	<i>e</i>	$.2$	*	$R\bar{3}c$	<i>e</i>	$\frac{111}{444}.nI3x\bar{x}$	
2	<i>d</i>	$3m.$	*	$P\bar{3}m1$	<i>d</i>	$.2.GE1z$	12	<i>f</i>	1	*	$R\bar{3}c$	<i>f</i>	$.nI6xyz$
3	<i>e</i>	$.2/m.$	$P6/mmm$	<i>f</i>	N	168 $P6$							
3	<i>f</i>			$00\frac{1}{2}N$	1	<i>a</i>	$6..$		$P6/mmm$	<i>a</i>	$P[z]$		
6	<i>g</i>	$.2.$	$P6/mmm$	<i>j</i>	$P6x$	2	<i>b</i>	$3..$		$P6/mmm$	<i>c</i>	$G[z]$	
6	<i>h</i>			$00\frac{1}{2}P6x$	3	<i>c</i>	$2..$		$P6/mmm$	<i>f</i>	$N[z]$		
6	<i>i</i>	$.m.$	*	$P\bar{3}m1$	<i>i</i>	$P6x\bar{x}z$	6	<i>d</i>	1		$P6/m$	<i>j</i>	$P6xy[z]$
12	<i>j</i>	1	*	$P\bar{3}m1$	<i>j</i>	$P6x\bar{x}z2y$	169 $P6_1$						
165 $P\bar{3}c1$													
2	<i>a</i>	$32.$	$P6/mmm$	<i>a</i>	$00\frac{1}{4}P_c$	6	<i>a</i>	1	*	$P6_1$	<i>a</i>	$3_12_1..P_{Cc}E_C^+Q_c1xy[z]$	
2	<i>b</i>	$\bar{3}..$	$P6/mmm$	<i>a</i>	P_c	170 $P6_5$							
4	<i>c</i>	$3..$	$P6/mmm$	<i>e</i>	P_c2z	6	<i>a</i>	1	*	$P6_1a$		$3_22_1..P_{Cc}E_C^-Q_c1xy[z]$	
4	<i>d</i>	$3..$	$P\bar{3}m1$	<i>d</i>	$(.2.GE1z)_c$	171 $P6_2$							
6	<i>e</i>	$\bar{1}$	$P6/mmm$	<i>f</i>	N_c	3	<i>a</i>	$2..$		$P6/mmm$	<i>a</i>	$P_c[z]$	
6	<i>f</i>	$.2.$	$P6_3/mcm$	<i>g</i>	$00\frac{1}{4}.2.P_c3x$	3	<i>b</i>	$2..$		$P6_22c$	<i>c</i>	$+Q[z]$	
12	<i>g</i>	1	*	$P\bar{3}c1$	<i>g</i>	$.c.P_c6xyz$	6	<i>c</i>	1	*	$P6_2c$		$3_2..P_c2xy[z]$
166 $R\bar{3}m$ (Hexagonal axes)													
3	<i>a</i>	$\bar{3}m$	*	$R\bar{3}m$	<i>a</i>	R	172 $P6_4$						
3	<i>b</i>			$00\frac{1}{2}R$	3	<i>a</i>	$2..$		$P6/mmm$	<i>a</i>	$P_c[z]$		
6	<i>c</i>	$3m$	*	$R\bar{3}m$	<i>c</i>	$R2z$	3	<i>b</i>	$2..$		$P6_22c$	$-Q[z]$	
9	<i>e</i>	$.2/m$	*	$R\bar{3}m$	<i>e</i>	M	6	<i>c</i>	1	*	$P6_2c$	$3_1..P_c2xy[z]$	
9	<i>d</i>			$00\frac{1}{2}M$	173 $P6_3$								
18	<i>f</i>	$.2$	*	$R\bar{3}m$	<i>f</i>	$R6x$	2	<i>a</i>	$3..$		$P6/mmm$	<i>a</i>	$P_c[z]$
18	<i>g</i>			$00\frac{1}{2}R6x$	2	<i>b</i>	$3..$		$P6_3/mmc$	<i>c</i>	$E[z]$		
18	<i>h</i>	$.m$	*	$R\bar{3}m$	<i>h</i>	$R6x\bar{x}z$	6	<i>c</i>	1		$P6_3/m$	<i>h</i>	$2_1..P_c3xy[z]$
36	<i>i</i>	1	*	$R\bar{3}m$	<i>i</i>	$R6x\bar{x}z2y$	174 $P\bar{6}$						
166 $R\bar{3}m$ (Rhombohedral axes)													
1	<i>a</i>	$\bar{3}m$	*	$R\bar{3}m$	<i>a</i>	P	1	<i>a</i>	$\bar{6}..$		$P6/mmm$	<i>a</i>	P
1	<i>b</i>			$\frac{111}{222}P$	1	<i>b</i>						$00\frac{1}{2}P$	
2	<i>c</i>	$3m$	*	$R\bar{3}m$	<i>c</i>	$P2xxx$	1	<i>c</i>				$\frac{1}{3}0P$	

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.3 (continued)

1	<i>d</i>		$\frac{1}{3}\frac{2}{3}\frac{1}{2}P$	178 P6₁22			
1	<i>e</i>		$\frac{2}{3}\frac{1}{3}0P$	6	<i>a</i>	.2.	* P6 ₁ 22 <i>a</i> 3 ₁ .2 P _{Cc} ⁺ Q _c 1x
1	<i>f</i>		$\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2}P$	6	<i>b</i>	..2	* P6 ₁ 22 <i>b</i> 00 $\frac{1}{12}$ 3 ₁ .2. P _{Cc} E _C ⁺ Q _c 1x \bar{x}
2	<i>g</i>	3..	P6/ <i>mmm e</i> P2z	12	<i>c</i>	1	* P6 ₁ 22 <i>c</i> 3 ₁ .2 P _{Cc} ⁺ Q _c 1x2yz
2	<i>h</i>		$\frac{1}{3}\frac{2}{3}0P2z$				
2	<i>i</i>		$\frac{2}{3}\frac{1}{3}0P2z$	179 P6₂22			
3	<i>j</i>	<i>m</i> ..	* P $\bar{6}$ <i>j</i> P3xy	6	<i>a</i>	.2.	* P6 ₂ 22 <i>a</i> 3 ₂ .2 P _{Cc} ⁻ Q _c 1x
3	<i>k</i>		00 $\frac{1}{2}$ P3xy	6	<i>b</i>	..2	* P6 ₂ 22 <i>b</i> 00 $\frac{1}{12}$ 3 ₂ .2. P _{Cc} E _C ⁻ Q _c 1x \bar{x}
6	<i>l</i>	1	* P $\bar{6}$ <i>l</i> P3xy2z	12	<i>c</i>	1	* P6 ₂ 22 <i>c</i> 3 ₂ .2 P _{Cc} ⁻ Q _c 1x2yz
				180 P6₂22			
175 P6/m				3	<i>a</i>	222	P6/ <i>mmm a</i> P _C
1	<i>a</i>	6/ <i>m</i> ..	P6/ <i>mmm a</i> P	3	<i>b</i>		00 $\frac{1}{2}$ P _C
1	<i>b</i>		00 $\frac{1}{2}$ P	3	<i>c</i>	222	* P6 ₂ 22 <i>c</i> +Q
2	<i>c</i>	$\bar{6}$..	P6/ <i>mmm c</i> G	3	<i>d</i>		00 $\frac{1}{2}$ +Q
2	<i>d</i>		00 $\frac{1}{2}$ G	6	<i>e</i>	2..	P6/ <i>mmm e</i> P _C 2z
2	<i>e</i>	6..	P6/ <i>mmm e</i> P2z	6	<i>f</i>	2..	* P6 ₂ 22 <i>f</i> +Q2z
3	<i>f</i>	2/ <i>m</i> ..	P6/ <i>mmm f</i> N	6	<i>g</i>	.2.	* P6 ₂ 22 <i>g</i> 3 ₂ .. P _C 2x
3	<i>g</i>		00 $\frac{1}{2}$ N	6	<i>h</i>		00 $\frac{1}{2}$ 3 ₂ .. P _C 2x
4	<i>h</i>	3..	P6/ <i>mmm h</i> G2z	6	<i>i</i>	..2	* P6 ₂ 22 <i>i</i> 00 $\frac{1}{3}$ 3 ₂ .. P _C 2x \bar{x}
6	<i>i</i>	2..	P6/ <i>mmm i</i> N2z	6	<i>j</i>		00 $\frac{5}{6}$ 3 ₂ .. P _C 2x \bar{x}
6	<i>j</i>	<i>m</i> ..	* P6/ <i>m j</i> P6xy	12	<i>k</i>	1	* P6 ₂ 22 <i>k</i> 3 ₂ .. P _C 2x2yz
6	<i>k</i>		00 $\frac{1}{2}$ P6xy				
12	<i>l</i>	1	* P6/ <i>m l</i> P6xy2z	181 P6₄22			
				3	<i>a</i>	222	P6/ <i>mmm a</i> P _C
				3	<i>b</i>		00 $\frac{1}{2}$ P _C
				3	<i>c</i>	222	* P6 ₂ 22 <i>c</i> -Q
				3	<i>d</i>		00 $\frac{1}{2}$ -Q
176 P6₃/m				6	<i>e</i>	2..	P6/ <i>mmm e</i> P _C 2z
2	<i>a</i>	$\bar{6}$..	P6/ <i>mmm a</i> 00 $\frac{1}{4}$ P _C	6	<i>f</i>	2..	* P6 ₂ 22 <i>f</i> -Q2z
2	<i>b</i>	$\bar{3}$..	P6/ <i>mmm a</i> P _C	6	<i>g</i>	.2.	* P6 ₂ 22 <i>g</i> 3 ₁ .. P _C 2x
2	<i>c</i>	$\bar{6}$..	P6 ₃ / <i>mmc c</i> E	6	<i>h</i>		00 $\frac{1}{2}$ 3 ₁ .. P _C 2x
2	<i>d</i>		00 $\frac{1}{2}$ E	6	<i>i</i>	..2	* P6 ₂ 22 <i>i</i> 00 $\frac{2}{3}$ 3 ₁ .. P _C 2x \bar{x}
4	<i>e</i>	3..	P6/ <i>mmm e</i> P _C 2z	6	<i>j</i>		00 $\frac{1}{6}$ 3 ₁ .. P _C 2x \bar{x}
4	<i>f</i>	3..	P6 ₃ / <i>mmc f</i> E2z	12	<i>k</i>	1	* P6 ₂ 22 <i>k</i> 3 ₁ .. P _C 2x2yz
6	<i>g</i>	$\bar{1}$	P6/ <i>mmm f</i> N _C				
6	<i>h</i>	<i>m</i> ..	* P6 ₃ / <i>m h</i> 00 $\frac{1}{4}$ 2 ₁ .. P _C 3xy	182 P6₃22			
12	<i>i</i>	1	* P6 ₃ / <i>m i</i> <i>m</i> .. P _C 6xyz	2	<i>a</i>	32.	P6/ <i>mmm a</i> P _C
				2	<i>b</i>	3.2	P6/ <i>mmm a</i> 00 $\frac{1}{4}$ P _C
				2	<i>c</i>	3.2	P6 ₃ / <i>mmc c</i> E
177 P622				2	<i>d</i>		00 $\frac{1}{2}$ E
1	<i>a</i>	622	P6/ <i>mmm a</i> P	4	<i>e</i>	3..	P6/ <i>mmm e</i> P _C 2z
1	<i>b</i>		00 $\frac{1}{2}$ P	4	<i>f</i>	3..	P6 ₃ / <i>mmc f</i> E2z
2	<i>c</i>	3.2	P6/ <i>mmm c</i> G	6	<i>g</i>	.2.	P6 ₃ / <i>mcm g</i> ..2 P _C 3x
2	<i>d</i>		00 $\frac{1}{2}$ G	6	<i>h</i>	..2	P6 ₃ / <i>mmc h</i> 00 $\frac{1}{4}$.2. P _C 3x \bar{x}
2	<i>e</i>	6..	P6/ <i>mmm e</i> P2z	12	<i>i</i>	1	* P6 ₃ 22 <i>i</i> ..2 P _C 3x2yz
3	<i>f</i>	222	P6/ <i>mmm f</i> N				
3	<i>g</i>		00 $\frac{1}{2}$ N	183 P6mm			
4	<i>h</i>	3..	P6/ <i>mmm h</i> G2z	1	<i>a</i>	6mm	P6/ <i>mmm a</i> P[z]
6	<i>i</i>	2..	P6/ <i>mmm i</i> N2z	2	<i>b</i>	3m.	P6/ <i>mmm c</i> G[z]
6	<i>j</i>	.2.	P6/ <i>mmm j</i> P6x	3	<i>c</i>	2mm	P6/ <i>mmm f</i> N[z]
6	<i>k</i>		00 $\frac{1}{2}$ P6x	6	<i>d</i>	..m	P6/ <i>mmm j</i> P6x[z]
6	<i>l</i>	..2	P6/ <i>mmm l</i> P6x \bar{x}	6	<i>e</i>	.m.	P6/ <i>mmm l</i> P6x \bar{x} [z]
6	<i>m</i>		00 $\frac{1}{2}$ P6x \bar{x}	12	<i>f</i>	1	P6/ <i>mmm p</i> P6x2y[z]
12	<i>n</i>	1	* P622 <i>n</i> P6x2yz				

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3 (continued)

184 $P6cc$				2	e	$3.m$	$P6/mmm$	e	$P2z$		
2	a	$6..$	$P6/mmm$	a	$P_c[z]$	3	f	$m2m$	* $P\bar{6}2m$	f	$P3x$
4	b	$3..$	$P6/mmm$	c	$G_c[z]$	3	g				$00\frac{1}{2}P3x$
6	c	$2..$	$P6/mmm$	f	$N_c[z]$	4	h	$3..$	$P6/mmm$	h	$G2z$
12	d	1	$P6/mcc$	l	$.c. P_c6xy[z]$	6	i	$..m$	* $P\bar{6}2m$	i	$P3x2z$
185 $P6_3cm$				6	j	$m..$	* $P\bar{6}2m$	j			$P3x2y$
2	a	$3.m$	$P6/mmm$	a	$P_c[z]$	6	k				$00\frac{1}{2}P3x2y$
4	b	$3..$	$P6/mmm$	c	$G_c[z]$	12	l	1	* $P\bar{6}2m$	l	$P3x2y2z$
6	c	$..m$	$P6_3/mcm$	g	$..2 P_c3x[z]$	190 $P\bar{6}2c$					
12	d	1	$P6_3/mcm$	j	$..2 P_c3x2y[z]$	2	a	$32.$	$P6/mmm$	a	P_c
186 $P6_3mc$				2	b	$\bar{6}..$	$P6/mmm$	a	$00\frac{1}{4}P_c$		
2	a	$3m.$	$P6/mmm$	a	$P_c[z]$	2	c	$\bar{6}..$	$P6_3/mmc$	c	E
2	b	$3m.$	$P6_3/mmc$	c	$E[z]$	2	d				$00\frac{1}{2}E$
6	c	$.m$	$P6_3/mmc$	h	$.2. P_c3x\bar{x}[z]$	4	e	$3..$	$P6/mmm$	e	P_c2z
12	d	1	$P6_3/mmc$	j	$.2. P_c3x\bar{x}2y[z]$	4	f	$3..$	$P6_3/mmc$	f	$E2z$
187 $P\bar{6}m2$				6	g	$.2.$	$P\bar{6}2m$	f			P_c3x
1	a	$\bar{6}m2$	$P6/mmm$	a	P	6	h	$m..$	* $P\bar{6}2c$	h	$00\frac{1}{4}.2. P_c3xy$
1	b				$00\frac{1}{2}P$	12	i	1	* $P\bar{6}2c$	i	$m.. P_c3x2yz$
1	c				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}0 P$	191 $P6/mmm$					
1	d				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}\frac{1}{2} P$	1	a	$6/mmm$	* $P6/mmm$	a	P
1	e				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}0 P$	1	b				$00\frac{1}{2}P$
1	f				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2} P$	2	c	$\bar{6}m2$	* $P6/mmm$	c	G
2	g	$3m.$	$P6/mmm$	e	$P2z$	2	d				$00\frac{1}{2}G$
2	h				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}0 P2z$	2	e	$6mm$	* $P6/mmm$	e	$P2z$
2	i				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}0 P2z$	3	f	mmm	* $P6/mmm$	f	N
3	j	$mm2$	* $P\bar{6}m2$	j	$P3x\bar{x}$	3	g				$00\frac{1}{2}N$
3	k				$00\frac{1}{2}P3x\bar{x}$	4	h	$3m.$	* $P6/mmm$	h	$G2z$
6	l	$m..$	* $P\bar{6}m2$	l	$P3x\bar{x}2y$	6	i	$2mm$	* $P6/mmm$	i	$N2z$
6	m				$00\frac{1}{2}P3x\bar{x}2y$	6	j	$m2m$	* $P6/mmm$	j	$P6x$
6	n	$.m$	* $P\bar{6}m2$	n	$P3x\bar{x}2z$	6	k				$00\frac{1}{2}P6x$
12	o	1	* $P\bar{6}m2$	o	$P3x\bar{x}2y2z$	6	l	$mm2$	* $P6/mmm$	l	$P6x\bar{x}$
188 $P\bar{6}c2$				6	m						$00\frac{1}{2}P6x\bar{x}$
2	a	3.2	$P6/mmm$	a	P_c	12	n	$..m$	* $P6/mmm$	n	$P6x2z$
2	c				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}0 P_c$	12	o	$.m$	* $P6/mmm$	o	$P6x\bar{x}2z$
2	e				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}0 P_c$	12	p	$m..$	* $P6/mmm$	p	$P6x2y$
2	b	$\bar{6}..$	$P6/mmm$	a	$00\frac{1}{4}P_c$	12	q				$00\frac{1}{2}P6x2y$
2	d				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}\frac{1}{4} P_c$	24	r	1	* $P6/mmm$	r	$P6x2y2z$
2	f				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{4} P_c$	192 $P6/mcc$					
4	g	$3..$	$P6/mmm$	e	P_c2z	2	a	622	$P6/mmm$	a	$00\frac{1}{4}P_c$
4	h				$\frac{1}{3}\frac{2}{3}0 P_c2z$	2	b	$6/m..$	$P6/mmm$	a	P_c
4	i				$\frac{2}{3}\frac{1}{3}0 P_c2z$	4	c	3.2	$P6/mmm$	c	$00\frac{1}{4}G_c$
6	j	$..2$	$P\bar{6}m2$	j	$P_c3x\bar{x}$	4	d	$\bar{6}..$	$P6/mmm$	c	G_c
6	k	$m..$	* $P\bar{6}c2$	k	$00\frac{1}{4}.2 P_c3xy$	4	e	$6..$	$P6/mmm$	e	P_c2z
12	l	1	* $P\bar{6}c2$	l	$m.. P_c3x\bar{x}2yz$	6	f	222	$P6/mmm$	f	$00\frac{1}{4}N_c$
189 $P\bar{6}2m$				6	g	$2/m..$	$P6/mmm$	f			N_c
1	a	$\bar{6}2m$	$P6/mmm$	a	P	8	h	$3..$	$P6/mmm$	h	G_c2z
1	b				$00\frac{1}{2}P$	12	i	$2..$	$P6/mmm$	i	N_c2z
2	c	$\bar{6}..$	$P6/mmm$	c	G	12	j	$.2.$	$P6/mmm$	j	$00\frac{1}{4}P_c6x$
2	d				$00\frac{1}{2}G$	12	k	$..2$	$P6/mmm$	l	$00\frac{1}{4}P_c6x\bar{x}$
<p style="text-align: center;">818</p>											

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.3 (continued)

193 $P6_3/mcm$

2	<i>a</i>	$\bar{6}2m$	$P6/mmm$	a	$00\frac{1}{4}P_c$
2	<i>b</i>	$\bar{3}.m$	$P6/mmm$	a	P_c
4	<i>c</i>	$\bar{6}..$	$P6/mmm$	c	$00\frac{1}{4}G_c$
4	<i>d</i>	3.2	$P6/mmm$	c	G_c
4	<i>e</i>	3. <i>m</i>	$P6/mmm$	e	P_c2z
6	<i>f</i>	..2/ <i>m</i>	$P6/mmm$	f	N_c
6	<i>g</i>	<i>m</i> 2 <i>m</i>	* $P6_3/mcm$	g	$00\frac{1}{4}..2P_c3x$
8	<i>h</i>	3..	$P6/mmm$	h	G_c2z
12	<i>i</i>	..2	$P6/mmm$	l	$P_c6x\bar{x}$
12	<i>j</i>	<i>m</i> ..	* $P6_3/mcm$	j	$00\frac{1}{4}..2P_c3x2y$
12	<i>k</i>	.. <i>m</i>	* $P6_3/mcm$	k	$m..P_c6xz$
24	<i>l</i>	1	* $P6_3/mcm$	l	$m..P_c6xz2y$

194 $P6_3/mmc$

2	<i>a</i>	$\bar{3}.m$	$P6/mmm$	a	P_c
2	<i>b</i>	$\bar{6}m2$	$P6/mmm$	a	$00\frac{1}{4}P_c$
2	<i>c</i>	$\bar{6}m2$	* $P6_3/mmc$	c	E
2	<i>d</i>				$00\frac{1}{2}E$
4	<i>e</i>	3. <i>m</i>	$P6/mmm$	e	P_c2z
4	<i>f</i>	3. <i>m</i>	* $P6_3/mmc$	f	$E2z$
6	<i>g</i>	..2/ <i>m</i>	$P6/mmm$	f	N_c
6	<i>h</i>	<i>mm</i> 2	* $P6_3/mmc$	h	$00\frac{1}{4}.2.P_c3x\bar{x}$
12	<i>i</i>	..2	$P6/mmm$	j	P_c6x
12	<i>j</i>	<i>m</i> ..	* $P6_3/mmc$	j	$00\frac{1}{4}.2.P_c3x\bar{x}2y$
12	<i>k</i>	.. <i>m</i>	* $P6_3/mmc$	k	$m..P_c6x\bar{x}z$
24	<i>l</i>	1	* $P6_3/mmc$	l	$m..P_c6x\bar{x}z2y$

195 $P23$

1	<i>a</i>	23.	$Pm\bar{3}m$	a	P
1	<i>b</i>				$\frac{111}{222}P$
3	<i>c</i>	222..	$Pm\bar{3}m$	c	J
3	<i>d</i>				$\frac{111}{222}J$
4	<i>e</i>	.3.	$P\bar{4}3m$	e	$P4xxx$
6	<i>f</i>	2..	$Pm\bar{3}m$	e	$P6z$
6	<i>i</i>				$\frac{111}{222}P6z$
6	<i>g</i>	2..	$Pm\bar{3}$	f	.3. $J2x$
6	<i>h</i>				$\frac{111}{222}.3. J2x$
12	<i>j</i>	1	* $P23$	j	$P6z2xy$

196 $F23$

4	<i>a</i>	23.	$Fm\bar{3}m$	a	F
4	<i>b</i>				$\frac{111}{222}F$
4	<i>c</i>				$\frac{111}{444}F$
4	<i>d</i>				$\frac{333}{444}F$
16	<i>e</i>	.3.	$F\bar{4}3m$	e	$F4xxx$
24	<i>f</i>	2..	$Fm\bar{3}m$	e	$F6z$
24	<i>g</i>				$\frac{111}{444}F6z$
48	<i>h</i>	1	* $F23$	h	$F6z2xy$

197 $I23$

2	<i>a</i>	23.	$Im\bar{3}m$	a	I
6	<i>b</i>	222..	$Im\bar{3}m$	b	J^*
8	<i>c</i>	.3.	$I\bar{4}3m$	c	$I4xxx$

12	<i>d</i>	2..	$Im\bar{3}m$	e	$I6z$
12	<i>e</i>	2..	$Im\bar{3}$	e	.3. J^*2x
24	<i>f</i>	1	* $I23$	f	$I6z2xy$

198 $P2_13$

4	<i>a</i>	.3.	* $P2_13$	a	$2_12_1..FY1xxx$
12	<i>b</i>	1	* $P2_13$	b	$2_12_1..FY1xxx3yz$

199 $I2_13$

8	<i>a</i>	.3.	* $I2_13$	a	$2_12_1..P_2Y^*1xxx$
12	<i>b</i>	2..	* $I2_13$	b	$2_13.SV1z$
24	<i>c</i>	1	* $I2_13$	c	$2_12_1..P_2Y^*1xxx3yz$

200 $Pm\bar{3}$

1	<i>a</i>	$m\bar{3}.$	$Pm\bar{3}m$	a	P
1	<i>b</i>				$\frac{111}{222}P$
3	<i>c</i>	$mmm..$	$Pm\bar{3}m$	c	J
3	<i>d</i>				$\frac{111}{222}J$
6	<i>e</i>	$mm2..$	$Pm\bar{3}m$	e	$P6z$
6	<i>h</i>				$\frac{111}{222}P6z$
6	<i>f</i>	$mm2..$	* $Pm\bar{3}$	f	.3. $J2x$
6	<i>g</i>				$\frac{111}{222}.3. J2x$
8	<i>i</i>	.3.	$Pm\bar{3}m$	g	$P8xxx$
12	<i>j</i>	<i>m</i> ..	* $Pm\bar{3}$	j	$P6z2x$
12	<i>k</i>				$\frac{111}{222}P6z2x$
24	<i>l</i>	1	* $Pm\bar{3}$	l	$P6z2x2y$

201 $Pn\bar{3}$

2	<i>a</i>	23.	$Im\bar{3}m$	a	I
4	<i>b</i>	. $\bar{3}$.	$Fm\bar{3}m$	a	$\frac{111}{444}F$
4	<i>c</i>				$\frac{333}{444}F$
6	<i>d</i>	222..	$Im\bar{3}m$	b	J^*
8	<i>e</i>	.3.	$Pn\bar{3}m$	e	..2 $I4xxx$
12	<i>f</i>	2..	$Im\bar{3}m$	e	$I6z$
12	<i>g</i>	2..	$Im\bar{3}$	e	.3. J^*2x
24	<i>h</i>	1	* $Pn\bar{3}$	h	$n..I6z2xy$

202 $Fm\bar{3}$

4	<i>a</i>	$m\bar{3}.$	$Fm\bar{3}m$	a	F
4	<i>b</i>				$\frac{111}{222}F$
8	<i>c</i>	23.	$Pm\bar{3}m$	a	$\frac{111}{444}P_2$
24	<i>d</i>	2/ <i>m</i> ..	$Pm\bar{3}m$	c	J_2
24	<i>e</i>	$mm2..$	$Fm\bar{3}m$	e	$F6z$
32	<i>f</i>	.3.	$Fm\bar{3}m$	f	$F8xxx$
48	<i>g</i>	2..	$Pm\bar{3}m$	e	$\frac{111}{444}P_26z$
48	<i>h</i>	<i>m</i> ..	* $Fm\bar{3}$	h	$F6z2x$
96	<i>i</i>	1	* $Fm\bar{3}$	i	$F6z2x2y$

203 $Fd\bar{3}$

8	<i>a</i>	23.	$Fd\bar{3}m$	a	D
8	<i>b</i>				$\frac{111}{222}D$
16	<i>c</i>	. $\bar{3}$.	$Fd\bar{3}m$	c	T
16	<i>d</i>				$\frac{111}{222}T$
32	<i>e</i>	.3.	$Fd\bar{3}m$	e	..2 $D4xxx$

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3 (continued)

48	<i>f</i>	2..	<i>Fd</i> $\bar{3}m$ <i>f</i>	<i>D6z</i>	209 F432				
96	<i>g</i>	1	* <i>Fd</i> $\bar{3}$ <i>g</i>	<i>d.. D6z2xy</i>	4	<i>a</i>	432	<i>Fm</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	<i>F</i>
					4	<i>b</i>			$\frac{111}{222} F$
					8	<i>c</i>	23.	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	$\frac{111}{444} P_2$
204 Im $\bar{3}$					24	<i>d</i>	2.22	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>c</i>	<i>J</i> ₂
2	<i>a</i>	<i>m</i> $\bar{3}$.	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	<i>I</i>	24	<i>e</i>	4..	<i>Fm</i> $\bar{3}m$ <i>e</i>	<i>F6z</i>
6	<i>b</i>	<i>mmm..</i>	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>b</i>	<i>J*</i>	32	<i>f</i>	.3.	<i>Fm</i> $\bar{3}m$ <i>f</i>	<i>F8xxx</i>
8	<i>c</i>	$\bar{3}$.	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	$\frac{111}{444} P_2$	48	<i>g</i>	..2	<i>Fm</i> $\bar{3}m$ <i>h</i>	<i>F12xx</i>
12	<i>d</i>	<i>mm2..</i>	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>e</i>	<i>I6z</i>	48	<i>h</i>			$\frac{111}{222} F12xx$
12	<i>e</i>	<i>mm2..</i>	* <i>Im</i> $\bar{3}$ <i>e</i>	.3. <i>J*2x</i>	48	<i>i</i>	2..	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>e</i>	$\frac{111}{444} P_2 6z$
16	<i>f</i>	.3.	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>f</i>	<i>I8xxx</i>	96	<i>j</i>	1	* <i>F432 j</i>	<i>F6z4xy</i>
24	<i>g</i>	<i>m..</i>	* <i>Im</i> $\bar{3}$ <i>g</i>	<i>I6z2x</i>					
48	<i>h</i>	1	* <i>Im</i> $\bar{3}$ <i>h</i>	<i>I6z2x2y</i>					
					210 F4₁32				
205 Pa $\bar{3}$					8	<i>a</i>	23.	<i>Fd</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	<i>D</i>
4	<i>a</i>	$\bar{3}$.	<i>Fm</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	<i>F</i>	8	<i>b</i>			$\frac{111}{222} D$
4	<i>b</i>			$\frac{111}{222} F$	16	<i>c</i>	.32	<i>Fd</i> $\bar{3}m$ <i>c</i>	<i>T</i>
8	<i>c</i>	.3.	* <i>Pa</i> $\bar{3}$ <i>c</i>	<i>bc.. F2xxx</i>	16	<i>d</i>			$\frac{111}{222} T$
24	<i>d</i>	1	* <i>Pa</i> $\bar{3}$ <i>d</i>	<i>bc.. F6xyz</i>	32	<i>e</i>	.3.	<i>Fd</i> $\bar{3}m$ <i>e</i>	..2 <i>D4xxx</i>
					48	<i>f</i>	2..	<i>Fd</i> $\bar{3}m$ <i>f</i>	<i>D6z</i>
206 Ia $\bar{3}$					48	<i>g</i>	..2	* <i>F4₁32 g</i>	22.. <i>T3x</i> \bar{x}
8	<i>a</i>	$\bar{3}$.	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	<i>P</i> ₂	96	<i>h</i>	1	* <i>F4₁32 h</i>	..2 <i>D6z2xy</i>
8	<i>b</i>			$\frac{111}{444} P_2$					
16	<i>c</i>	.3.	* <i>Ia</i> $\bar{3}$ <i>c</i>	22.. <i>P₂2xxx</i>	211 I432				
24	<i>d</i>	2..	* <i>Ia</i> $\bar{3}$ <i>d</i>	$\bar{3}$. <i>J₂S*V*1x</i>	2	<i>a</i>	432	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	<i>I</i>
48	<i>e</i>	1	* <i>Ia</i> $\bar{3}$ <i>e</i>	22.. <i>P₂6xyz</i>	6	<i>b</i>	42.2	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>b</i>	<i>J*</i>
					8	<i>c</i>	.32	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	$\frac{111}{444} P_2$
207 P432					12	<i>d</i>	2.22	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>d</i>	<i>W*</i>
1	<i>a</i>	432	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	<i>P</i>	12	<i>e</i>	4..	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>e</i>	<i>I6z</i>
1	<i>b</i>			$\frac{111}{222} P$	16	<i>f</i>	.3.	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>f</i>	<i>I8xxx</i>
3	<i>c</i>	42.2	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>c</i>	<i>J</i>	24	<i>g</i>	2..	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>g</i>	.3. <i>J*4x</i>
3	<i>d</i>			$\frac{111}{222} J$	24	<i>h</i>	..2	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>h</i>	<i>I12xx</i>
6	<i>e</i>	4..	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>e</i>	<i>P6z</i>	24	<i>i</i>	..2	* <i>I432 i</i>	$\frac{111}{444} 4.. P_2 3x$ \bar{x}
6	<i>f</i>			$\frac{111}{222} P6z$	48	<i>j</i>	1	* <i>I432 j</i>	<i>I6z4xy</i>
8	<i>g</i>	.3.	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>g</i>	<i>P8xxx</i>					
12	<i>h</i>	2..	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>h</i>	.3. <i>J4x</i>	212 P4₃32				
12	<i>i</i>	..2	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>i</i>	<i>P12xx</i>	4	<i>a</i>	.32	* <i>P4₃32 a</i>	+ <i>Y</i>
12	<i>j</i>			$\frac{111}{222} P12xx$	4	<i>b</i>			$\frac{111}{222} +Y$
24	<i>k</i>	1	* <i>P432 k</i>	<i>P6z4xy</i>	8	<i>c</i>	.3.	* <i>P4₃32 c</i>	4 ₃ .. + <i>Y2xxx</i>
					12	<i>d</i>	..2	* <i>P4₃32 d</i>	4 ₃ .. + <i>Y3x</i> \bar{x}
					24	<i>e</i>	1	* <i>P4₃32 e</i>	4 ₃ .. + <i>Y3x</i> $\bar{x}2yz$
208 P4₂32									
2	<i>a</i>	23.	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	<i>I</i>	213 P4₁32				
4	<i>b</i>	.32	<i>Fm</i> $\bar{3}m$ <i>a</i>	$\frac{111}{444} F$	4	<i>a</i>	.32	* <i>P4₃32 a</i>	$\frac{111}{222} -Y$
4	<i>c</i>			$\frac{333}{444} F$	4	<i>b</i>			- <i>Y</i>
6	<i>d</i>	222..	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>b</i>	<i>J*</i>	8	<i>c</i>	.3.	* <i>P4₃32 c</i>	4 ₁ .. - <i>Y2xxx</i>
6	<i>e</i>	2.22	<i>Pm</i> $\bar{3}n$ <i>c</i>	<i>W</i>	12	<i>d</i>	..2	* <i>P4₃32 d</i>	4 ₁ .. - <i>Y3x</i> \bar{x}
6	<i>f</i>			$\frac{111}{222} W$	24	<i>e</i>	1	* <i>P4₃32 e</i>	4 ₁ .. - <i>Y3x</i> $\bar{x}2yz$
8	<i>g</i>	.3.	<i>Pm</i> $\bar{3}m$ <i>e</i>	..2 <i>I4xxx</i>					
12	<i>h</i>	2..	<i>Im</i> $\bar{3}m$ <i>e</i>	<i>I6z</i>	214 I4₁32				
12	<i>i</i>	2..	<i>Pm</i> $\bar{3}n$ <i>g</i>	.3. <i>W2z</i>	8	<i>a</i>	.32	* <i>I4₁32 a</i>	+ <i>Y*</i>
12	<i>j</i>			$\frac{111}{222}$.3. <i>W2z</i>	8	<i>b</i>			- <i>Y*</i>
12	<i>k</i>	..2	* <i>P4₂32 k</i>	$\frac{111}{444} 4_2.. F3x$ \bar{x}	12	<i>c</i>	2.22	* <i>I4₁32 c</i>	+ <i>V</i>
12	<i>l</i>			$\frac{333}{444} 4_2.. F3x$ \bar{x}	12	<i>d</i>			- <i>V</i>
24	<i>m</i>	1	* <i>P4₂32 m</i>	..2 <i>I6z2xy</i>	16	<i>e</i>	.3.	* <i>I4₁32 e</i>	22.. <i>Y*2xxx</i>

3.4. LATTICE COMPLEXES

Table 3.4.3.3 (continued)

24	<i>f</i>	2..	*	$I\bar{4}_132 f$.3. $V2z$	32	<i>e</i>	.3.	$P\bar{4}3m e$	P_24xxx	
24	<i>h</i>	..2	*	$I\bar{4}_132 h$	$4_{3..} + Y^*3x\bar{x}$	48	<i>f</i>	2..	$Pm\bar{3}m e$	P_26z	
24	<i>g</i>				$4_{1..} - Y^*3x\bar{x}$	48	<i>g</i>			$\frac{111}{444} P_26z$	
48	<i>i</i>	1	*	$I\bar{4}_132 i$	$22.. Y^*3x\bar{x}2yz$	96	<i>h</i>	1	*	$F\bar{4}3c h$	$..n P_26z2xy$
215 $P\bar{4}3m$						220 $I\bar{4}3d$					
1	<i>a</i>	$\bar{4}3m$		$Pm\bar{3}m a$	P	12	<i>a</i>	$\bar{4}..$	*	$I\bar{4}3d a$	S
1	<i>b</i>				$\frac{111}{222} P$	12	<i>b</i>				S
3	<i>c</i>	$\bar{4}2.m$		$Pm\bar{3}m c$	J	16	<i>c</i>	.3.	*	$I\bar{4}3d c$	$\bar{4}.. I_2Y^{**}1xxx$
3	<i>d</i>				$\frac{111}{222} J$	24	<i>d</i>	2..	*	$I\bar{4}3d d$.3. $S2z$
4	<i>e</i>	.3m	*	$P\bar{4}3m e$	$P4xxx$	48	<i>e</i>	1	*	$I\bar{4}3d e$.3d $S4xyz$
6	<i>f</i>	2.mm		$Pm\bar{3}m e$	$P6z$	221 $Pm\bar{3}m$					
6	<i>g</i>				$\frac{111}{222} P6z$	1	<i>a</i>	$m\bar{3}m$	*	$Pm\bar{3}m a$	P
12	<i>h</i>	2..		$Pm\bar{3}m h$.3. $J4x$	1	<i>b</i>				$\frac{111}{222} P$
12	<i>i</i>	..m	*	$P\bar{4}3m i$	$P6z2xx$	3	<i>c</i>	$4/mm.m$	*	$Pm\bar{3}m c$	J
24	<i>j</i>	1	*	$P\bar{4}3m j$	$P6z2xx2y$	3	<i>d</i>				$\frac{111}{222} J$
216 $F\bar{4}3m$						6	<i>e</i>	$4m.m$	*	$Pm\bar{3}m e$	$P6z$
4	<i>a</i>	$\bar{4}3m$		$Fm\bar{3}m a$	F	6	<i>f</i>				$\frac{111}{222} P6z$
4	<i>b</i>				$\frac{111}{222} F$	8	<i>g</i>	.3m	*	$Pm\bar{3}m g$	$P8xxx$
4	<i>c</i>				$\frac{111}{444} F$	12	<i>h</i>	$mm2..$	*	$Pm\bar{3}m h$.3. $J4x$
4	<i>d</i>				$\frac{333}{444} F$	12	<i>i</i>	$m.m2$	*	$Pm\bar{3}m i$	$P12xx$
16	<i>e</i>	.3m	*	$F\bar{4}3m e$	$F4xxx$	12	<i>j</i>				$\frac{111}{222} P12xx$
24	<i>f</i>	2.mm		$Fm\bar{3}m e$	$F6z$	24	<i>k</i>	$m..$	*	$Pm\bar{3}m k$	$P6z4x$
24	<i>g</i>				$\frac{111}{444} F6z$	24	<i>l</i>				$\frac{111}{222} P6z4x$
48	<i>h</i>	..m	*	$F\bar{4}3m h$	$F6z2xx$	24	<i>m</i>	..m	*	$Pm\bar{3}m m$	$P6z4xx$
96	<i>i</i>	1	*	$F\bar{4}3m i$	$F6z2xx2y$	48	<i>n</i>	1	*	$Pm\bar{3}m n$	$P6z4x2y$
217 $I\bar{4}3m$						222 $Pn\bar{3}n$					
2	<i>a</i>	$\bar{4}3m$		$Im\bar{3}m a$	I	2	<i>a</i>	432		$Im\bar{3}m a$	I
6	<i>b</i>	$\bar{4}2.m$		$Im\bar{3}m b$	J^*	6	<i>b</i>	42.2		$Im\bar{3}m b$	J^*
8	<i>c</i>	.3m	*	$I\bar{4}3m c$	$I4xxx$	8	<i>c</i>	. $\bar{3}$.		$Pm\bar{3}m a$	$\frac{111}{444} P_2$
12	<i>d</i>	$\bar{4}..$		$Im\bar{3}m d$	W^*	12	<i>d</i>	$\bar{4}..$		$Im\bar{3}m d$	W^*
12	<i>e</i>	2.mm		$Im\bar{3}m e$	$I6z$	12	<i>e</i>	4..		$Im\bar{3}m e$	$I6z$
24	<i>f</i>	2..		$Im\bar{3}m g$.3. J^*4x	16	<i>f</i>	.3.		$Im\bar{3}m f$	$I8xxx$
24	<i>g</i>	..m	*	$I\bar{4}3m g$	$I6z2xx$	24	<i>g</i>	2..		$Im\bar{3}m g$.3. J^*4x
48	<i>h</i>	1	*	$I\bar{4}3m h$	$I6z2xx2y$	24	<i>h</i>	..2		$Im\bar{3}m h$	$I12xx$
218 $P\bar{4}3n$						48	<i>i</i>	1	*	$Pn\bar{3}n i$	$n.. I6z4xy$
2	<i>a</i>	23.		$Im\bar{3}m a$	I	223 $Pm\bar{3}n$					
6	<i>b</i>	222..		$Im\bar{3}m b$	J^*	2	<i>a</i>	$m\bar{3}$.		$Im\bar{3}m a$	I
6	<i>c</i>	$\bar{4}..$		$Pm\bar{3}n c$	$\frac{111}{222} W$	6	<i>b</i>	$mmm..$		$Im\bar{3}m b$	J^*
6	<i>d</i>				W	6	<i>c</i>	$\bar{4}m.2$	*	$Pm\bar{3}n c$	W
8	<i>e</i>	.3.		$I\bar{4}3m c$	$I4xxx$	6	<i>d</i>				$\frac{111}{222} W$
12	<i>f</i>	2..		$Im\bar{3}m e$	$I6z$	8	<i>e</i>	.32		$Pm\bar{3}m a$	$\frac{111}{444} P_2$
12	<i>g</i>	2..		$Pm\bar{3}n g$	$\frac{111}{222} .3. W2z$	12	<i>f</i>	$mm2..$		$Im\bar{3}m e$	$I6z$
12	<i>h</i>				.3. $W2z$	12	<i>g</i>	$mm2..$	*	$Pm\bar{3}n g$.3. $W2z$
24	<i>i</i>	1	*	$P\bar{4}3n i$..c $I6z2xy$	12	<i>h</i>				$\frac{111}{222} .3. W2z$
219 $F\bar{4}3c$						16	<i>i</i>	.3.		$Im\bar{3}m f$	$I8xxx$
8	<i>a</i>	23.		$Pm\bar{3}m a$	P_2	24	<i>j</i>	..2	*	$Pm\bar{3}n j$.3. $W4xx$
8	<i>b</i>				$\frac{111}{444} P_2$	24	<i>k</i>	$m..$	*	$Pm\bar{3}n k$..2 $I6z2x$
24	<i>c</i>	$\bar{4}..$		$Pm\bar{3}m c$	J_2	48	<i>l</i>	1	*	$Pm\bar{3}n l$..2 $I6z2x2y$
24	<i>d</i>				$\frac{111}{444} J_2$						

3. ADVANCED TOPICS ON SPACE-GROUP SYMMETRY

Table 3.4.3.3 (continued)

224 Pn$\bar{3}m$					227 Fd$\bar{3}m$				
2	<i>a</i>	$\bar{4}3m$	<i>Im$\bar{3}m$ a</i>	<i>I</i>	8	<i>a</i>	$\bar{4}3m$	* <i>Fd$\bar{3}m$ a</i>	<i>D</i>
4	<i>b</i>	$\bar{3}m$	<i>Fm$\bar{3}m$ a</i>	$\frac{111}{444} F$	8	<i>b</i>			$\frac{111}{222} D$
4	<i>c</i>			$\frac{333}{444} F$	16	<i>c</i>	$\bar{3}m$	* <i>Fd$\bar{3}m$ c</i>	<i>T</i>
6	<i>d</i>	$\bar{4}2.m$	<i>Im$\bar{3}m$ b</i>	<i>J*</i>	16	<i>d</i>			$\frac{111}{222} T$
8	<i>e</i>	$.3m$	* <i>Pn$\bar{3}m$ e</i>	$..2 I4xxx$	32	<i>e</i>	$.3m$	* <i>Fd$\bar{3}m$ e</i>	$..2 D4xxx$
12	<i>f</i>	2.22	<i>Im$\bar{3}m$ d</i>	<i>W*</i>	48	<i>f</i>	$2.mm$	* <i>Fd$\bar{3}m$ f</i>	<i>D6z</i>
12	<i>g</i>	$2.mm$	<i>Im$\bar{3}m$ e</i>	<i>I6z</i>	96	<i>g</i>	$.m$	* <i>Fd$\bar{3}m$ g</i>	$..2 D6z2xx$
24	<i>h</i>	$2..$	<i>Im$\bar{3}m$ g</i>	$.3. J^*4x$	96	<i>h</i>	$..2$	* <i>Fd$\bar{3}m$ h</i>	$4.. T6x\bar{x}$
24	<i>i</i>	$..2$	* <i>Pn$\bar{3}m$ i</i>	$\frac{111}{444} 4.. F6x\bar{x}$	192	<i>i</i>	1	* <i>Fd$\bar{3}m$ i</i>	$..2 D6z2xx2y$
24	<i>j</i>			$\frac{333}{444} 4.. F6x\bar{x}$					
24	<i>k</i>	$.m$	* <i>Pn$\bar{3}m$ k</i>	$..2 I6z2xx$	228 Fd$\bar{3}c$				
48	<i>l</i>	1	* <i>Pn$\bar{3}m$ l</i>	$..2 I6z2xx2y$	16	<i>a</i>	23.	<i>Im$\bar{3}m$ a</i>	<i>I₂</i>
					32	<i>b</i>	$.32$	<i>Fm$\bar{3}m$ a</i>	$\frac{111}{888} F_2$
					32	<i>c</i>	$\bar{3}.$	<i>Fm$\bar{3}m$ a</i>	$\frac{333}{888} F_2$
					48	<i>d</i>	$\bar{4}..$	<i>Im$\bar{3}m$ b</i>	<i>J₂*</i>
					64	<i>e</i>	$.3.$	<i>Pn$\bar{3}m$ e</i>	$(..2 I4xxx)_2$
					96	<i>f</i>	$2..$	<i>Im$\bar{3}m$ e</i>	<i>I₂6z</i>
					96	<i>g</i>	$..2$	* <i>Fd$\bar{3}c$ g</i>	$\frac{111}{888} \bar{4}2.. F_2 3x\bar{x}$
					192	<i>h</i>	1	* <i>Fd$\bar{3}c$ h</i>	<i>d.2 I₂6z2xy</i>
225 Fm$\bar{3}m$					229 Im$\bar{3}m$				
4	<i>a</i>	$m\bar{3}m$	* <i>Fm$\bar{3}m$ a</i>	<i>F</i>	2	<i>a</i>	$m\bar{3}m$	* <i>Im$\bar{3}m$ a</i>	<i>I</i>
4	<i>b</i>			$\frac{111}{222} F$	6	<i>b</i>	$4/mm.m$	* <i>Im$\bar{3}m$ b</i>	<i>J*</i>
8	<i>c</i>	$\bar{4}3m$	<i>Pm$\bar{3}m$ a</i>	$\frac{111}{444} P_2$	8	<i>c</i>	$\bar{3}m$	<i>Pm$\bar{3}m$ a</i>	$\frac{111}{444} P_2$
24	<i>d</i>	$m.mm$	<i>Pm$\bar{3}m$ c</i>	<i>J₂</i>	12	<i>d</i>	$\bar{4}m.2$	* <i>Im$\bar{3}m$ d</i>	<i>W*</i>
24	<i>e</i>	$4m.m$	* <i>Fm$\bar{3}m$ e</i>	<i>F6z</i>	12	<i>e</i>	$4m.m$	* <i>Im$\bar{3}m$ e</i>	<i>I6z</i>
32	<i>f</i>	$.3m$	* <i>Fm$\bar{3}m$ f</i>	<i>F8xxx</i>	16	<i>f</i>	$.3m$	* <i>Im$\bar{3}m$ f</i>	<i>I8xxx</i>
48	<i>g</i>	$2.mm$	<i>Pm$\bar{3}m$ e</i>	$\frac{111}{444} P_2 6z$	24	<i>g</i>	$mm2..$	* <i>Im$\bar{3}m$ g</i>	$.3. J^*4x$
48	<i>h</i>	$m.m2$	* <i>Fm$\bar{3}m$ h</i>	<i>F12xx</i>	24	<i>h</i>	$m.m2$	* <i>Im$\bar{3}m$ h</i>	<i>I12xx</i>
48	<i>i</i>			$\frac{111}{222} F12xx$	48	<i>i</i>	$..2$	* <i>Im$\bar{3}m$ i</i>	$\frac{111}{444} 4.. P_2 6x\bar{x}$
96	<i>j</i>	$m..$	* <i>Fm$\bar{3}m$ j</i>	<i>F6z4x</i>	48	<i>j</i>	$m..$	* <i>Im$\bar{3}m$ j</i>	<i>I6z4x</i>
96	<i>k</i>	$.m$	* <i>Fm$\bar{3}m$ k</i>	<i>F6z4xx</i>	48	<i>k</i>	$.m$	* <i>Im$\bar{3}m$ k</i>	<i>I6z4xx</i>
192	<i>l</i>	1	* <i>Fm$\bar{3}m$ l</i>	<i>F6z4x2y</i>	96	<i>l</i>	1	* <i>Im$\bar{3}m$ l</i>	<i>I6z4x2y</i>
226 Fm$\bar{3}c$					230 Ia$\bar{3}d$				
8	<i>a</i>	432	<i>Pm$\bar{3}m$ a</i>	$\frac{111}{444} P_2$	16	<i>a</i>	$\bar{3}.$	<i>Im$\bar{3}m$ a</i>	<i>I₂</i>
8	<i>b</i>	$m\bar{3}.$	<i>Pm$\bar{3}m$ a</i>	<i>P₂</i>	16	<i>b</i>	$.32$	* <i>Ia$\bar{3}d$ b</i>	<i>Y**</i>
24	<i>c</i>	$\bar{4}m.2$	<i>Pm$\bar{3}m$ c</i>	$\frac{111}{444} J_2$	24	<i>c</i>	2.22	* <i>Ia$\bar{3}d$ c</i>	<i>V*</i>
24	<i>d</i>	$4/m..$	<i>Pm$\bar{3}m$ c</i>	<i>J₂</i>	24	<i>d</i>	$\bar{4}..$	* <i>Ia$\bar{3}d$ d</i>	<i>S*</i>
48	<i>e</i>	$mm2..$	<i>Pm$\bar{3}m$ e</i>	<i>P₂6z</i>	32	<i>e</i>	$.3.$	* <i>Ia$\bar{3}d$ e</i>	$\bar{4}.. Y^{**}2xxx$
48	<i>f</i>	$4..$	<i>Pm$\bar{3}m$ e</i>	$\frac{111}{444} P_2 6z$	48	<i>f</i>	$2..$	* <i>Ia$\bar{3}d$ f</i>	$.3. S^*2z$
64	<i>g</i>	$.3.$	<i>Pm$\bar{3}m$ g</i>	<i>P₂8xxx</i>	48	<i>g</i>	$..2$	* <i>Ia$\bar{3}d$ g</i>	$\bar{4}a.. Y^{**}3x\bar{x}$
96	<i>h</i>	$..2$	<i>Pm$\bar{3}m$ i</i>	$\frac{111}{444} P_2 12xx$	96	<i>h</i>	1	* <i>Ia$\bar{3}d$ h</i>	$\bar{4}a.. I_2 6xyz$
96	<i>i</i>	$m..$	* <i>Fm$\bar{3}c$ i</i>	$..2 P_2 6z2x$					
192	<i>j</i>	1	* <i>Fm$\bar{3}c$ j</i>	$..2 P_2 6z2x2y$					

3.4. LATTICE COMPLEXES

crystal structures (Smirnova, 1962), of Patterson diagrams (Koch & Hellner, 1971), of Dirichlet domains (Koch, 1973, 1984) and of sphere packings for subperiodic groups (Koch & Fischer, 1978b).

The 30 lattice complexes in two-dimensional space correspond uniquely to the 'henomeric types of dot pattern' introduced by Grünbaum and Shephard (*cf. e.g.* Grünbaum & Shephard, 1981; Grünbaum, 1983).

3.4.4.2. Relations between crystal structures

Different crystal structures frequently show the same geometrical arrangement for some of their atoms, even though their space groups do not belong to the same type. In such cases, the corresponding Wyckoff positions either belong to the same lattice complex or there exists a close relationship between them, *e.g.* a limiting-complex relation.

Examples

- (1) The Fe atoms in pyrite FeS_2 occupy Wyckoff position $4a \bar{3}. 0, 0, 0$ of $Pa\bar{3}$ (descriptive symbol F) that belongs to the invariant lattice complex $Fm\bar{3}m a$. Accordingly, the Fe atoms in pyrite form a face-centred cubic lattice, as do the Cu atoms in the element structure of copper.
- (2) Cuprite Cu_2O crystallizes with symmetry $Pn\bar{3}m$. The oxygen atoms occupy Wyckoff position $2a \bar{4}3m 0, 0, 0$ (descriptive symbol I) and the copper atoms position $4b \bar{3}m \frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ (descriptive symbol $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} F$). Position $2a$ belongs to lattice complex $Im\bar{3}m a$ and position $4b$ to $Fm\bar{3}m a$. Therefore, the O atoms form a body-centred cubic lattice like the W atoms in the structure of tungsten, and the copper atoms form a face-centred cubic lattice. The tungsten configuration is shifted by $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ with respect to the copper configuration.
- (3) K_2NaAlF_6 (elpasolite, *cf.* Morss, 1974) and $\text{K}_2\text{PbNi}(\text{NO}_2)_6$ (*cf.* Takagi *et al.*, 1975) crystallize with symmetry $Fm\bar{3}m$ and $Fm\bar{3}$, respectively.

K_2NaAlF_6				
Al	4a	$m\bar{3}m$	0, 0, 0	F
Na	4b	$m\bar{3}m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} F$
K	8c	$\bar{4}3m$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$
F	24e	$4m.m$	$x, 0, 0$	$F6z$
			$x = 0.219$	

$\text{K}_2\text{PbNi}(\text{NO}_2)_6$				
Ni	4a	$m\bar{3}$.	0, 0, 0	F
Pb	4b	$m\bar{3}$.	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} F$
K	8c	23.	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$
N	24e	$mm2..$	$x, 0, 0$	$F6z$
			$x = 0.1966$	
O	48h	$m..$	0, y, z	$F6z2x$

As the descriptive lattice-complex symbols for the various atomic positions show immediately, the two crystal structures are very similar. The only difference originates from the replacement of the fluorine atoms in elpasolite by NO_2 groups in $\text{K}_2\text{PbNi}(\text{NO}_2)_6$, which causes the symmetry reduction from $Fm\bar{3}m$ to $Fm\bar{3}$.

- (4) The crystal structure of CoU (Baenziger *et al.*, 1950) may be interpreted as a slightly distorted CsCl (or β -brass, CuZn)-type structure. CsCl corresponds to Wyckoff posi-

tions $1a$ and $1b$ of $Pm\bar{3}m$ with descriptive symbols P and $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} P$, respectively; Co and U both occupy Wyckoff position $8a .3. x, x, x$ of $I2_13$ with $x = 0.0347$ for U and $x = 0.294$ for Co. As the descriptive symbol $2_12_1.. P_2 Y^* 1xxx$ shows, this Wyckoff position belongs to a Weissenberg complex with two invariant limiting complexes, namely $P (Pm\bar{3}m a)$ and $Y^* (I4_132 a)$. $x = 0$ corresponds to P_2 , $x = \frac{1}{4}$ to $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$, $x = \frac{1}{8}$ to $^+Y^*$ and $x = \frac{7}{8}$ to $^-Y^*$. Consequently, the uranium and cobalt atoms form approximately a P_2 and a $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} P_2$ configuration, respectively.

Publications by Hellner (1965, 1976a,b,c, 1977, 1979), Loeb (1970), Smirnova & Vasserman (1971), Sakamoto & Takahasi (1971), Niggli (1971), Fischer & Koch (1974b), Hellner *et al.* (1981) and Hellner & Sowa (1985) refer to this aspect.

3.4.4.3. Reflection conditions

Wyckoff positions belonging to the same lattice complex show analogous reflection conditions. Therefore, lattice complexes have also been used to check the reflection conditions for all Wyckoff positions in the space-group tables of this volume.

Example

The lattice complex oF consists of all face-centred point lattices with orthorhombic symmetry. For its characteristic Wyckoff position $Fmmm 4a$, only the general conditions for reflections hkl in space group $Fmmm$ are valid, namely $h + k, h + l, k + l = 2n$ (*cf.* Chapter 2.3). The non-characteristic Wyckoff position $Ccce 4a$ also belongs to this lattice complex. The general reflection condition for $Ccce$ is $hkl: h + k = 2n$. This has to be combined with $k + l = 2n$, the special condition for Wyckoff position a . Together the two conditions produce $h + l = 2n$, the third condition for a face-centred point lattice.

The descriptive symbols may supply information on the reflection conditions. If the symbol does not contain any distribution-symmetry part, the reflection conditions of the Wyckoff position are indicated by the symbol of the invariant lattice complex in the central part (*e.g.* $P4/nmm g: C4xx$ shows that the reflection condition is that of a C lattice, $hkl: h + k = 2n$). In cases where the site set consists of only one point, *i.e.* the Wyckoff position belongs to a Weissenberg complex, all conditions for general reflections hkl that may arise from special choices of the coordinates can be read from the central part of the symbol (*e.g.* $P4/nmm c: 0\frac{1}{2}0 ..2 CI1z$ indicates that, by special choice of z , either $hkl: h + k = 2n$ or $hkl: h + k + l = 2n$ may be produced).

3.4.4.4. Phase transitions

If a crystal undergoes a phase transition from a high- to a low-symmetry modification, the transition may be connected with a group-subgroup transition. In such cases, the comparison of the lattice complexes corresponding to the Wyckoff positions of the original space group on the one hand and of its various subgroups on the other hand very often shows which of these subgroups are suitable for the low-symmetry modification.

This kind of procedure will be demonstrated with the aid of the space group $R\bar{3}m$ and its three *translationengleiche* subgroups with index 2, namely $R32$, $R\bar{3}$ and $R3m$. In the course of the restriction to a subgroup, the Wyckoff positions of $R\bar{3}m$ behave differently: