

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 angefertigter 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 _I	0,159	0,34	0,467
O _{II}	0,344	0,50	0,019
O _{III}	0,333	0,46	0,390
O _{IV}	0,415	0,39	0,155
H ₂ O _I	0,002	0,33	0,129
H ₂ O _{II}	0,183	0,17	0,188

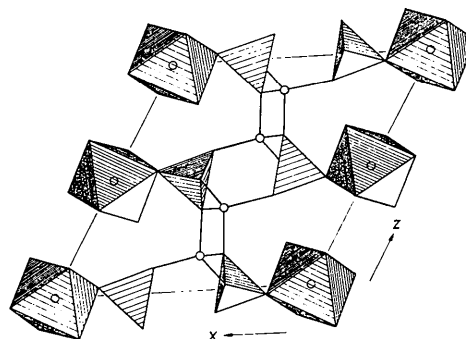


Fig. 2. Phosphophyllit-Struktur [Projektion auf (010)].

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 H_2O -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.

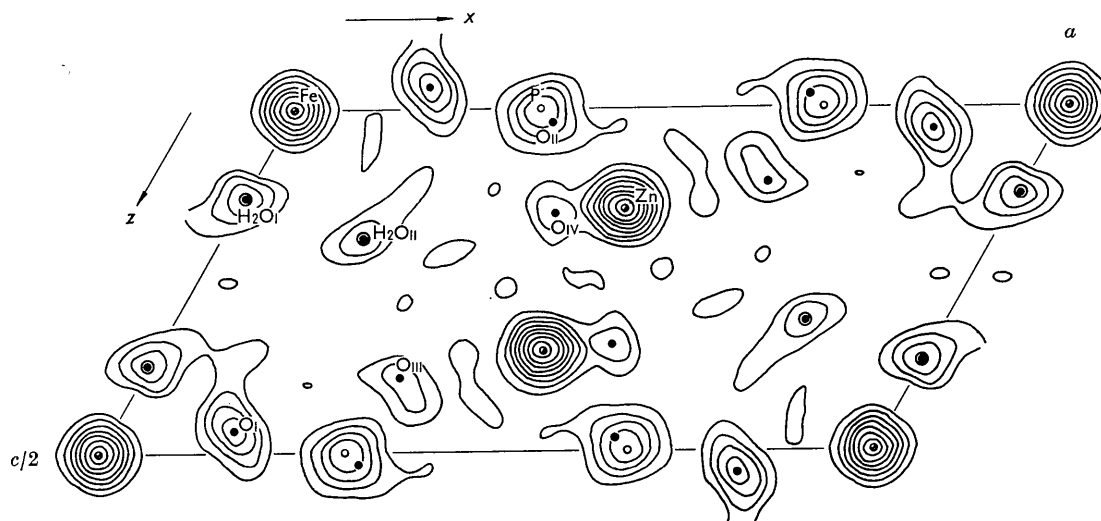


Fig. 1. Elektronendichteprojektion $\rho(x, z)$.