

**NEW Cu<sup>2+</sup> COORDINATION POLYHEDRA IN THE CRYSTAL STRUCTURE OF  
BURNSITE, KCdCu<sub>7</sub>O<sub>2</sub>(SeO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>9</sub>  
STRUCTURE FACTOR TABLES FOR DEPOSIT**

PETER C. BURNS\*

Department of Civil Engineering and Geological Sciences, University of Notre Dame, 156  
Fitzpatrick Hall, Notre Dame, IN 46556-0767 U.S.A.

SERGEY V. KRIVOVICHEV AND STANISLAV K. FILATOV

Department of Crystallography, Faculty of Geology, St. Petersburg State University,  
University Emb. 7/9. 199034 St. Petersburg, Russia

\*e-mail: pburns@nd.edu

Table 1. Observed and calculated structure factors for burnsite

h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	h	k	l	10Fo	10Fc	10s	
0	1	0	925	990	33	-3	7	2	90	94	18	-4	10	4	440	440	8	-3	7	7	166	163	10	
-1	2	0	2214	2306	13	-2	7	2	231	238	6	-3	10	4	187	182	15	-2	7	7	624	631	4	
0	2	0	2572	2629	21	-1	7	2	405	398	5	-2	10	4	355	351	8	-1	7	7	709	713	5	
-1	3	0	1242	1222	5	0	7	2	711	739	6	-1	10	4	458	459	8	0	7	7	157	132	19	
0	3	0	327	326	5	-4	8	2	59	74	59	-5	11	4	493	463	8	-3	8	7	382	383	6	
-2	4	0	4005	4032	38	-3	8	2	856	856	8	-4	11	4	64	43	64	-2	8	7	597	597	5	
-1	4	0	1437	1472	7	-2	8	2	109	107	18	-3	11	4	589	579	12	-1	8	7	50	38	50	
0	4	0	86	40	21	-1	8	2	508	510	5	0	1	5	159	174	6	0	8	7	422	412	10	
-2	5	0	378	371	4	0	8	2	121	100	25	0	2	5	174	175	5	-4	9	7	472	471	6	
-1	5	0	1835	1857	12	-4	9	2	278	264	9	-1	3	5	70	62	11	-3	9	7	436	444	7	
0	5	0	1190	1206	5	-3	9	2	104	83	24	0	3	5	216	226	6	-2	9	7	67	26	66	
-3	6	0	3984	3981	13	-2	9	2	475	473	6	-1	4	5	297	294	3	-1	9	7	0	83	1	
-2	6	0	380	370	5	-1	9	2	155	165	15	0	4	5	241	230	6	0	9	7	93	101	93	
-1	6	0	794	803	4	0	9	2	530	525	10	-2	5	5	571	572	3	-4	10	7	105	86	34	
0	6	0	958	999	7	-5	10	2	491	505	10	-1	5	5	300	291	4	-3	10	7	504	505	8	
-3	7	0	977	984	9	-4	10	2	250	248	11	0	5	5	290	290	6	-2	10	7	304	308	12	
-2	7	0	922	933	6	-3	10	2	321	309	9	-2	6	5	179	172	7	-1	10	7	148	131	57	
-1	7	0	129	123	19	-2	10	2	0	28	1	-1	6	5	105	107	12	-5	11	7	178	216	92	
0	7	0	694	705	8	-1	10	2	155	146	19	0	6	5	188	175	11	0	8	1902	1860	9		
-4	8	0	1104	1120	16	0	10	2	105	43	105	-3	7	5	109	109	14	0	1	8	715	702	5	
-3	8	0	811	834	14	-5	11	2	96	98	39	-2	7	5	208	212	7	-1	2	8	1233	1219	4	
-2	8	0	321	318	9	-4	11	2	196	193	17	-1	7	5	157	145	10	0	2	8	391	394	3	
-1	8	0	1579	1607	9	-3	11	2	118	120	43	0	7	5	237	246	11	-1	3	8	252	249	3	
0	8	0	187	188	22	0	1	3	208	201	3	-3	8	5	45	57	45	0	3	8	1344	1333	6	
-4	9	0	173	164	19	0	2	3	2214	2165	12	-2	8	5	140	142	15	-2	4	8	77	78	16	
-3	9	0	539	540	9	-1	3	3	1675	1786	21	-1	8	5	94	104	23	-1	4	8	702	692	5	
-2	9	0	289	274	13	0	3	3	2479	2491	12	0	8	5	358	366	10	0	4	8	8	702	692	5
-1	9	0	501	494	8	-1	4	3	759	773	4	-4	9	5	34	13	34	-2	5	8	561	553	3	
0	9	0	1469	1506	11	0	4	3	1868	1896	10	-3	9	5	107	101	22	-1	5	8	942	938	4	
-5	10	0	1500	1499	34	-2	5	3	239	244	4	-2	9	5	81	67	36	0	5	8	98	100	24	
-4	10	0	427	418	11	-1	5	3	897	916	3	-1	9	5	199	194	13	-3	6	8	552	557	5	
-3	10	0	88	88	79	0	5	3	1451	1482	6	0	9	5	0	55	1	-2	6	8	645	642	4	
-2	10	0	723	722	11	-2	6	3	398	391	4	-4	10	5	116	123	27	-1	6	8	169	150	10	
-1	10	0	456	441	10	-1	6	3	772	778	4	-3	10	5	122	115	24	0	6	8	1178	1196	13	
0	10	0	281	202	45	0	6	3	1198	1216	8	-2	10	5	128	135	25	-3	7	8	152	159	12	
-5	11	0	396	392	13	-3	7	3	429	435	5	-1	10	5	25	39	25	-2	7	8	647	644	4	
-4	11	0	754	765	11	-2	7	3	726	726	3	-5	11	5	255	230	17	-1	7	8	180	180	11	
-3	11	0	470	471	13	-1	7	3	1281	1283	6	-4	11	5	93	103	92	0	7	8	73	87	72	
0	1	1	812	826	10	0	7	3	358	364	7	0	0	6	5590	5365	34	-4	8	8	796	816	6	
0	2	1	634	631	3	-3	8	3	959	985	5	0	1	6	1992	1936	7	-3	8	8	118	112	19	
-1	3	1	401	424	2	-2	8	3	1259	1287	9	-1	2	6	206	204	5	-2	8	8	375	361	6	
0	3	1	1668	1692	8	-1	8	3	324	322	7	0	2	6	753	786	11	-1	8	8	636	629	5	
-1	4	1	183	174	4	0	8	3	497	502	8	-1	3	6	1943	1913	6	0	8	8	429	426	11	

0 4 1 594 589 6 -4 9 3 1115 1123 7 -2 4 6 781 815 15 -4 9 8 194 188 13 0 8 11 204 193 23  
-2 5 1 774 784 4 -3 9 3 717 712 5 -1 4 6 1915 1920 7 -3 9 8 633 625 6 -4 9 11 263 260 11  
-1 5 1 642 643 3 -2 9 3 80 82 35 -1 4 6 145 106 7 -2 9 8 53 20 53 -3 9 11 0 36 1  
0 5 1 469 479 5 -1 9 3 89 59 30 0 4 6 739 722 6 0 9 8 102 93 39 -2 9 11 56 108 55  
-2 6 1 217 211 5 0 9 3 71 43 71 -2 5 6 1252 1254 4 4 0 9 8 278 279 18 -1 9 11 234 245 30  
-1 6 1 111 100 11 -4 10 3 78 112 49 -1 5 6 491 491 3 3 -5 10 8 503 524 12 0 12 2828 2851 11  
0 6 1 685 688 5 -3 10 3 640 648 6 0 5 6 1797 1811 8 -4 10 8 161 174 21 0 1 12 202 198 9  
-3 7 1 78 47 20 -2 10 3 574 577 7 -3 6 6 2045 2090 11 -3 10 8 41 40 40 -1 2 12 811 809 4  
-2 7 1 573 578 4 -1 10 3 568 572 7 -2 6 6 1021 1027 5 -2 10 8 537 516 10 0 2 12 1359 1376 5  
-1 7 1 316 313 6 0 10 3 465 456 31 -1 6 6 80 66 18 0 1 9 30 24 29 -1 3 12 121 117 12  
0 7 1 248 250 10 -5 11 3 370 359 10 0 6 6 66 67 49 0 2 9 1104 1098 4 0 3 12 355 358 8  
-3 8 1 226 235 9 -4 11 3 437 446 9 -3 7 6 1350 1378 6 -1 3 9 1793 1760 4 -2 4 12 1579 1574 8  
-2 8 1 396 385 5 -3 11 3 1057 1036 15 -2 7 6 48 71 47 -1 4 9 1866 1848 9 -1 4 12 522 508 5  
-1 8 1 90 99 23 0 0 4 1820 1762 6 -1 7 6 660 659 4 0 4 9 599 593 3 0 4 12 475 485 7  
0 8 1 476 492 8 0 1 4 1210 1227 4 0 7 6 188 198 14 0 4 9 1630 1631 10 -2 5 12 219 203 10  
-4 9 1 256 245 9 -1 2 4 661 698 4 -4 8 6 175 152 16 -2 5 9 141 121 11 -1 5 12 821 823 5  
-3 9 1 297 288 9 0 2 4 1314 1318 24 -3 8 6 218 203 8 -1 5 9 376 376 5 0 5 12 390 382 10  
-2 9 1 75 90 40 -1 3 4 1552 1560 9 -2 8 6 845 852 4 0 5 9 1378 1371 6 -3 6 12 1518 1524 10  
-1 9 1 139 155 17 0 3 4 1196 1225 7 -1 8 6 745 745 6 -2 6 9 189 179 9 -2 6 12 99 54 25  
0 9 1 74 96 74 -2 4 4 90 41 13 0 8 6 652 647 5 -1 6 9 554 552 5 -1 6 12 630 627 6  
-4 10 1 147 153 19 -1 4 4 241 222 3 -4 9 6 622 640 5 0 6 9 1029 1026 6 0 6 12 496 504 10  
-3 10 1 222 223 13 0 4 4 1504 1517 8 -3 9 6 114 117 21 -3 7 9 219 224 9 -3 7 12 159 155 15  
-2 10 1 303 294 10 -2 5 4 669 668 3 -2 9 6 265 261 10 -2 7 9 348 334 6 -2 7 12 382 370 8  
-1 10 1 43 74 42 -1 5 4 55 61 23 0 9 6 842 855 6 -1 7 9 1070 1080 4 -1 7 12 146 150 20  
0 10 1 29 33 28 0 5 4 1494 1517 9 0 9 6 801 807 15 0 7 9 345 336 11 0 7 12 154 125 31  
-5 11 1 272 276 12 -3 6 4 1117 1141 8 -5 10 6 761 770 10 -3 8 9 615 609 5 -4 8 12 415 396 11  
-4 11 1 138 138 25 -2 6 4 1421 1433 8 -4 10 6 172 162 18 -2 8 9 1073 1076 6 -3 8 12 737 720 6  
-3 11 1 341 317 13 -1 6 4 106 92 12 -3 10 6 412 411 8 -1 8 9 164 160 16 -2 8 12 89 98 45  
0 0 2 2289 2214 69 0 6 4 874 878 7 -2 10 6 203 188 15 0 8 9 253 251 18 -1 8 12 764 757 7  
0 1 2 356 325 2 -3 7 4 994 998 5 -1 10 6 707 707 10 -4 9 9 927 923 6 0 8 12 0 65 1  
-1 2 2 592 566 4 -2 7 4 516 509 5 -5 11 6 676 694 15 -3 9 9 668 652 6 -4 9 12 90 30 48  
0 2 2 691 691 4 -1 7 4 337 329 5 -4 11 6 283 280 28 -2 9 9 147 166 21 -3 9 12 207 220 21  
-1 3 2 349 343 5 0 7 4 173 166 14 0 1 7 962 939 3 -1 9 9 0 46 1 -2 9 12 242 226 29  
0 3 2 347 353 3 -4 8 4 776 785 10 0 2 7 876 855 5 0 9 9 111 45 110 0 1 13 329 320 6  
-2 4 2 67 67 18 -3 8 4 231 219 8 -1 3 7 1026 1009 3 -4 10 9 169 168 22 0 2 13 678 690 6  
-1 4 2 1533 1534 7 -2 8 4 1062 1093 4 0 3 7 2366 2338 11 -3 10 9 584 573 9 -1 3 13 955 942 5  
0 4 2 291 280 4 -1 8 4 497 494 5 -1 4 7 80 84 15 0 10 2555 2622 49 0 3 13 1497 1506 7  
-2 5 2 366 356 3 0 8 4 748 737 7 0 4 7 1305 1296 8 0 1 10 150 133 10 -1 4 13 192 194 10  
-1 5 2 479 477 2 -4 9 4 393 386 7 -2 5 7 642 646 3 -1 2 10 517 503 4 0 4 13 1000 1003 7  
0 5 2 184 174 9 -3 9 4 252 236 9 -1 5 7 601 595 3 0 2 10 407 407 5 -2 5 13 391 382 7  
-3 6 2 1520 1533 5 -2 9 4 270 266 9 0 5 7 737 747 5 -1 3 10 235 221 5 -1 5 13 464 455 6  
-2 6 2 289 290 5 -1 9 4 556 549 6 -2 6 7 205 192 7 0 3 10 62 27 42 0 5 13 810 812 9  
-1 6 2 989 1009 4 0 9 4 306 291 16 -1 6 7 292 278 5 -2 4 10 1144 1138 7 -2 6 13 4 11 4  
0 6 2 406 406 5 -5 10 4 566 584 10 0 6 7 1008 1010 12 -1 4 10 714 721 4 -1 6 13 335 314 9  
0 6 13 769 767 9 0 5 14 724 721 14 0 5 15 847 855 9 -3 6 16 815 810 8 0 2 18 351 358 13  
-3 7 13 97 82 31 -2 6 15 93 32 36 -2 6 16 774 774 6 -1 3 18 401 406 9  
-2 7 13 477 470 7 -2 6 14 352 348 8 -1 6 15 200 189 16 -1 6 16 167 165 21

-1	7	13	617	623	7	7	1	1	6	14	523	528	7	0	6	15	601	588	10	0	6	16	545	553	31	-2	4	18	142	165	34	
0	7	13	0	17	1	0	6	14	305	303	15	78	29	-3	7	15	30	78	29	0	-3	7	16	600	589	13	-1	4	18	63	97	63
-3	8	13	396	379	9	-3	7	14	641	647	6	46	1	-2	7	15	0	46	1	-2	7	16	298	290	54	0	4	18	121	114	48	
-2	8	13	654	648	7	-2	7	14	69	90	68	534	11	-1	7	15	550	534	11	0	1	17	527	533	8	-2	5	18	593	607	9	
-1	8	13	0	79	1	-1	7	14	424	420	9	185	86	-3	8	15	182	185	86	0	2	17	866	891	7	-1	5	18	0	10	1	
-4	9	13	502	496	13	0	7	14	155	166	34	1137	12	0	0	16	1120	1137	12	-1	3	17	458	459	7	0	1	19	177	150	30	
0	0	14	1516	1528	15	-4	8	14	260	265	18	758	6	0	1	16	761	758	6	0	3	17	303	308	13	0	2	19	227	231	24	
0	1	14	596	600	5	-3	8	14	408	417	10	296	12	-1	2	16	304	296	12	-1	4	17	520	531	7	-1	3	19	551	549	7	
-1	2	14	193	200	11	-2	8	14	301	300	20	49	37	0	2	16	96	49	37	0	4	17	607	608	10	0	3	19	694	714	11	
0	2	14	359	362	8	0	1	15	42	82	42	715	5	-1	3	16	713	715	5	-2	5	17	405	396	9	-1	4	19	10	33	10	
-1	3	14	802	816	5	0	2	15	242	230	11	731	8	0	3	16	735	731	8	-1	5	17	241	248	14	0	1	20	97	66	97	
0	3	14	92	44	35	-1	3	15	968	980	4	58	27	-2	4	16	28	58	27	0	5	17	375	370	16	-1	2	20	618	647	13	
-2	4	14	813	821	7	0	3	15	830	825	8	103	31	-1	4	16	97	103	31	-2	6	17	485	485	13	0	2	20	240	261	25	
-1	4	14	422	416	6	-1	4	15	200	199	12	648	8	0	4	16	636	648	8	-1	6	17	458	481	23	0	2	20	240	261	25	
0	4	14	454	448	9	0	4	15	746	752	8	540	6	-2	5	16	546	540	6	0	0	18	658	660	16	-1	3	20	133	165	57	
-2	5	14	352	344	7	-2	5	15	157	165	16	64	39	-1	5	16	92	64	39	0	1	18	633	644	9	0	2	20	240	261	25	
-1	5	14	214	218	11	-1	5	15	29	64	29	786	9	0	5	16	771	786	9	-1	2	18	0	43	1	-1	3	20	133	165	57	