

The crystal structure of cascandite, $\text{CaScSi}_3\text{O}_8(\text{OH})$

MARCELLO MELLINI AND STEFANO MERLINO

*Istituto di Mineralogia e Petrografia, Università di Pisa
and C.N.R., C.S. Geologia Strutturale e Dinamica dell'Appennino
via S. Maria 53, 56100 Pisa, Italy*

Abstract

A new pyroxenoid mineral, cascandite, with the ideal formula $\text{CaScSi}_3\text{O}_8(\text{OH})$, is triclinic with $a = 9.791(8)\text{\AA}$, $b = 10.420(9)\text{\AA}$, $c = 7.076(6)\text{\AA}$, $\alpha = 98.91(8)^\circ$, $\beta = 102.63(8)^\circ$, $\gamma = 84.17(8)^\circ$; $Z = 4$ for the $C\bar{1}$ unit cell setting. The crystal structure of cascandite is similar to those of pectolite and serandite and is composed of two main structural units: octahedral chains and three repeat tetrahedral chains. Cascandite, unlike pectolite and serandite, has only two octahedral cations per formula unit, and the octahedral chains are formed by two strands of edge-sharing octahedra occupied by calcium and scandium cations.

Cascandite is a member of the hydrous pyroxenoid series, whose peculiarities are related to the presence of intrachain hydrogen bonding.

Introduction

Cascandite, a new scandium silicate, was found in a geode from the granite of Baveno, Italy, together with quartz, orthoclase, albite and jervite, another new scandium silicate with ideal formula $\text{NaScSi}_2\text{O}_6$. The descriptions of these new minerals are given by Mellini *et al.* (1982). The chemical, physical and crystallographic properties indicate that cascandite is a three-repeat pyroxenoid.

The present structural study was undertaken to give a better description of the new scandium mineral and to acquire a deeper insight into the crystal chemistry of pyroxenoids.

Structure determination

A small crystal of cascandite was selected and examined first by X-ray film methods. Triclinic cell parameters (Table 1) were obtained by least squares refinement using 25 reflections centered on a Philips PW 1100 single crystal diffractometer with graphite monochromatized $\text{MoK}\alpha$ radiation. A total of 1526 non-zero reflections were measured from 3 to $30^\circ 2\theta$, using a $\theta/2\theta$ scan and scan width 1.20° . The data were corrected for Lorentz and polarization factors. No absorption correction was made because of the small dimensions of the crystal.

Only qualitative energy dispersive analytical data were available when the structure determination was undertaken. The solution of the structure was

obtained starting from the atomic coordinates of wollastonite based on $P\bar{1}$ setting, as given by Buerger and Prewitt (1961). However the E statistics indicated a non-centrosymmetric structure, and thus we removed the symmetry constraints on the octahedral cations. We assumed that one of the six octahedral sites in the unit cell of the trial structure was vacant and the site that had been centrosymmetrically related was occupied by a scandium cation, as suggested by the preliminary analytical data. Four refinement cycles were calculated, each followed by a Fourier synthesis. The behavior of the thermal parameters and the heights of the various peaks in the Fourier maps strongly indicated that one more octahedral site had to be considered vacant and that two silicon atoms had to be shifted from their positions in the trial structure. The new structural arrangement smoothly refined to an $R_1 = \frac{\sum ||F_o| - |F_c||}{\sum |F_o|} = 0.08$.

We then realized that the arrangement was indeed a centrosymmetric one, closely related to that in minerals of the pectolite-serandite series. The false indication of the absence of a symmetry center most probably resulted from not having taken into account the "unobserved" reflections. The refinement was then continued in the $P\bar{1}$ space group. The introduction of anisotropic thermal parameters for all atoms led to $R_1 = 0.042$ and $R_2 = \frac{\sum w ||F_o| - |F_c||^2}{\sum w |F_o|^2} = 0.046$, where w was the reciprocal of the variance on F_o as estimated from

-10,-10,L

3 324 322
5 217 225

-9,-11,L

0 210 226
1 281 -263
2 510 -479
3 360 358
4 103 -165
5 292 304

-9,-9,L

2 479 491
4 285 -269
6 232 -217
7 254 256

-8,-12,L

0 228 -212
1 578 556
2 217 228

-8,-10,L

-2 538 -543
0 221 -211
1 304 290
2 469 -455
3 571 572
4 370 363
5 197 -202
6 176 212
7 444 -479

-8,-8,L

1 308 -283
3 268 273
4 508 -502
5 233 -227
6 287 280
7 228 -187
8 269 281

-7,-13,L

1 284 275
3 559 593
4 189 164

-7,-11,L

-2 382 389
2 261 244
3 455 -456
4 357 -373

-7,-9,L

-3 239 245
-2 198 -174
-1 202 235
0 698 716
1 126 -142
2 329 329
3 752 -753
5 707 -708
6 448 -454
7 335 -307

-7,-7,L

4 316 308
5 542 -551
6 538 520
7 159 151

-6,-12,L

-1 534 541
0 320 317
1 341 -339
2 527 549
3 485 -494
5 426 -438

-6,-10,L

-4 232 224
-3 213 -223
-2 498 508
-1 263 -249
0 366 -369
2 163 -157

3 192 -141
6 537 586
7 277 -275

-6,-8,L

-4 752 768
-3 205 183
-2 645 616
-1 364 -360
1 188 -202
2 818 -833
3 354 -356
4 326 -311
5 622 609
7 311 301
8 562 544

-6,-6,L

1 493 -478
2 225 -287
3 246 276
4 149 -156
6 359 -352
7 567 543
8 297 -278

-5,-13,L

-1 472 -458
0 266 -244
2 338 -362
4 355 352
5 179 211

-5,-11,L

-2 242 243
-1 328 -312
1 649 -670
2 231 -212
4 372 -353
5 485 490
7 417 427

-5,-9,L

-4 362 -380
-3 406 439

-5,-9,L

-2	280	-262
-1	290	303
0	193	-177
1	318	318
2	587	571
4	269	282
5	148	142
6	280	-305
7	204	186
8	684	-713

-5,-7,L

-6	489	473
-5	158	-161
-3	127	117
-2	1020	-1029
0	917	-924
1	847	826
3	318	321
4	944	950
5	278	278

-5,-5,L

2	1055	-1037
3	601	558
4	411	-364
5	269	-312
6	178	154
8	283	287
9	284	-274

-4,-14,L

0	159	-130
1	258	-282
3	218	-238
4	282	-312

-4,-12,L

-3	198	224
-2	582	-591
0	183	159
1	193	171
4	142	145
6	587	-590

-4,-10,L

-3	507	-500
-2	454	-443
0	462	-470
1	520	529
3	746	769
4	427	412
7	191	174
8	241	-210

-4,-8,L

-6	256	-288
-5	157	202
-4	372	-357
-3	170	181
-2	119	154
-1	139	-85
0	339	368
2	111	101
3	281	276
4	646	-606
5	632	629
6	276	292

-4,-6,L

-6	535	-529
-5	169	-160
-4	797	-793
-3	420	409
-1	132	146
0	1170	1178
1	244	247
2	453	418
3	493	-460
4	150	169
5	603	-607
6	832	-808
7	235	-206
8	311	-309
9	204	-170

-4,-4,L

1	117	-118
2	555	555
3	221	-214
4	871	816

5	888	-838
6	425	390
7	398	-361
8	371	-340
9	354	-336

-3,-13,L

0	495	-478
1	490	480
2	199	-200
3	481	482
4	247	-261
5	283	254

-3,-11,L

-3	320	312
-2	191	183
-1	212	-232
0	418	407
2	573	-559
4	352	-381
5	331	320
6	346	-343

-3,-9,L

-6	466	-428
-4	445	-461
-3	105	121
-2	302	-284
-1	545	596
0	644	663
1	195	-179
2	500	505
4	283	279
5	652	-668
6	386	-384
7	173	178
8	168	-180

-3,-7,L

-7	180	-176
-5	389	-375
-3	388	-392
0	531	-520

-3,-7,L

1	107	39
2	528	532
4	315	307
5	378	-359
6	834	820
7	692	-680
8	134	-115

-3,-5,L

-4	952	976
-3	352	377
-2	982	960
-1	136	-138
0	625	635
1	288	-287
2	584	-565
3	428	-450
4	148	-95
5	251	-286
7	165	-151
8	524	522
9	195	156

-3,-3,L

1	837	-786
2	1492	1386
3	495	-457
4	622	-577
5	328	-317
6	908	-839
7	415	409
8	207	-205
9	232	221

-2,-14,L

-1	238	200
0	314	309
1	278	-284
2	198	-209
4	185	-228

-2,-12,L

-4	314	-296
-3	230	229

-2	179	152
-1	560	560
1	305	290
2	496	500
3	215	-233
5	827	-848

-2,-10,L

-5	420	-401
-4	458	475
-1	216	-215
0	167	-170
1	276	275
3	327	-339
4	427	424
5	144	-134
6	371	382
7	554	-554
8	385	389

-2,-8,L

-6	316	-316
-5	348	374
-4	515	505
-3	220	-244
-2	524	511
-1	571	-563
0	767	763
1	1240	-1260
2	971	-861
4	677	-659
5	349	-383
7	422	389
8	669	677

-2,-6,L

-7	377	-378
-5	201	213
-4	411	-414
-2	676	693
-1	373	372
0	331	341
1	451	-431
2	1406	1369
3	759	-736
4	710	-732
5	97	90

6	414	-390
7	565	547
8	576	-551
9	436	440

-2,-4,L

-8	315	298
-6	660	669
-5	209	-225
-4	151	78
-3	463	478
-2	741	-737
1	287	290
2	366	317
4	546	508
5	1107	1102
6	271	242
7	238	240
9	518	498

-2,-2,L

1	238	-242
2	2400	-2309
3	271	229
4	648	-587
5	261	271
6	158	144
7	650	670
8	483	506
9	187	-177

-1,-13,L

-3	362	-333
2	193	-221
4	342	336
5	242	-234

-1,-11,L

-5	353	338
-4	322	302
-2	766	769
-1	74	-39
0	287	301
1	791	-783
3	148	-139

	-1,-11,L	8 393 377	0 971 -969
		9 293 -298	2 176 -157
4	529 -525		3 869 876
6	374 330	-1,-2,L	4 211 207
7	492 502		5 306 295
	-1,-9,L	-7 290 296	6 600 617
		-6 616 -606	7 186 -198
		-4 1118 -1130	
-5	180 -203	-3 666 662	0,-8,L
-4	160 -172	-2 325 -338	
-3	242 236	-1 780 -788	-7 435 414
-2	244 256	0 243 226	-6 170 146
-1	214 -218	1 904 947	-5 418 434
2	202 173	2 688 603	-3 255 246
3	712 -717	3 129 96	-2 458 490
4	301 -311	4 57 -75	-1 442 -427
5	255 260	5 1079 1017	0 815 -851
6	322 -322	6 580 -554	1 613 619
8	238 -274	7 442 -448	2 622 -608
	-1,-7,L		3 175 160
		-1,-1,L	4 406 -405
-7	212 174	1 166 188	5 505 486
-6	377 391	2 640 624	7 171 -180
-5	145 -137	3 281 298	
-4	774 792	4 2226 2202	0,-6,L
-3	521 -541	5 526 -511	
-2	658 -691	6 249 -246	-8 330 315
0	942 -921	8 420 -439	-7 143 129
2	1112 -1102	9 580 -548	-6 465 -445
3	618 649		-4 609 -590
4	501 479	0,-14,L	-3 453 477
5	272 285		-2 1147 -1192
6	308 324	-1 427 -419	-1 403 438
	-1,-5,L	1 515 -555	0 663 661
		3 328 -301	1 494 519
			2 791 780
-8	438 -444	0,-12,L	4 343 322
-5	692 688		5 68 85
-3	264 -241	-2 259 -303	6 959 -947
-2	980 970	-1 311 287	7 182 -211
-1	298 -268	2 307 283	8 171 -154
0	1216 -1248	4 541 545	
1	152 -179		0,-4,L
2	868 -841	0,-10,L	
3	1112 1060		-6 302 273
4	890 -836	-6 485 503	-4 985 -1039
5	1112 1052	-4 212 220	-3 916 -951
6	588 551	-3 547 -510	-2 1174 -1200
7	438 427	-2 469 -439	-1 445 -448

0,-4,L

0	847	-818
1	364	334
2	382	397
3	779	762
4	1062	1008
5	813	-785
6	608	569
7	252	-231
8	291	-298
9	174	-175

0,-2,L

-8	696	-707
-7	570	581
-5	471	-495
-4	239	197
-3	264	-237
-2	1141	1144
-1	870	-917
0	166	214
1	718	722
2	209	234
3	931	-926
4	426	-398
6	187	160
7	548	-527
8	604	587

0,0,L

2	748	768
3	479	435
4	334	-315
5	292	-336
6	1077	-1073
8	168	165
9	192	-196

1,-13,L

-3	339	-310
-2	322	-297
-1	282	-237
0	511	-521
1	347	362
3	408	407
4	184	201

5 431 432

1,-11,L

-5	301	300
-4	367	-342
-3	145	161
-2	221	-216
-1	261	-259
0	156	152
2	233	-233
3	160	184
4	272	-263
5	294	338
6	403	-428
7	321	346

1,-9,L

-6	395	-360
-4	734	-789
-2	446	-446
-1	813	823
0	286	292
1	386	429
2	901	900
5	355	-384
6	495	-509
8	514	-566

1,-7,L

-7	256	184
-6	509	511
-5	391	-392
-4	380	-386
-3	131	85
-2	192	-193
-1	265	263
0	186	-153
1	980	965
2	464	507
4	700	692
5	273	-259
6	358	351
7	475	-453

1,-5,L

-8	372	-379
----	-----	------

-7	368	362
-6	608	-621
-5	282	-274
-4	616	636
-3	198	-160
-2	1060	1084
-1	684	-657
0	720	764
2	1284	-1282
3	482	-499
4	472	-462
5	328	-356
9	265	-275

1,-3,L

-9	191	135
-7	518	-497
-6	636	-618
-5	400	-441
-3	454	-492
-2	613	645
-1	335	363
0	1827	1880
1	1164	-1107
2	166	-133
3	276	-288
4	680	-692
5	861	-866
6	574	-544
7	118	83
8	190	-214

1,-1,L

-9	240	-253
-8	233	238
-7	505	-481
-6	725	731
-5	608	-619
-2	554	632
0	600	-631
1	103	118
2	558	563
4	455	417
5	296	306
6	465	447
7	131	121
8	240	-249

	1,-1,L		0	421	400	-4	1683	1747
			1	408	-428	-1	548	579
9	213	220	2	117	-55	0	723	-766
	1,1,L		3	232	-257	1	831	-881
			4	289	-291	2	1340	-1361
1	291	217	6	221	205	3	541	501
2	2294	-2285	7	203	166	4	929	-896
3	462	395	8	496	534	6	554	523
4	294	-269				7	196	223
5	198	211		2,-6,L		8	425	404
6	473	467	-7	612	-598	9	211	205
7	142	148	-5	367	-382			
8	586	596	-4	287	-290		2,0,L	
9	390	374	-3	598	594	-9	272	-304
	2,-14,L		-2	366	398	-8	305	-309
0	182	170	-1	118	130	-6	480	-468
	2,-12,L		0	1046	1060	-5	607	624
-3	263	264	1	275	-283	-4	1125	-1158
-2	239	-235	2	599	601	-3	412	-386
-1	334	331	3	509	-508	-2	398	442
0	116	125	5	312	-334	-1	486	-431
1	352	327	6	176	-191	0	154	-240
2	438	434	7	185	-173	1	341	369
3	359	-403	8	118	-178	2	86	76
4	160	-168				3	626	582
	2,-10,L			2,-4,L		4	795	-778
-5	297	-286	-9	253	-247	5	437	416
-2	173	-176	-8	463	462	6	269	-240
-1	128	-135	-6	770	771	7	274	291
1	301	294	-5	456	-458	8	186	-160
2	528	-499	-4	1004	1057	9	339	324
4	464	457	-2	611	-648			
5	378	-372	-1	145	98		2,2,L	
6	218	221	0	1416	-1366	0	1167	-1172
7	264	-287	1	165	144	1	98	-90
	2,-8,L		2	461	-474	2	980	916
-6	339	-341	3	540	-547	3	295	-237
-5	140	144	4	1014	1049	4	665	633
-4	473	474	5	601	-623	5	739	767
-2	921	931	6	131	138	7	263	274
-1	190	218				8	200	-211
				2,-2,L				
			-9	164	-142		3,-13,L	
			-8	178	-172	0	200	-199
			-7	161	-128	2	215	-210
			-6	338	358	3	340	351
			-5	396	444			

3,-11,L

-5	315	317
-3	318	295
-2	778	757
-1	467	-451
1	362	-341
2	219	-203
3	609	-605
4	475	-478

3,-9,L

-5	287	-273
-3	417	437
-2	307	-319
0	812	817
1	392	-382
2	404	410
3	550	-567
4	419	435
5	350	-356
6	440	-460
7	190	202

3,-7,L

-7	267	-294
-6	504	500
-4	221	236
-3	432	-468
-2	438	-436
-1	162	-176
0	561	-544
1	377	-416
3	271	285
4	522	521
5	182	-192
6	561	603
7	454	465

3,-5,L

-8	387	-385
-7	266	300
-6	175	182
-5	274	283
-4	635	671
-2	448	460
-1	175	-179

0	430	-453
1	277	-302
2	582	-595
3	156	-186
4	780	-805
5	513	517
6	221	245
7	222	219

3,-3,L

-8	364	372
-7	177	195
-6	224	-222
-5	450	461
-4	608	-605
-3	764	799
-2	246	-274
-1	553	552
0	1226	1215
2	413	359
3	178	204
4	292	-286
5	429	405
6	877	-866

3,-1,L

-9	318	324
-8	622	664
-7	315	323
-6	167	161
-5	429	445
-4	318	-354
-3	605	-655
-2	1348	-1425
-1	521	511
0	1709	-1742
1	86	53
2	352	311
3	327	347
4	562	520
5	205	236
6	524	497
7	245	233
8	429	-418

3,1,L

-9	742	760
----	-----	-----

-8	674	-676
-7	230	245
-6	367	379
-5	185	-147
-4	247	221
-3	661	-620
-2	238	238
-1	235	-253
0	1843	-1833
2	1364	-1262
3	128	-138
4	220	-237
6	798	782
7	431	-393
8	366	367

3,3,L

0	1129	1119
1	809	803
2	284	300
3	339	342
5	312	303
6	343	-348
7	590	-562
8	380	379

4,-12,L

-1	219	219
0	422	387
1	379	-361
2	268	230

4,-10,L

-4	345	341
-3	324	-315
-2	229	229
-1	339	-327
0	571	-550
1	136	111
4	150	129
5	218	217
6	425	489

4,-8,L

-7	366	360
----	-----	-----

4,-2,L

-6	238	-247
-5	141	140
-4	411	429
-1	651	-641
0	298	276
1	472	-473
2	859	-869
3	228	198
4	538	-565
5	804	833
7	291	303

4,-6,L

-8	331	315
-7	190	-180
-6	508	-488
-5	276	302
-4	673	-723
-3	229	-271
-2	454	-437
-1	319	305
0	108	99
1	413	-398
3	528	557
4	177	-229
6	424	-449
7	520	546
8	600	-606

4,-4,L

-8	229	264
-7	163	154
-6	552	561
-4	408	-421
-2	797	-824
-1	516	507
0	1428	-1451
1	585	588
2	912	931
3	223	265
4	478	508
5	678	711
6	505	506
7	268	-261
8	441	-456

4,-2,L

-9	185	191
-8	424	-445
-7	296	282
-6	136	-167
-4	444	457
-3	257	312
-2	336	312
-1	107	-114
0	129	-122
1	656	656
2	962	-955
3	441	436
4	316	349
6	375	370

4,0,L

-9	218	276
-7	176	-173
-6	661	-664
-4	621	-632
-3	497	-533
-2	216	206
-1	278	306
0	132	181
2	961	973
3	252	-253
5	619	-618
6	638	-628
7	336	-330
8	168	-166

4,2,L

-9	206	160
-8	538	544
-7	332	-324
-6	923	908
-5	342	-348
-4	653	-620
-3	251	190
-2	1076	-1024
-1	424	-457
0	106	-114
1	140	-117
2	1328	1324
3	510	-470
4	664	634

5	256	-260
7	438	-443
8	439	-438

4,4,L

0	245	-213
1	936	882
2	638	-615
3	439	-429
4	563	558
5	532	-538

5,-13,L

0	307	-290
---	-----	------

5,-11,L

-4	529	465
-3	159	-103
1	259	-264
2	361	-341
3	456	459
4	214	-246

5,-9,L

-4	721	-702
-3	151	151
-2	241	-219
-1	344	320
0	187	-155
1	257	249
2	552	534
3	415	403
4	204	-187
6	206	-176

5,-7,L

-7	449	427
-5	176	-193
-3	218	-222
-2	834	-851
-1	206	-217
0	1004	-995
1	778	769
2	221	-203

5,-7,L
 3 138 141
 4 498 511
 5 120 120
 7 573 -581

5,-5,L

-8 338 -327
 -6 312 -341
 -5 408 419
 -4 208 186
 -3 188 -160
 -1 212 213
 0 278 255
 1 282 -288
 2 294 -273
 3 452 467
 4 230 -225
 5 254 -291
 7 161 -187

5,-3,L

-7 320 -344
 -6 550 -597
 -5 172 152
 -4 1477 -1561
 -2 719 738
 -1 171 -145
 0 989 982
 1 309 316
 2 1748 1765
 3 312 -308
 4 228 -219
 5 148 -141
 6 319 -332
 7 228 -232
 8 168 -183

5,-1,L

-8 307 325
 -6 368 392
 -5 768 -806
 -4 162 -179
 -3 239 249
 -2 1071 -1047
 -1 221 -254

0 534 547
 1 165 186
 2 921 911
 3 1058 -1038
 4 962 975
 5 264 -256
 6 224 -222

5,i,L

-7 442 -429
 -6 343 379
 -4 1008 993
 -2 1063 1095
 -1 454 459
 0 687 687
 1 283 -295
 2 872 -835
 3 281 -297
 4 269 -265
 5 782 -793
 7 252 240
 8 360 349

5,3,L

-9 207 -178
 -8 406 -380
 -6 526 -494
 -5 321 -352
 -3 157 -142
 -2 1307 1303
 -1 155 180
 0 798 750
 1 218 221
 4 1114 -1128
 6 315 -314
 7 168 99

5,5,L

0 166 -155
 1 261 -247
 2 451 -472
 3 267 -231
 4 197 175
 5 429 439
 6 272 -275
 7 515 506

6,-12,L

-2 455 -446
 -1 342 331
 1 526 518
 2 354 354

6,-10,L

-3 310 -312
 -2 581 -569
 -1 333 312
 0 284 -296
 1 457 456
 3 469 453
 4 349 348

6,-8,L

-6 295 -303
 -5 392 375
 -4 207 -198
 -2 642 649
 0 160 142
 4 676 -695
 5 251 -243

6,-6,L

-6 332 -324
 -5 216 -230
 -4 588 -583
 -3 411 406
 -2 465 456
 0 928 918
 1 322 299
 2 719 735
 3 902 -905
 4 152 -125
 6 677 -671
 7 204 -211

6,-4,L

-8 273 328
 -7 249 -221
 -5 349 -335
 -4 326 328
 -3 361 -344

6,-4,L		
-2	246	-243
0	498	515
1	322	-374
3	159	-158
4	459	492
5	288	-315
6	214	216

-3	677	671
-2	1069	-1073
-1	489	480
0	138	-169
1	384	-371
2	437	-478
3	465	498
4	706	698
7	659	633

7,-7,L		
-6	642	604
-5	253	-240
-4	583	580
-3	201	-212
-2	225	237
-1	244	247
0	443	-429
3	183	-187
4	290	322
5	195	-202
6	533	526

6,-2,L		
-8	768	-748
-7	377	-388
-6	138	157
-5	167	-200
-4	529	536
-3	457	-466
-2	1612	1646
-1	342	-338
0	352	-353
1	338	-365
2	873	-882
3	231	-249
4	670	-668
6	408	417
7	268	290

6,4,L		
-8	416	-396
-7	114	-115
-6	635	623
-5	353	379
-4	666	628
-3	338	342
-2	274	-270
-1	758	751
0	2003	-2008
1	202	-222
2	586	-559
3	140	-134
4	220	-221
6	603	608

7,-5,L		
-6	329	330
-4	752	758
-3	352	362
-2	1183	1183
-1	630	-621
2	894	-890
4	327	-338
5	157	201
6	231	247

6,0,L		
-9	517	-543
-6	394	-406
-5	352	-388
-3	881	919
-2	698	693
-1	290	-298
0	1182	1127
3	252	-245
4	650	-646
5	728	729
6	664	-662

6,6,L		
1	276	246
2	340	-333
3	197	203
4	220	-215
5	97	163

7,-3,L		
-8	177	188
-6	449	-461
-4	260	289
-2	257	-278
-1	215	-214
0	269	276
1	332	-317
2	363	-374
4	112	-139
5	158	146
6	582	-595
7	270	292

6,2,L		
-9	272	-276
-8	647	646
-7	178	-184
-6	302	287
-5	529	537
-4	330	363

7,-11,L		
-2	377	338
0	362	348

7,-1,L		
-8	378	409
-7	186	-176
-6	792	852
-5	447	462
-4	256	-244

7,-9,L		
-5	145	-160
-4	283	-270
-1	196	210
0	486	466
2	213	217
3	448	-452
4	134	159
5	420	-396

7,-1,L

-3	176	152
-2	1179	-1215
-1	131	99
0	964	-993
1	506	-492
3	474	479
4	314	304
6	271	269
7	385	391

7,1,L

-9	338	-317
-8	421	-431
-7	581	574
-6	128	137
-5	308	326
-4	352	328
-3	376	404
-1	144	-173
0	888	-898
1	649	651
2	492	-463
3	162	174
5	358	352
6	452	455

7,3,L

-9	171	145
-7	526	520
-6	923	-945
-5	331	322
-4	329	-311
-3	92	-115
-2	696	-750
0	999	991
1	170	-170
2	179	193
3	489	489
6	407	-401

7,5,L

-9	382	316
-8	763	743
-7	159	159
-6	291	308

-5	885	897
-4	1095	-1075
-3	288	-331
-2	491	-487
-1	132	-141
1	654	-647
2	1082	1096
4	273	268

7,7,L

0	276	-280
1	219	214
2	237	230
3	631	-636
4	263	265

8,-10,L

-3	164	-140
-1	422	-391
0	458	-428
2	225	-208

8,-8,L

-5	162	149
-4	631	564
-2	300	310
-1	338	-308
1	326	-329
2	470	-473

8,-6,L

-7	307	-267
-5	92	184
-4	308	-305
-3	170	161
-2	205	-198
-1	225	189
0	249	223
2	535	558
5	220	214

8,-4,L

-7	310	311
-6	691	679
-2	885	-874

0	811	-803
1	381	368
2	165	-155
3	182	185
4	493	483
6	206	226

8,-2,L

-7	663	658
-6	153	-146
-5	236	246
-4	533	527
-2	183	-221
0	366	-328
2	831	-820
3	267	268
4	262	-266

8,0,L

-7	291	306
-6	834	-857
-5	405	426
-4	775	-788
-3	516	-524
0	780	784
1	191	-181
2	380	393
3	683	665
4	498	-482

8,2,L

-9	181	184
-8	223	215
-5	231	-238
-4	893	-921
-3	289	-335
-2	373	-343
-1	345	-365
0	258	-255
2	876	856
3	255	-256
4	554	551
5	208	205

	8,4,L		0	347	-353		-5	315	-315
			1	158	156		-4	434	-439
-4	708	785	2	371	-391		-3	205	-230
-2	232	235	3	428	433		-2	828	856
0	303	300	4	358	-364		-1	483	-477
2	218	-219					0	664	633
3	167	-169		9,-3,L			1	76	130
5	241	-216					2	224	232
6	259	240	-6	424	-411		4	432	-461
			-5	175	-137				
	8,6,L		-4	561	-580			9,5,L	
			-3	210	214				
-8	184	-164	-2	120	-117		-8	473	476
-7	455	-442	-1	234	230		-3	279	275
-6	318	-324	0	462	473		-2	190	-208
-3	619	-731	1	166	162		-1	108	-119
-2	1145	1136	2	523	496		0	288	293
-1	137	163	3	99	35		2	369	354
0	674	677	4	162	-190		3	196	-193
2	192	166	5	153	142		4	332	301
3	340	345							
4	318	-346		9,-1,L				9,7,L	
5	241	-245							
			-8	516	522		-8	178	-171
	8,8,L		-2	389	-392		-7	489	-521
			-1	160	131		-6	335	362
2	544	541	1	164	168		-5	142	151
3	338	-327	2	265	274		-4	405	384
			4	731	722		-3	392	408
	9,-9,L		5	322	-348		-1	604	610
							0	211	-229
-3	142	157		9,1,L			2	337	-332
-2	278	-267							
2	336	327	-6	376	-389			9,9,L	
			-7	333	-364				
	9,-7,L		-5	323	-356		1	350	335
			-4	783	787		2	321	-320
-2	824	-774	-3	637	-648				
0	259	-232	-2	496	490			10,-8,L	
2	241	-221	-1	301	283				
3	514	501	0	427	-406		-3	256	209
4	445	440	2	156	-155		-2	254	267
			3	135	-131		1	197	197
	9,-5,L		5	447	-434		2	187	-185
-6	394	-388		9,3,L				10,-6,L	
-5	168	200							
-3	328	-321	-8	312	-313		-4	472	-457
-2	241	252	-7	414	-385		-2	520	-492
-1	129	114	-6	184	-218				

10,-8,L		
-1	200	197
0	500	490
2	299	288

10,-4,L		
-6	287	300
-4	160	-155
-3	239	-213
-2	378	-391
-1	379	385
0	350	-393
2	551	539
4	439	-53

10,-2,L		
-6	147	110
-4	447	469
-2	774	773
1	204	234
3	370	-337
4	209	-213

10,0,L		
-7	210	-201
-6	380	-372
-5	174	-169
-2	428	436
0	901	904
3	199	-203
5	228	-191

10,2,L		
-8	507	534
-7	258	-289
-6	438	423
-5	160	156
-4	119	-115
-2	237	-251
-1	124	114
0	244	-257
1	394	-393
2	228	242
3	329	-343

10,4,L		
-8	443	-452
-6	440	437
-5	141	-92
-4	419	433
-3	306	291
-2	392	384
-1	114	98
0	497	-501
1	291	285
2	733	-750
3	172	-145
4	257	-254

10,6,L		
-7	362	358
-6	633	-608
-2	267	273
0	165	212
1	303	302
2	510	-523
3	254	289

10,8,L		
-7	347	328
-6	237	-216
-5	551	569
-4	220	-263
-3	157	173
-2	427	-432
-1	95	-132
1	486	-490

10,10,L		
0	461	-476

11,-7,L		
0	266	-256

11,-5,L		
-4	543	525
-2	448	435
-1	160	-177
0	350	334

1	219	-237
2	328	-343

11,-3,L		
-6	248	-246
-5	204	192
-4	288	-312
-2	457	466
0	737	723
1	474	-487
2	321	318

11,-1,L		
-6	526	514
-5	172	-161
-3	141	151
0	568	-564
2	229	199
3	366	-412
4	197	233

11,1,L		
-6	299	319
-5	179	-171
-4	796	781
-3	409	409
0	350	-327
2	1016	-996

11,3,L		
-7	218	213
-6	305	-328
-5	450	438
-2	236	250
2	346	-358
3	490	477

11,5,L		
-7	328	293
-6	276	266
-4	354	-362
-3	252	265
-2	705	-727
-1	178	-182

	11,5,L		12,0,L		0 265 280
0	504 -510	-5	222 224		12,8,L
1	177 -162	-4	694 -688	-4	228 -229
2	288 300	-3	186 175	-3	194 -162
	11,7,L	-1	219 -203	-1	387 -359
		0	188 -129		13,-3,L
-6	206 232	1	158 113		
-4	250 250	2	287 267		
-2	412 -413		12,2,L	-2	246 -206
0	328 -327			-1	264 -269
2	276 -280	-6	190 177		13,-1,L
	11,9,L	-5	172 167		
-4	227 242	-4	225 -236	-4	264 -268
-3	572 -606	-3	438 457	-2	933 -903
-2	158 223	-2	988 -983		13,1,L
0	248 242	2	307 303		
	12,-4,L		12,4,L	-3	198 -181
-4	318 300	-6	250 204	-2	337 338
-3	227 196	-4	305 300		13,3,L
-2	282 -277	-3	180 -192		
-1	251 -219	-2	259 -255	-5	404 -384
0	388 -412	-1	348 357	-3	185 -179
	12,-2,L	0	172 -185	-2	399 387
-5	205 173	1	77 9	-1	182 -180
-4	472 482		12,6,L	0	719 703
-3	171 -138	-5	262 -244		13,5,L
0	412 -407	-4	277 -282		
2	675 -664	-3	474 -528	-2	244 -220
		-2	378 360		
		-1	243 -248		