

data\_block\_1  
\_audit\_creation\_date 'Mon Mar 1 13:05:52 2010'  
\_audit\_creation\_method 'generated by GDIS v0.90'

\_cell\_length\_a 7.0569  
\_cell\_length\_b 7.0351  
\_cell\_length\_c 16.9607  
\_cell\_angle\_alpha 90.02  
\_cell\_angle\_beta 90.03  
\_cell\_angle\_gamma 119.59

\_symmetry\_space\_group\_name\_H-M 'P 1'  
\_symmetry\_Int\_Tables\_number 1

loop\_  
\_atom\_site\_label  
\_atom\_site\_fract\_x  
\_atom\_site\_fract\_y  
\_atom\_site\_fract\_z  
S 0.6758 0.3317 0.6387  
O 0.6733 0.3308 0.7265  
O 0.8050 0.2049 0.4741  
H 0.8766 0.1327 0.4469  
O 0.8078 0.5895 0.4790  
H 0.8655 0.7095 0.4401  
O 0.4337 0.2098 0.4655  
H 0.2829 0.1380 0.4441  
Al 0.0075 0.4938 0.5011  
O 0.1117 0.5540 0.3938  
Al 0.5182 0.0001 0.5000  
O 0.4570 0.8974 0.3918  
Al 0.5133 0.5051 0.5015  
O 0.4595 0.5504 0.3919  
O 0.5597 0.4472 0.6090  
O 0.5608 0.1008 0.6087  
O 0.9080 0.4448 0.6107  
S 0.3406 0.6646 0.3631  
O 0.3358 0.6607 0.2755  
O 0.5996 0.7946 0.5248  
H 0.7302 0.8589 0.5588  
O 0.2182 0.4104 0.5258  
H 0.1495 0.2739 0.5571  
O 0.2244 0.7901 0.5368  
H 0.1440 0.8635 0.5562  
S 0.9985 0.9966 0.3058  
O 0.0035 0.9990 0.3931  
O 0.1273 0.8644 0.1418  
H 0.1980 0.7933 0.1133  
O 0.1211 0.2355 0.1312  
H 0.1936 0.3883 0.1117

O	0.7427	0.8617	0.1446
H	0.6222	0.8024	0.1060
Al	0.3318	0.1524	0.1678
O	0.4334	0.2111	0.0592
Al	0.8377	0.6612	0.1681
O	0.7774	0.5572	0.0603
Al	0.8266	0.1549	0.1658
O	0.7787	0.2078	0.0577
O	0.8800	0.1137	0.2767
O	0.8857	0.7662	0.2765
O	0.2270	0.1158	0.2746
S	0.6642	0.3275	0.0296
O	0.6651	0.3310	0.9420
O	0.9218	0.4501	0.1918
H	0.0505	0.5142	0.2270
O	0.5380	0.0699	0.1938
H	0.4695	0.9273	0.2215
O	0.5424	0.4445	0.2028
H	0.4712	0.5244	0.2253
Al	0.1689	0.8392	0.8319
O	0.2202	0.7957	0.9428
Al	0.1797	0.3443	0.8348
O	0.2237	0.4471	0.9424
Al	0.6730	0.8365	0.8326
O	0.5662	0.7953	0.9401
S	0.0083	0.0143	0.6951
O	0.0081	0.0133	0.6078
O	0.2625	0.1334	0.8586
H	0.3995	0.2014	0.8896
O	0.8791	0.7527	0.8586
H	0.8117	0.6166	0.8900
O	0.8856	0.1292	0.8687
H	0.8118	0.2059	0.8916
S	0.3390	0.6785	0.9717
O	0.3411	0.6776	0.0590
O	0.4684	0.5465	0.8076
H	0.5355	0.4762	0.7765
O	0.4611	0.9172	0.7983
H	0.5333	0.0669	0.7749
O	0.0847	0.5449	0.8084
H	0.9463	0.4760	0.7782
O	0.7799	0.9034	0.7258
O	0.1251	0.2483	0.7245
O	0.1235	0.8973	0.7244
H	0.2418	0.5232	0.6792
H	0.2907	0.7288	0.6159
H	0.3817	0.7748	0.7147
O	0.3431	0.6785	0.6655
H	0.7210	0.2302	0.3210
H	0.5649	0.2787	0.3831
H	0.6036	0.3664	0.2843
O	0.6651	0.3315	0.3341
H	-0.0372	0.0642	0.9506
H	0.0986	-0.0544	0.9869

H	0.0550	0.1066	1.0491
O	0.0001	0.0047	1.0003