

Acta Cryst. (1961). 14, 795

Zur Struktur des Phosphophyllits,  $\text{Zn}_2\text{Fe}[\text{PO}_4]_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ . Von W. KLEBER, F. LIEBAU\* und E. PIATKOWIAK,  
Mineralogisch-Petrographisches Institut und Museum der Humboldt-Universität, Berlin, Germany

(Eingegangen am 9. Januar 1961)

Auf Grund von mit Cu K-Strahlung angefertigten Weissenberg-Aufnahmen der reziproken Netzebenen  $h0l$ ,  $h1l$  und  $hk0$  wurden Gitterkonstanten und Raumgruppe von Phosphophyllit (Hagendorf/Bayern) bestimmt. Die Angaben von Wolfe (1940) konnten bestätigt werden:

$$P2_1/c; a_0 = 10,23, b_0 = 5,08, c_0 = 10,49 \text{ \AA}; \\ \beta = 120^\circ 15'; Z = 2.$$

Der morphologische Aspekt befindet sich in guter Übereinstimmung mit der röntgenographisch ermittelten Raumgruppe (Kleber, 1935, 1953).

Die Pattersonprojektion  $P(u, w)$  wurde aus 84  $h0l$ -Reflexen mit Hilfe von Beevers-Lipson-Streifen mit der Genauigkeit von  $1/60$  der Zellkante berechnet. Durch Auswertung dieser Projektion konnten die Positionen der schweren Atome Zn, Fe und P festgelegt werden. Aus der Differenzsynthese ( $\rho_0 - \rho_{\text{Fe, Zn, P}}$ ) der  $(x, z)$ -Projektion wurden die Lagen der Sauerstoffatome und Wassermoleküle entnommen und durch Berechnung und Auswertung der Elektronendichteprojektion  $\rho(x, z)$  verfeinert (Fig. 1). Der hierfür berechnete  $R$ -Faktor beträgt 0,20.

Es wurden zunächst die  $y$ -Parameter unter Berücksichtigung der Koordinationspolyeder indirekt berechnet und durch Überprüfung der Abstände kontrolliert. Die endgültigen Atomparameter sind in folgender Tabelle zusammengestellt:

	$x$	$y$	$z$
Fe	0,000	0,00	0,000
Zn	0,500	0,78	0,148
P	0,317	0,21	0,000
O <sub>I</sub>	0,159	0,34	0,467
O <sub>II</sub>	0,344	0,50	0,019
O <sub>III</sub>	0,333	0,46	0,390
O <sub>IV</sub>	0,415	0,39	0,155
H <sub>2</sub> O <sub>I</sub>	0,002	0,33	0,129
H <sub>2</sub> O <sub>II</sub>	0,183	0,17	0,188

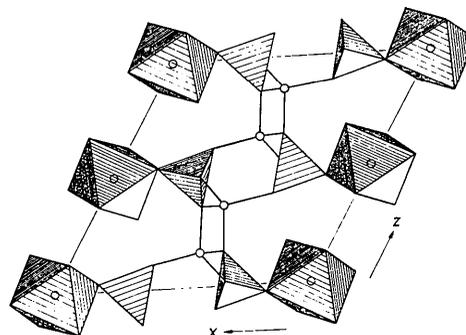


Fig. 2. Phosphophyllit-Struktur [Projektion auf (010)].

Der gewonnene Strukturvorschlag in der  $(x, z)$ -Projektion ist in Fig. 2 schematisch dargestellt. Die Fe-Atome sind oktaedrisch von 4 in einer Ebene liegenden  $\text{H}_2\text{O}$ -Molekülen und zwei O-Atomen umgeben. Die Zn-Atome sind verzerrt-tetraedrisch von 4 O-Atomen koordiniert. Diese O-Atome gehören 4 verschiedenen  $[\text{PO}_4]$ -Tetraedern an.

Auf Grund des angegebenen Strukturbildes können die am Phosphophyllit beobachteten Spaltbarkeiten parallel (100) und  $(\bar{1}02)$  plausibel gedeutet werden: Bei der Spaltung nach (100) müssen lediglich Bindungen zwischen Fe und O, bei der Spaltung nach  $(\bar{1}02)$  Bindungen zwischen Zn und O getrennt werden.

#### Literatur

- KLEBER, W. (1935). *Neues Jb. Miner. A*, **70**, 203.  
KLEBER, W. (1953). *Fortschr. Min.* **31**, 52.  
WOLFE, C. W. (1940). *Amer. Min.* **25**, 792.

\* Jetzige Anschrift: Max-Planck-Institut für Silikatforschung, Würzburg 4, Neunerplatz 2, Deutschland.

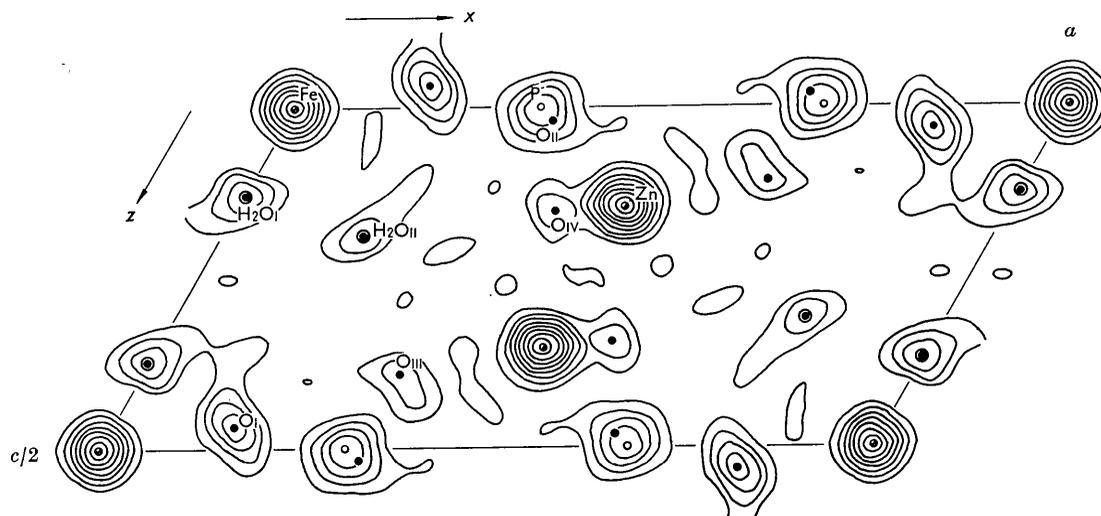


Fig. 1. Elektronendichteprojektion  $\rho(x, z)$ .