

Phosphophyllite, $\text{Zn}_2\text{Fe}^{2+}(\text{PO}_4)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

Phosphophyllite

Hill R J

American Mineralogist 62 (1977) 812-817

The crystal structure of phosphophyllite

10.378 5.084 10.553 90 121.14 90 P2₁/c

atom	x	y	z	Wyckoff
Fe	0	0	0	2a
Zn	0.50024	0.31002	0.35646	4e
P	0.68924	0.28707	0.19476	4e
O1	-0.0046	0.2958	0.1392	4e
O2	0.1803	0.2897	0.5030	4e
O3	0.8542	0.2582	0.3158	4e
O4	0.3526	0.0728	0.3420	4e
O5	0.6617	0.1323	0.0582	4e
O6	0.5860	0.1527	0.2445	4e
H1	-0.030	0.2760	0.195	4e
H2	0.054	0.403	0.177	4e
H3	0.231	0.358	0.491	4e
H4	0.219	0.154	0.547	4e

$$(12 \times 4e) + (1 \times 2a)$$

**Raman Active
Modes**

WP	A _g	A _u	B _g	B _u
4e	3	.	3	.
2a

Total number of modes:

$$36A_g + 36B_g = 72$$