AM-82-200

American Mineralogist, Volume 67, pages 604–609, 1982

The crystal structure of cascandite, $CaScSi_3O_8(OH)$

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 $CaScSi_3O_8(OH)$, is triclinic with $a = 9.791(8)$Å, $b = 10.420(9)$Å, $c = 7.076(6)$Å, $\alpha = 98.91(8)°$, $\beta = 102.63(8)°$, $\gamma = 84.17(8)°$; $Z = 4$ 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 jervisite, another new scandium silicate with ideal formula $NaScSi_2O_6$. 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 Mo$K\alpha$ radiation. A total of 1526 non-zero reflections were measured from 3 to 30° θ, 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 $R_1 = \Sigma \mid |F_o| - |F_c| \mid / \Sigma |F_o| = 0.08$.

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 $R_2 = (\Sigma w \mid |F_o| - |F_c| \mid^2 / \Sigma w |F_o|^2)^{1/2} = 0.046$, where w was the reciprocal of the variance on F_o as estimated from

0003–004X/82/0506–0604$02.00

-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	163	-165
5	293	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	266	273
4	508	-502
5	233	-227
6	287	280
7	228	-187
8	265	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	506
-1	263	-249
0	366	-369
2	163	-157
3	192	-141
6	587	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	-358
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	1059	-1037
3	601	558
4	411	-364
5	269	-312
6	175	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	581	-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	953	976
-3	352	377
-2	983	960
-1	136	-138
0	625	635
1	288	-287
2	584	-565
3	425	-450
4	148	-95
5	251	-286
7	165	-151
8	526	522
9	195	156

-3,-3,L

1	831	-786
2	1493	1386
3	495	-457
4	622	-577
5	326	-317
6	908	-839
7	415	409
8	207	-205
9	233	221

-2,-14,L

-1	236	200
0	314	309
1	278	-284
2	196	-209
4	185	-228

-2,-12,L

-4	314	-296
-3	236	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	871	-861
4	677	-659
5	349	-383
7	423	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	6[illegible]0
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

4	529	-525
6	374	330
7	493	502

-1,-9,L

-5	180	-203
-4	160	-172
-3	243	236
-2	244	256
-1	214	-218
2	202	173
3	713	-717
4	301	-311
5	259	260
6	323	-322
8	236	-274

-1,-7,L

-7	212	174
-6	377	391
-5	145	-137
-4	774	792
-3	521	-541
-2	658	-691
0	943	-921
2	1112	-1102
3	618	649
4	501	479
5	272	285
6	308	324

-1,-5,L

-8	439	-444
-5	692	688
-3	264	-241
-2	980	970
-1	298	-268
0	1216	-1248
1	153	-179
2	869	-841
3	1118	1060
4	890	-836
5	1113	1052
6	585	551
7	436	427
8	393	377
9	293	-298

-1,-3,L

-7	290	296
-6	616	-606
-4	1118	-1130
-3	666	662
-2	325	-338
-1	780	-788
0	243	226
1	904	947
2	688	603
3	129	96
4	97	-75
5	1079	1017
6	580	-554
7	442	-448

-1,-1,L

1	166	188
2	640	624
3	281	298
4	2226	2202
5	526	-511
6	249	-246
8	420	-439
9	580	-548

0,-14,L

-1	437	-419
1	515	-555
3	328	-301

0,-12,L

-2	259	-303
-1	311	287
2	307	283
4	541	545

0,-10,L

-6	485	503
-4	212	220
-3	547	-510
-2	469	-439
0	971	-969
2	176	-157
3	869	876
4	211	207
5	306	295
6	600	617
7	186	-198

0,-8,L

-7	435	414
-6	170	146
-5	418	434
-3	255	246
-2	458	490
-1	442	-427
0	815	-851
1	613	619
2	622	-608
3	175	160
4	406	-405
5	505	486
7	171	-180

0,-6,L

-8	330	315
-7	143	129
-6	465	-445
-4	609	-590
-3	453	477
-2	1147	-1192
-1	403	438
0	663	661
1	494	519
2	791	780
4	343	322
5	68	85
6	959	-947
7	182	-211
8	171	-154

0,-4,L

-6	302	273
-4	985	-1039
-3	916	-951
-2	1174	-1200
-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	235	197
-3	264	-237
-2	1141	1144
-1	870	-917
0	166	214
1	716	722
2	209	234
3	931	-926
4	426	-398
6	187	160
7	548	-527
8	604	587

0,0,L

2	745	768
3	479	435
4	334	-315
5	293	-336
6	1077	-1073
8	168	165
9	193	-196

1,-13,L

-3	339	-310
-2	322	-297
-1	283	-237
0	511	-521
1	341	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	266	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	246	-249

1,-1,L

9	213	220

1,1,L

1	291	217
2	2294	-2285
3	462	395
4	294	-269
5	198	211
6	473	467
7	142	148
8	586	596
9	390	374

2,-14,L

0	182	170

2,-12,L

-3	263	264
-2	235	-235
-1	334	331
0	116	125
1	352	327
2	438	434
3	355	-403
4	160	-168

2,-10,L

-5	297	-286
-2	173	-176
-1	128	-135
1	301	294
2	528	-499
4	464	457
5	378	-372
6	218	221
7	264	-287

2,-8,L

-6	339	-341
-5	140	144
-4	473	474
-2	921	931
-1	190	218
0	421	400
1	408	-428
2	117	-55
3	232	-257
4	289	-291
6	221	205
7	203	166
8	496	534

2,-6,L

-7	612	-598
-5	367	-382
-4	287	-290
-3	598	594
-2	366	398
-1	118	130
0	1046	1060
1	275	-283
2	599	601
3	509	-508
5	312	-334
6	176	-191
7	185	-173
8	118	-178

2,-4,L

-9	253	-247
-8	463	462
-6	776	771
-5	456	-458
-4	1004	1057
-2	611	-648
-1	145	98
0	1416	-1366
1	165	144
2	461	-474
3	540	-547
4	1014	1049
5	601	-623
6	131	138

2,-2,L

-9	164	-142
-8	178	-172
-7	161	-128
-6	338	358
-5	396	444
-4	1683	1747
-1	548	579
0	723	-766
1	831	-881
2	1340	-1361
3	541	501
4	929	-896
6	554	523
7	196	223
8	425	404
9	211	205

2,0,L

-9	272	-304
-8	305	-309
-6	480	-468
-5	607	624
-4	1125	-1158
-3	412	-386
-2	398	442
-1	486	-431
0	154	-240
1	341	369
2	86	76
3	626	582
4	795	-778
5	437	416
6	269	-240
7	274	291
8	186	-160
9	339	324

2,2,L

0	1167	-1172
1	98	-90
2	980	916
3	295	-237
4	665	633
5	739	767
7	263	274
8	200	-211

3,-13,L

0	200	-199
2	215	-210
3	340	351

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	813	817
1	393	-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	163	-176
0	561	-544
1	377	-416
3	271	285
4	523	521
5	183	-192
6	561	603
7	454	465

3,-5,L

-8	387	-385
-7	268	300
-6	175	182
-5	274	283
-4	639	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	249
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	633	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,-8,L

-6	238	-247
-5	141	146
-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	196	-180
-6	508	-488
-5	276	302
-4	673	-723
-3	229	-271
-2	454	-437
-1	319	305
0	109	99
1	413	-398
3	525	557
4	171	-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	1426	-1451
1	585	588
2	913	931
3	223	265
4	479	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	139	141
4	498	511
5	120	120
7	573	-581

5,-5,L

-8	338	-327
-6	313	-341
-5	409	419
-4	205	186
-3	185	-160
-1	213	213
0	278	255
1	283	-288
2	294	-273
3	453	467
4	230	-225
5	254	-291
7	161	-187

5,-3,L

-7	320	-344
-6	550	-597
-5	172	152
-4	1471	-1561
-2	719	738
-1	171	-145
0	989	982
1	309	316
2	1748	1765
3	313	-308
4	228	-219
5	149	-141
6	319	-332
7	229	-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

5,1,L

-7	443	-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	331	-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	155	-158
4	459	492
5	288	-315
6	214	216

6,-2,L

-8	760	-748
-7	371	-388
-6	138	157
-5	167	-200
-4	525	536
-3	457	-466
-2	1613	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

6,0,L

-9	517	-543
-6	394	-406
-5	352	-388
-3	881	919
-2	698	693
-1	290	-298
0	1182	1127
3	253	-245
4	650	-646
5	728	729
6	664	-662

6,2,L

-9	273	-276
-8	647	646
-7	178	-184
-6	302	287
-5	525	537
-4	330	363
-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

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

6,6,L

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

7,-11,L

-2	377	338
0	362	348

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,-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

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

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

7,-1,L

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

7,-1,L

-3	178	152
-2	1179	-1215
-1	131	99
0	964	-993
1	500	-492
3	474	479
4	314	304
6	271	269
7	389	391

7,1,L

-9	338	-317
-8	421	-431
-7	581	574
-6	128	137
-5	308	326
-4	352	328
-3	378	404
-1	144	-173
0	888	-898
1	649	651
2	493	-463
3	163	174
5	359	352
6	453	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	175	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

-4	768	785
-2	232	235
0	303	300
2	218	-219
3	167	-169
5	241	-216
6	259	240

8,6,L

-8	184	-164
-7	455	-442
-6	318	-324
-3	615	-631
-2	1145	1136
-1	137	163
0	679	677
2	192	166
3	340	345
4	318	-346
5	247	-245

8,8,L

2	544	541
3	338	-327

9,-9,L

-3	142	157
-2	278	-267
2	336	327

9,-7,L

-2	824	-774
0	259	-232
2	241	-221
3	514	501
4	449	440

9,-5,L

-6	394	-388
-5	168	200
-3	328	-321
-2	247	252
-1	129	114
0	347	-353
1	158	156
2	371	-391
3	428	433
4	358	-364

9,-3,L

-6	424	-411
-5	175	-137
-4	561	-580
-3	210	214
-2	120	-117
-1	234	230
0	462	473
1	166	162
2	523	496
3	99	35
4	162	-190
5	153	142

9,-1,L

-8	516	522
-2	389	-392
-1	160	131
1	164	168
2	265	274
4	731	722
5	322	-348

9,1,L

-8	376	-389
-7	333	-364
-5	333	-356
-4	783	787
-3	637	-648
-2	496	490
-1	301	283
0	427	-406
2	156	-155
3	135	-131
5	447	-434

9,3,L

-8	312	-313
-7	414	-385
-6	184	-218
-5	315	-315
-4	434	-439
-3	205	-230
-2	828	856
-1	483	-477
0	664	633
1	76	130
2	224	232
4	432	-461

9,5,L

-8	473	476
-3	279	275
-2	190	-208
-1	108	-119
0	288	293
2	369	354
3	196	-193
4	332	301

9,7,L

-8	178	-171
-7	489	-521
-6	335	362
-5	142	151
-4	405	384
-3	392	408
-1	604	610
0	211	-229
2	337	-332

9,9,L

1	350	335
2	321	-320

10,-8,L

-3	256	209
-2	254	267
1	197	197
2	187	-185

10,-6,L

-4	472	-457
-2	520	-492

10,-6,L

-1	206	197
0	506	490
2	295	288

10,-4,L

-6	287	300
-4	166	-155
-3	235	-213
-2	376	-391
-1	375	385
0	356	-393
2	551	539
4	435	-53

10,-2,L

-6	147	110
-4	447	469
-2	774	773
1	204	234
3	376	-337
4	205	-213

10,0,L

-7	216	-201
-6	386	-372
-5	174	-169
-2	426	436
0	901	904
3	199	-203
5	228	-191

10,2,L

-8	507	534
-7	256	-289
-6	436	423
-5	166	156
-4	115	-115
-2	237	-251
-1	124	114
0	244	-257
1	394	-393
2	226	242
3	323	-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

0	504	-510
1	177	-162
2	288	300

11,7,L

-6	206	232
-4	250	250
-2	413	-413
0	329	-327
2	276	-280

11,9,L

-4	227	242
-3	573	-606
-2	159	223
0	248	242

12,-4,L

-4	318	300
-3	227	196
-2	282	-277
-1	251	-219
0	388	-412

12,-2,L

-5	205	173
-4	473	482
-3	171	-138
0	412	-407
2	675	-664

12,0,L

-5	222	224
-4	694	-688
-3	186	175
-1	219	-203
0	188	-129
1	158	113
2	287	267

12,2,L

-6	190	177
-5	172	167
-4	225	-236
-3	438	457
-2	988	-983
2	307	303

12,4,L

-6	250	204
-4	305	300
-3	180	-192
-2	259	-255
-1	348	357
0	172	-185
1	77	9

12,6,L

-5	262	-244
-4	277	-282
-3	474	-528
-2	378	360
-1	243	-248
0	265	280

12,8,L

-4	228	-229
-3	194	-162
-1	387	-359

13,-3,L

-2	246	-206
-1	264	-269

13,-1,L

-4	264	-268
-2	933	-903

13,1,L

-3	198	-181
-2	337	338

13,3,L

-5	404	-384
-3	185	-179
-2	399	387
-1	182	-180
0	719	703

13,5,L

-2	244	-220