

Table S6,4

Torsion or Conformation Angles of the ethoxy-NHP form

(1)	(2)	(3)	(4)	angle	(1)	(2)	(3)	(4)	angle
O (1)	C (1)	N (1)	O (2)	6.7 (6)	N (1)	C (1)	C (2)	C (3)	178.3 (3)
O (1)	C (1)	N (1)	C (1)	175.3 (2)	C (1)	N (1)	O (2)	C (5)	-96.2 (3)
O (1)	C (1)	C (2)	C (2)	-176.6 (3)	C (1)	N (1)	C (1)	C (2)	3.4 (5)
O (1)	C (1)	C (2)	C (3)	3.2 (6)	C (1)	C (2)	C (2)	C (1)	0
O (2)	N (1)	C (1)	C (2)	-171.9 (3)	C (1)	C (2)	C (2)	C (3)	179.8 (3)
O (2)	N (1)	C (1)	C (2)	171.9 (3)	C (1)	C (2)	C (3)	C (4)	179.8 (3)
N (1)	O (2)	C (5)	C (6)	180	C (2)	C (2)	C (3)	C (4)	0.4 (3)
N (1)	C (1)	C (2)	C (2)	1.9 (3)	C (2)	C (3)	C (4)	C (4)	0.4 (3)
N (1)	C (1)	C (2)	C (3)	-178.3 (3)	C (3)	C (2)	C (2)	C (3)	0
N (1)	C (1)	C (2)	C (2)	-1.9 (3)	C (3)	C (4)	C (4)	C (3)	0