

Z-matrices for tautomers indicated in manuscript:

EE

C

C 1 r2
 O 2 r3 1 a3
 C 2 r4 1 a4 3 d4
 O 4 r5 2 a5 1 d5
 C 4 r6 2 a6 1 d6
 C 6 r7 4 a7 2 d7
 C 7 r8 6 a8 4 d8
 C 8 r9 7 a9 6 d9
 C 9 r10 8 a10 7 d10
 C 10 r11 9 a11 8 d11
 C 1 r12 2 a12 3 d12
 H 6 r13 4 a13 2 d13
 H 8 r14 7 a14 6 d14
 H 9 r15 8 a15 7 d15
 H 10 r16 9 a16 8 d16
 H 11 r17 10 a17 9 d17
 N 12 r18 1 a18 2 d18
 C 12 r19 1 a19 2 d19
 C 19 r20 12 a20 1 d20
 C 20 r21 19 a21 12 d21
 C 21 r22 20 a22 19 d22
 H 1 r23 2 a23 3 d23
 H 19 r24 12 a24 1 d24
 H 20 r25 19 a25 12 d25
 H 21 r26 20 a26 19 d26
 H 22 r27 21 a27 20 d27
 H 18 r28 12 a28 1 d28
 N 8 r29 7 a29 6 d29
 H 29 r30 8 a30 7 d30

Variables:

r2= 1.4210
 r3= 1.2246
 a3= 125.19
 r4= 1.5404
 a4= 116.28
 d4= 180.03
 r5= 1.2246
 a5= 118.53
 d5= 359.97
 r6= 1.4210
 a6= 116.28
 d6= 179.97
 r7= 1.3788
 a7= 122.27
 d7= 180.03
 r8= 2.4013

a8= 149.54
d8= 359.97
r9= 1.3429
a9= 93.52
d9= 179.97
r10= 1.4314
a10= 117.31
d10= 0.03
r11= 1.3461
a11= 121.05
d11= 0.03
r12= 1.3788
a12= 122.27
d12= 0.03
r13= 1.0691
a13= 118.84
d13= 0.03
r14= 1.0732
a14= 143.27
d14= 0.03
r15= 1.0719
a15= 121.06
d15= 180.03
r16= 1.0758
a16= 119.25
d16= 179.97
r17= 1.0731
a17= 121.48
d17= 179.97
r18= 1.3618
a18= 121.70
d18= 0.03
r19= 1.4411
a19= 123.14
d19= 179.97
r20= 1.3461
a20= 120.80
d20= 180.03
r21= 1.4314
a21= 121.05
d21= 359.97
r22= 1.3429
a22= 117.31
d22= 0.03
r23= 1.0691
a23= 118.84
d23= 180.03
r24= 1.0731
a24= 117.72
d24= 0.03
r25= 1.0758

a25= 119.69
 d25= 180.03
 r26= 1.0719
 a26= 121.64
 d26= 180.03
 r27= 1.0732
 a27= 123.21
 d27= 179.97
 r28= 1.0044
 a28= 114.61
 d28= 359.97
 r29= 1.3557
 a29= 27.98
 d29= 0.03
 r30= 1.0044
 a30= 121.21
 d30= 180.03

EE'

C

C 1 r2

O 2 r3 1 a3

C 2 r4 1 a4 3 d4

O 4 r5 2 a5 1 d5

C 4 r6 2 a6 1 d6

C 6 r7 4 a7 2 d7

C 7 r8 6 a8 4 d8

C 8 r9 7 a9 6 d9

C 9 r10 8 a10 7 d10

C 10 r11 9 a11 8 d11

C 1 r12 2 a12 3 d12

H 6 r13 4 a13 2 d13

H 8 r14 7 a14 6 d14

H 9 r15 8 a15 7 d15

H 10 r16 9 a16 8 d16

H 11 r17 10 a17 9 d17

N 12 r18 1 a18 2 d18

C 12 r19 1 a19 2 d19

C 19 r20 12 a20 1 d20

C 20 r21 19 a21 12 d21

C 21 r22 20 a22 19 d22

H 1 r23 2 a23 3 d23

H 19 r24 12 a24 1 d24

H 20 r25 19 a25 12 d25

H 21 r26 20 a26 19 d26

H 22 r27 21 a27 20 d27

H 18 r28 12 a28 1 d28

N 8 r29 7 a29 6 d29

H 29 r30 8 a30 7 d30

Variables:

r2= 1.4278
r3= 1.2203
a3= 125.12
r4= 1.5294
a4= 117.37
d4= 178.96
r5= 1.2203
a5= 117.50
d5= 238.93
r6= 1.4278
a6= 117.37
d6= 59.90
r7= 1.3791
a7= 122.40
d7= 177.03
r8= 2.3999
a8= 149.16
d8= 1.18
r9= 1.3433
a9= 93.52
d9= 180.08
r10= 1.4307
a10= 117.28
d10= 0.04
r11= 1.3465
a11= 121.10
d11= 359.97
r12= 1.3791
a12= 122.40
d12= 358.07
r13= 1.0721
a13= 119.36
d13= 359.03
r14= 1.0732
a14= 143.26
d14= 359.97
r15= 1.0719
a15= 121.07
d15= 179.97
r16= 1.0758
a16= 119.25
d16= 179.91
r17= 1.0732
a17= 121.42
d17= 179.85
r18= 1.3609
a18= 121.30
d18= 1.32
r19= 1.4405
a19= 123.46

d19= 181.34
 r20= 1.3465
 a20= 120.72
 d20= 179.97
 r21= 1.4307
 a21= 121.09
 d21= 359.97
 r22= 1.3433
 a22= 117.28
 d22= 359.97
 r23= 1.0721
 a23= 119.36
 d23= 180.03
 r24= 1.0732
 a24= 117.86
 d24= 0.08
 r25= 1.0758
 a25= 119.65
 d25= 180.03
 r26= 1.0719
 a26= 121.65
 d26= 180.03
 r27= 1.0732
 a27= 123.22
 d27= 180.10
 r28= 1.0054
 a28= 114.56
 d28= 359.56
 r29= 1.3552
 a29= 27.99
 d29= 0.26
 r30= 1.0054
 a30= 121.28
 d30= 180.64

EE''

C

C 1 r2

O 2 r3 1 a3

C 2 r4 1 a4 3 d4

O 4 r5 2 a5 1 d5

C 4 r6 2 a6 1 d6

C 6 r7 4 a7 2 d7

C 7 r8 6 a8 4 d8

C 8 r9 7 a9 6 d9

C 9 r10 8 a10 7 d10

C 10 r11 9 a11 8 d11

C 1 r12 2 a12 3 d12

H 6 r13 4 a13 2 d13
 H 8 r14 7 a14 6 d14
 H 9 r15 8 a15 7 d15
 H 10 r16 9 a16 8 d16
 H 11 r17 10 a17 9 d17
 N 12 r18 1 a18 2 d18
 C 12 r19 1 a19 2 d19
 C 19 r20 12 a20 1 d20
 C 20 r21 19 a21 12 d21
 C 21 r22 20 a22 19 d22
 H 1 r23 2 a23 3 d23
 H 19 r24 12 a24 1 d24
 H 20 r25 19 a25 12 d25
 H 21 r26 20 a26 19 d26
 H 22 r27 21 a27 20 d27
 H 18 r28 12 a28 1 d28
 N 8 r29 7 a29 6 d29
 H 29 r30 8 a30 7 d30

Variables:

r2= 1.4090
 r3= 1.2383
 a3= 123.66
 r4= 1.5480
 a4= 115.31
 d4= 179.97
 r5= 1.2078
 a5= 115.72
 d5= 359.95
 r6= 1.4491
 a6= 125.05
 d6= 179.97
 r7= 1.3722
 a7= 136.58
 d7= 0.03
 r8= 2.4068
 a8= 154.01
 d8= 0.03
 r9= 1.3400
 a9= 94.21
 d9= 179.97
 r10= 1.4352
 a10= 116.87
 d10= 359.97
 r11= 1.3422
 a11= 121.01
 d11= 359.97
 r12= 1.3864
 a12= 122.91
 d12= 0.03
 r13= 1.0739
 a13= 109.39

d13= 180.03
r14= 1.0737
a14= 142.74
d14= 0.03
r15= 1.0720
a15= 121.29
d15= 179.97
r16= 1.0759
a16= 119.38
d16= 180.03
r17= 1.0729
a17= 121.05
d17= 179.97
r18= 1.3573
a18= 122.10
d18= 359.97
r19= 1.4375
a19= 122.58
d19= 179.97
r20= 1.3478
a20= 120.74
d20= 179.97
r21= 1.4291
a21= 121.00
d21= 359.97
r22= 1.3433
a22= 117.36
d22= 0.03
r23= 1.0679
a23= 118.65
d23= 180.03
r24= 1.0729
a24= 117.76
d24= 0.03
r25= 1.0756
a25= 119.70
d25= 179.97
r26= 1.0719
a26= 121.64
d26= 179.97
r27= 1.0731
a27= 123.28
d27= 180.03
r28= 1.0031
a28= 114.61
d28= 359.97
r29= 1.3580
a29= 27.84
d29= 0.03
r30= 1.0052
a30= 120.23

d30= 179.97

EK

N

C 1 r2

C 2 r3 1 a3

C 3 r4 2 a4 1 d4

C 4 r5 3 a5 2 d5

H 2 r6 1 a6 3 d6

H 3 r7 2 a7 1 d7

H 4 r8 3 a8 2 d8

H 5 r9 4 a9 3 d9

C 1 r10 2 a10 3 d10

C 10 r11 1 a11 2 d11

C 11 r12 10 a12 1 d12

O 12 r13 11 a13 10 d13

C 12 r14 11 a14 10 d14

O 14 r15 12 a15 11 d15

C 14 r16 12 a16 11 d16

C 16 r17 14 a17 12 d17

N 17 r18 16 a18 14 d18

C 18 r19 17 a19 16 d19

C 19 r20 18 a20 17 d20

C 20 r21 19 a21 18 d21

C 21 r22 20 a22 19 d22

H 16 r23 14 a23 12 d23

H 19 r24 18 a24 17 d24

H 20 r25 19 a25 18 d25

H 21 r26 20 a26 19 d26

H 22 r27 21 a27 20 d27

H 11 r28 10 a28 1 d28

H 16 r29 14 a29 12 d29

H 1 r30 2 a30 3 d30

Variables:

r2= 2.3634

r3= 1.3481

a3= 89.38

r4= 1.4287

a4= 121.04

d4= 359.97

r5= 1.3438

a5= 117.37

d5= 0.03

r6= 1.0730

a6= 149.12

d6= 180.03

r7= 1.0756

a7= 119.67

d7= 179.97
r8= 1.0719
a8= 121.63
d8= 180.03
r9= 1.0730
a9= 123.30
d9= 180.03
r10= 1.3582
a10= 33.30
d10= 179.97
r11= 1.3850
a11= 121.41
d11= 180.03
r12= 1.4128
a12= 122.07
d12= 0.27
r13= 1.2256
a13= 126.32
d13= 359.44
r14= 1.5392
a14= 116.67
d14= 179.60
r15= 1.1901
a15= 120.90
d15= 6.48
r16= 1.5173
a16= 115.27
d16= 185.51
r17= 1.5070
a17= 113.48
d17= 174.17
r18= 1.3211
a18= 116.46
d18= 258.17
r19= 1.3227
a19= 118.58
d19= 180.03
r20= 1.3808
a20= 123.63
d20= 0.20
r21= 1.3856
a21= 117.81
d21= 359.95
r22= 1.3792
a22= 118.88
d22= 359.97
r23= 1.0863
a23= 107.26
d23= 297.89
r24= 1.0768
a24= 116.01

d24= 180.03
 r25= 1.0745
 a25= 120.59
 d25= 179.87
 r26= 1.0760
 a26= 120.66
 d26= 180.03
 r27= 1.0747
 a27= 120.98
 d27= 180.36
 r28= 1.0696
 a28= 118.86
 d28= 180.14
 r29= 1.0822
 a29= 108.40
 d29= 52.19
 r30= 1.0047
 a30= 148.16
 d30= 179.86

EK'

N
 C 1 r2
 C 2 r3 1 a3
 C 3 r4 2 a4 1 d4
 C 4 r5 3 a5 2 d5
 C 5 r6 4 a6 3 d6
 C 2 r7 1 a7 3 d7
 C 7 r8 2 a8 1 d8
 O 8 r9 7 a9 2 d9
 C 8 r10 7 a10 2 d10
 O 10 r11 8 a11 7 d11
 C 10 r12 8 a12 7 d12
 C 12 r13 10 a13 8 d13
 N 13 r14 12 a14 10 d14
 C 14 r15 13 a15 12 d15
 C 15 r16 14 a16 13 d16
 C 16 r17 15 a17 14 d17
 C 17 r18 16 a18 15 d18
 H 1 r19 2 a19 3 d19
 H 3 r20 2 a20 1 d20
 H 4 r21 3 a21 2 d21
 H 5 r22 4 a22 3 d22
 H 6 r23 5 a23 4 d23
 H 7 r24 2 a24 1 d24
 H 12 r25 10 a25 8 d25
 H 12 r26 10 a26 8 d26

H	15 r27	14 a27	13 d27
H	16 r28	15 a28	14 d28
H	17 r29	16 a29	15 d29
H	18 r30	17 a30	16 d30

Variables:

r2= 1.3566
 r3= 1.4364
 a3= 115.45
 r4= 1.3487
 a4= 120.62
 d4= 359.96
 r5= 1.4275
 a5= 121.05
 d5= 0.03
 r6= 1.3444
 a6= 117.33
 d6= 359.97
 r7= 1.3872
 a7= 121.37
 d7= 179.97
 r8= 1.4214
 a8= 122.00
 d8= 0.03
 r9= 1.2178
 a9= 124.77
 d9= 359.97
 r10= 1.5515
 a10= 119.09
 d10= 180.23
 r11= 1.1860
 a11= 118.34
 d11= 180.03
 r12= 1.5233
 a12= 119.16
 d12= 0.78
 r13= 1.5091
 a13= 114.35
 d13= 184.99
 r14= 1.3201
 a14= 116.08
 d14= 114.95
 r15= 1.3239
 a15= 118.61
 d15= 178.98
 r16= 1.3796
 a16= 123.54
 d16= 359.72
 r17= 1.3866
 a17= 117.85
 d17= 0.14
 r18= 1.3783

a18= 118.96
 d18= 359.97
 r19= 1.0062
 a19= 114.56
 d19= 180.03
 r20= 1.0731
 a20= 118.02
 d20= 180.03
 r21= 1.0757
 a21= 119.65
 d21= 180.03
 r22= 1.0718
 a22= 121.65
 d22= 180.03
 r23= 1.0730
 a23= 123.32
 d23= 180.03
 r24= 1.0695
 a24= 116.98
 d24= 179.88
 r25= 1.0828
 a25= 109.19
 d25= 306.09
 r26= 1.0885
 a26= 107.59
 d26= 61.89
 r27= 1.0766
 a27= 116.01
 d27= 179.83
 r28= 1.0744
 a28= 120.60
 d28= 180.03
 r29= 1.0758
 a29= 120.64
 d29= 179.81
 r30= 1.0739
 a30= 121.04
 d30= 179.07

EK''

N

C 1 r2

C 2 r3 1 a3

C 3 r4 2 a4 1 d4

C 4 r5 3 a5 2 d5

C 5 r6 4 a6 3 d6

C 2 r7 1 a7 3 d7

C 7 r8 2 a8 1 d8

O 8 r9 7 a9 2 d9

C 8 r10 7 a10 2 d10
 O 10 r11 8 a11 7 d11
 C 10 r12 8 a12 7 d12
 C 12 r13 10 a13 8 d13
 N 13 r14 12 a14 10 d14
 C 14 r15 13 a15 12 d15
 C 15 r16 14 a16 13 d16
 C 16 r17 15 a17 14 d17
 C 17 r18 16 a18 15 d18
 H 1 r19 2 a19 3 d19
 H 3 r20 2 a20 1 d20
 H 4 r21 3 a21 2 d21
 H 5 r22 4 a22 3 d22
 H 6 r23 5 a23 4 d23
 H 7 r24 2 a24 1 d24
 H 12 r25 10 a25 8 d25
 H 12 r26 10 a26 8 d26
 H 18 r27 17 a27 16 d27
 H 17 r28 16 a28 15 d28
 H 16 r29 15 a29 14 d29
 H 15 r30 14 a30 13 d30

Variables:

r2= 1.3607
 r3= 1.4489
 a3= 114.24
 r4= 1.3434
 a4= 121.45
 d4= 0.05
 r5= 1.4332
 a5= 121.01
 d5= 0.03
 r6= 1.3397
 a6= 116.97
 d6= 0.03
 r7= 1.3772
 a7= 126.47
 d7= 180.03
 r8= 1.4400
 a8= 136.08
 d8= 359.97
 r9= 1.2084
 a9= 120.95
 d9= 179.97
 r10= 1.5462
 a10= 125.14
 d10= 0.03
 r11= 1.1962
 a11= 123.40
 d11= 359.97
 r12= 1.5152
 a12= 114.56

d12= 179.79
r13= 1.5066
a13= 112.98
d13= 176.92
r14= 1.3226
a14= 116.31
d14= 273.05
r15= 1.3203
a15= 118.56
d15= 179.82
r16= 1.3831
a16= 123.63
d16= 0.19
r17= 1.3835
a17= 117.83
d17= 0.05
r18= 1.3818
a18= 118.86
d18= 359.88
r19= 1.0006
a19= 116.43
d19= 180.33
r20= 1.0726
a20= 117.50
d20= 180.03
r21= 1.0757
a21= 119.58
d21= 179.97
r22= 1.0718
a22= 121.82
d22= 179.97
r23= 1.0732
a23= 123.30
d23= 179.91
r24= 1.0737
a24= 114.15
d24= 180.03
r25= 1.0847
a25= 107.60
d25= 301.08
r26= 1.0823
a26= 107.80
d26= 55.13
r27= 1.0749
a27= 120.90
d27= 179.90
r28= 1.0759
a28= 120.70
d28= 179.75
r29= 1.0744
a29= 120.56

d29= 179.77
 r30= 1.0768
 a30= 116.07
 d30= 179.97

KK

N

C 1 r2
 C 2 r3 1 a3
 C 3 r4 2 a4 1 d4
 C 4 r5 3 a5 2 d5
 C 1 r6 2 a6 3 d6
 C 2 r7 1 a7 3 d7
 C 7 r8 2 a8 1 d8
 O 8 r9 7 a9 2 d9
 C 8 r10 7 a10 2 d10
 O 10 r11 8 a11 7 d11
 C 10 r12 8 a12 7 d12
 C 12 r13 10 a13 8 d13
 N 13 r14 12 a14 10 d14
 C 14 r15 13 a15 12 d15
 C 15 r16 14 a16 13 d16
 C 16 r17 15 a17 14 d17
 C 17 r18 16 a18 15 d18
 H 3 r19 2 a19 1 d19
 H 4 r20 3 a20 2 d20
 H 5 r21 4 a21 3 d21
 H 6 r22 1 a22 2 d22
 H 7 r23 2 a23 1 d23
 H 7 r24 2 a24 1 d24
 H 12 r25 10 a25 8 d25
 H 12 r26 10 a26 8 d26
 H 15 r27 14 a27 13 d27
 H 16 r28 15 a28 14 d28
 H 17 r29 16 a29 15 d29
 H 18 r30 17 a30 16 d30

Variables:

r2= 1.3218
 r3= 1.3882
 a3= 122.46
 r4= 1.3816
 a4= 118.71
 d4= 359.72
 r5= 1.3837
 a5= 118.87
 d5= 0.06
 r6= 1.3208

a6= 118.52
d6= 0.34
r7= 1.5071
a7= 116.09
d7= 180.16
r8= 1.5150
a8= 112.95
d8= 90.57
r9= 1.1888
a9= 124.85
d9= 8.24
r10= 1.5394
a10= 115.98
d10= 186.46
r11= 1.1888
a11= 119.15
d11= 349.36
r12= 1.5150
a12= 115.98
d12= 171.03
r13= 1.5071
a13= 112.95
d13= 186.46
r14= 1.3218
a14= 116.09
d14= 90.58
r15= 1.3208
a15= 118.52
d15= 180.50
r16= 1.3828
a16= 123.57
d16= 359.79
r17= 1.3837
a17= 117.88
d17= 0.03
r18= 1.3816
a18= 118.87
d18= 0.07
r19= 1.0748
a19= 120.36
d19= 179.89
r20= 1.0758
a20= 120.44
d20= 180.03
r21= 1.0743
a21= 121.58
d21= 179.97
r22= 1.0766
a22= 116.07
d22= 179.97
r23= 1.0861

a23= 111.85
 d23= 211.90
 r24= 1.0833
 a24= 109.68
 d24= 329.78
 r25= 1.0833
 a25= 108.22
 d25= 308.08
 r26= 1.0861
 a26= 107.41
 d26= 62.66
 r27= 1.0766
 a27= 116.07
 d27= 179.97
 r28= 1.0743
 a28= 120.53
 d28= 180.15
 r29= 1.0758
 a29= 120.69
 d29= 180.11
 r30= 1.0748
 a30= 120.93
 d30= 179.90

KK'

N

C 1 r2
 C 2 r3 1 a3
 C 3 r4 2 a4 1 d4
 C 4 r5 3 a5 2 d5
 C 1 r6 2 a6 3 d6
 C 2 r7 1 a7 3 d7
 C 7 r8 2 a8 1 d8
 O 8 r9 7 a9 2 d9
 C 8 r10 7 a10 2 d10
 O 10 r11 8 a11 7 d11
 C 10 r12 8 a12 7 d12
 C 12 r13 10 a13 8 d13
 C 13 r14 12 a14 10 d14
 C 14 r15 13 a15 12 d15
 C 15 r16 14 a16 13 d16
 C 16 r17 15 a17 14 d17
 N 13 r18 12 a18 10 d18
 H 3 r19 2 a19 1 d19
 H 4 r20 3 a20 2 d20
 H 5 r21 4 a21 3 d21
 H 6 r22 1 a22 2 d22

H 7 r23 2 a23 1 d23
 H 7 r24 2 a24 1 d24
 H 12 r25 10 a25 8 d25
 H 12 r26 10 a26 8 d26
 H 14 r27 13 a27 12 d27
 H 15 r28 14 a28 13 d28
 H 16 r29 15 a29 14 d29
 H 17 r30 16 a30 15 d30

Variables:

r2= 1.3203
 r3= 1.3894
 a3= 122.58
 r4= 1.3798
 a4= 118.58
 d4= 359.84
 r5= 1.3855
 a5= 118.93
 d5= 0.06
 r6= 1.3230
 a6= 118.50
 d6= 0.24
 r7= 1.5093
 a7= 115.84
 d7= 179.53
 r8= 1.5213
 a8= 113.71
 d8= 106.60
 r9= 1.1840
 a9= 123.25
 d9= 15.72
 r10= 1.5578
 a10= 118.90
 d10= 194.43
 r11= 1.1839
 a11= 117.84
 d11= 179.97
 r12= 1.5212
 a12= 118.88
 d12= 0.03
 r13= 1.5092
 a13= 113.71
 d13= 194.25
 r14= 1.3894
 a14= 121.56
 d14= 286.17
 r15= 1.3797
 a15= 118.59
 d15= 180.34
 r16= 1.3855
 a16= 118.92
 d16= 0.06

r17= 1.3808
 a17= 117.93
 d17= 359.97
 r18= 1.3203
 a18= 115.86
 d18= 106.65
 r19= 1.0741
 a19= 120.35
 d19= 180.60
 r20= 1.0757
 a20= 120.41
 d20= 180.15
 r21= 1.0743
 a21= 121.53
 d21= 179.97
 r22= 1.0764
 a22= 116.05
 d22= 179.97
 r23= 1.0891
 a23= 110.73
 d23= 227.27
 r24= 1.0826
 a24= 108.19
 d24= 344.21
 r25= 1.0827
 a25= 109.76
 d25= 315.58
 r26= 1.0891
 a26= 107.30
 d26= 71.45
 r27= 1.0742
 a27= 120.35
 d27= 1.10
 r28= 1.0756
 a28= 120.41
 d28= 180.16
 r29= 1.0743
 a29= 121.53
 d29= 179.97
 r30= 1.0764
 a30= 120.47
 d30= 179.97

OE

C

C 1 r2

O 2 r3 1 a3

C 2 r4 1 a4 3 d4
 C 4 r5 2 a5 1 d5
 C 5 r6 4 a6 2 d6
 C 6 r7 5 a7 4 d7
 C 7 r8 6 a8 5 d8
 C 8 r9 7 a9 6 d9
 C 9 r10 8 a10 7 d10
 C 1 r11 2 a11 3 d11
 H 5 r12 4 a12 2 d12
 H 7 r13 6 a13 5 d13
 H 8 r14 7 a14 6 d14
 H 9 r15 8 a15 7 d15
 H 10 r16 9 a16 8 d16
 N 11 r17 1 a17 2 d17
 C 11 r18 1 a18 2 d18
 C 18 r19 11 a19 1 d19
 C 19 r20 18 a20 11 d20
 C 20 r21 19 a21 18 d21
 H 1 r22 2 a22 3 d22
 H 18 r23 11 a23 1 d23
 H 19 r24 18 a24 11 d24
 H 20 r25 19 a25 18 d25
 H 21 r26 20 a26 19 d26
 H 17 r27 11 a27 1 d27
 N 7 r28 6 a28 5 d28
 O 4 r29 2 a29 1 d29
 H 29 r30 4 a30 2 d30

Variables:

r2= 1.4212
 r3= 1.2270
 a3= 124.55
 r4= 1.5115
 a4= 117.38
 d4= 180.03
 r5= 1.3346
 a5= 119.79
 d5= 179.97
 r6= 1.4640
 a6= 125.40
 d6= 180.03
 r7= 2.2911
 a7= 149.01
 d7= 359.97
 r8= 1.3792
 a8= 93.12
 d8= 180.03
 r9= 1.3880
 a9= 117.58
 d9= 359.97
 r10= 1.3769
 a10= 119.32

d10= 0.03
r11= 1.3815
a11= 122.13
d11= 0.03
r12= 1.0711
a12= 116.61
d12= 0.03
r13= 1.0765
a13= 146.43
d13= 359.97
r14= 1.0739
a14= 120.66
d14= 180.03
r15= 1.0760
a15= 120.46
d15= 179.97
r16= 1.0741
a16= 121.09
d16= 179.97
r17= 1.3599
a17= 121.80
d17= 359.97
r18= 1.4398
a18= 122.96
d18= 179.97
r19= 1.3468
a19= 120.75
d19= 179.97
r20= 1.4303
a20= 121.05
d20= 0.03
r21= 1.3434
a21= 117.30
d21= 359.97
r22= 1.0687
a22= 119.62
d22= 180.03
r23= 1.0731
a23= 117.80
d23= 0.03
r24= 1.0758
a24= 119.68
d24= 180.03
r25= 1.0719
a25= 121.65
d25= 179.97
r26= 1.0732
a26= 123.23
d26= 179.97
r27= 1.0052
a27= 114.46

d27= 359.97
 r28= 1.3219
 a28= 30.45
 d28= 0.03
 r29= 1.3324
 a29= 114.72
 d29= 359.97
 r30= 0.9555
 a30= 108.59
 d30= 179.97

OE'

C

C 1 r2

O 2 r3 1 a3

C 2 r4 1 a4 3 d4

C 4 r5 2 a5 1 d5

C 5 r6 4 a6 2 d6

C 6 r7 5 a7 4 d7

C 7 r8 6 a8 5 d8

C 8 r9 7 a9 6 d9

C 9 r10 8 a10 7 d10

C 1 r11 2 a11 3 d11

H 5 r12 4 a12 2 d12

H 7 r13 6 a13 5 d13

H 8 r14 7 a14 6 d14

H 9 r15 8 a15 7 d15

H 10 r16 9 a16 8 d16

N 11 r17 1 a17 2 d17

C 11 r18 1 a18 2 d18

C 18 r19 11 a19 1 d19

C 19 r20 18 a20 11 d20

C 20 r21 19 a21 18 d21

H 1 r22 2 a22 3 d22

H 18 r23 11 a23 1 d23

H 19 r24 18 a24 11 d24

H 20 r25 19 a25 18 d25

H 21 r26 20 a26 19 d26

H 17 r27 11 a27 1 d27

N 7 r28 6 a28 5 d28

O 4 r29 2 a29 1 d29

H 29 r30 4 a30 2 d30

Variables:

r2= 1.4274

r3= 1.2199

a3= 124.65

r4= 1.5133

a4= 118.01

d4= 179.88

r5= 1.3391
a5= 121.77
d5= 41.82
r6= 1.4644
a6= 125.31
d6= 176.59
r7= 2.2912
a7= 148.88
d7= 1.02
r8= 1.3787
a8= 93.18
d8= 179.97
r9= 1.3884
a9= 117.52
d9= 0.04
r10= 1.3764
a10= 119.36
d10= 359.97
r11= 1.3806
a11= 122.25
d11= 1.06
r12= 1.0722
a12= 117.81
d12= 358.25
r13= 1.0765
a13= 146.35
d13= 359.96
r14= 1.0738
a14= 120.71
d14= 180.03
r15= 1.0761
a15= 120.44
d15= 179.97
r16= 1.0743
a16= 120.99
d16= 179.89
r17= 1.3601
a17= 121.59
d17= 0.70
r18= 1.4400
a18= 123.16
d18= 180.79
r19= 1.3468
a19= 120.73
d19= 180.09
r20= 1.4302
a20= 121.08
d20= 359.95
r21= 1.3434
a21= 117.28
d21= 359.88

r22= 1.0705
 a22= 119.85
 d22= 183.66
 r23= 1.0732
 a23= 117.89
 d23= 0.11
 r24= 1.0758
 a24= 119.65
 d24= 179.97
 r25= 1.0719
 a25= 121.66
 d25= 180.03
 r26= 1.0731
 a26= 123.25
 d26= 180.19
 r27= 1.0051
 a27= 114.60
 d27= 359.13
 r28= 1.3224
 a28= 30.43
 d28= 0.04
 r29= 1.3217
 a29= 112.44
 d29= 219.27
 r30= 0.9553
 a30= 108.83
 d30= 183.15

OE''

C
 C 1 r2
 O 2 r3 1 a3
 C 2 r4 1 a4 3 d4
 C 4 r5 2 a5 1 d5
 C 5 r6 4 a6 2 d6
 C 6 r7 5 a7 4 d7
 C 7 r8 6 a8 5 d8
 C 8 r9 7 a9 6 d9
 C 9 r10 8 a10 7 d10
 C 1 r11 2 a11 3 d11
 H 5 r12 4 a12 2 d12
 H 7 r13 6 a13 5 d13
 H 8 r14 7 a14 6 d14
 H 9 r15 8 a15 7 d15
 H 10 r16 9 a16 8 d16
 N 11 r17 1 a17 2 d17
 C 11 r18 1 a18 2 d18

C 18 r19 11 a19 1 d19
 C 19 r20 18 a20 11 d20
 C 20 r21 19 a21 18 d21
 H 1 r22 2 a22 3 d22
 H 18 r23 11 a23 1 d23
 H 19 r24 18 a24 11 d24
 H 20 r25 19 a25 18 d25
 H 21 r26 20 a26 19 d26
 H 17 r27 11 a27 1 d27
 N 7 r28 6 a28 5 d28
 O 4 r29 2 a29 1 d29
 H 29 r30 4 a30 2 d30

Variables:

r2= 1.4181
 r3= 1.2331
 a3= 123.56
 r4= 1.5161
 a4= 122.21
 d4= 180.03
 r5= 1.3328
 a5= 123.60
 d5= 359.97
 r6= 1.4705
 a6= 128.94
 d6= 179.97
 r7= 2.2751
 a7= 150.90
 d7= 0.03
 r8= 1.3841
 a8= 93.37
 d8= 179.97
 r9= 1.3839
 a9= 117.52
 d9= 359.97
 r10= 1.3793
 a10= 118.87
 d10= 0.03
 r11= 1.3842
 a11= 122.44
 d11= 359.97
 r12= 1.0709
 a12= 116.79
 d12= 0.03
 r13= 1.0773
 a13= 146.54
 d13= 359.97
 r14= 1.0744
 a14= 120.70
 d14= 179.97
 r15= 1.0762
 a15= 120.77

d15= 180.03
r16= 1.0749
a16= 120.59
d16= 180.03
r17= 1.3579
a17= 122.10
d17= 359.97
r18= 1.4386
a18= 122.65
d18= 180.03
r19= 1.3475
a19= 120.76
d19= 180.03
r20= 1.4290
a20= 121.05
d20= 359.97
r21= 1.3433
a21= 117.28
d21= 0.03
r22= 1.0683
a22= 120.88
d22= 179.97
r23= 1.0731
a23= 117.92
d23= 359.97
r24= 1.0756
a24= 119.65
d24= 180.03
r25= 1.0718
a25= 121.66
d25= 180.03
r26= 1.0730
a26= 123.30
d26= 179.97
r27= 1.0041
a27= 114.74
d27= 0.03
r28= 1.3175
a28= 30.74
d28= 359.97
r29= 1.3273
a29= 111.89
d29= 179.97
r30= 0.9510
a30= 106.78
d30= 0.03

OK

```

C
C  1 r2
O  2 r3  1 a3
C  2 r4  1 a4  3 d4
O  4 r5  2 a5  1 d5
C  4 r6  2 a6  1 d6
C  6 r7  4 a7  2 d7
N  7 r8  6 a8  4 d8
C  8 r9  7 a9  6 d9
C  9 r10  8 a10  7 d10
C 10 r11  9 a11  8 d11
C 11 r12 10 a12  9 d12
C  1 r13  2 a13  3 d13
H  3 r14  2 a14  1 d14
H  6 r15  4 a15  2 d15
H  9 r16  8 a16  7 d16
H 10 r17  9 a17  8 d17
H 11 r18 10 a18  9 d18
H 12 r19 11 a19 10 d19
N 13 r20  1 a20  2 d20
C 13 r21  1 a21  2 d21
C 21 r22 13 a22  1 d22
C 22 r23 21 a23 13 d23
C 20 r24 13 a24  1 d24
H  1 r25  2 a25  3 d25
H 21 r26 13 a26  1 d26
H 22 r27 21 a27 13 d27
H 23 r28 22 a28 21 d28
H 24 r29 20 a29 13 d29
H  6 r30  4 a30  2 d30

```

Variables:

```

r2= 1.3322
r3= 1.3329
a3= 126.32
r4= 1.5100
a4= 120.11
d4= 180.08
r5= 1.1916
a5= 120.52
d5= 356.05
r6= 1.5182
a6= 116.19
d6= 176.53
r7= 1.5077
a7= 113.51
d7= 185.79
r8= 1.3206
a8= 116.33
d8= 103.85
r9= 1.3229

```

a9= 118.56
d9= 179.71
r10= 1.3807
a10= 123.59
d10= 359.77
r11= 1.3857
a11= 117.84
d11= 0.07
r12= 1.3792
a12= 118.88
d12= 0.03
r13= 1.4663
a13= 125.19
d13= 0.23
r14= 0.9561
a14= 108.67
d14= 359.71
r15= 1.0869
a15= 107.38
d15= 62.19
r16= 1.0767
a16= 116.02
d16= 179.97
r17= 1.0744
a17= 120.58
d17= 180.14
r18= 1.0759
a18= 120.66
d18= 179.97
r19= 1.0746
a19= 121.00
d19= 179.56
r20= 1.3319
a20= 118.40
d20= 359.76
r21= 1.3951
a21= 120.30
d21= 179.72
r22= 1.3786
a22= 119.01
d22= 180.03
r23= 1.3866
a23= 119.27
d23= 0.03
r24= 1.3211
a24= 119.26
d24= 179.97
r25= 1.0719
a25= 116.79
d25= 180.11
r26= 1.0741

a26= 119.89
 d26= 0.03
 r27= 1.0758
 a27= 120.23
 d27= 179.97
 r28= 1.0738
 a28= 121.71
 d28= 179.97
 r29= 1.0762
 a29= 116.06
 d29= 180.03
 r30= 1.0824
 a30= 108.60
 d30= 307.59

OK'

C
 C 1 r2
 O 2 r3 1 a3
 C 2 r4 1 a4 3 d4
 O 4 r5 2 a5 1 d5
 C 4 r6 2 a6 1 d6
 C 6 r7 4 a7 2 d7
 N 7 r8 6 a8 4 d8
 C 8 r9 7 a9 6 d9
 C 9 r10 8 a10 7 d10
 C 10 r11 9 a11 8 d11
 C 11 r12 10 a12 9 d12
 C 1 r13 2 a13 3 d13
 H 3 r14 2 a14 1 d14
 H 6 r15 4 a15 2 d15
 H 9 r16 8 a16 7 d16
 H 10 r17 9 a17 8 d17
 H 11 r18 10 a18 9 d18
 H 12 r19 11 a19 10 d19
 N 13 r20 1 a20 2 d20
 C 13 r21 1 a21 2 d21
 C 21 r22 13 a22 1 d22
 C 22 r23 21 a23 13 d23
 C 20 r24 13 a24 1 d24
 H 1 r25 2 a25 3 d25
 H 21 r26 13 a26 1 d26
 H 22 r27 21 a27 13 d27
 H 23 r28 22 a28 21 d28

H 24 r29 20 a29 13 d29

H 6 r30 4 a30 2 d30

Variables:

r2= 1.3379

r3= 1.3217

a3= 125.53

r4= 1.5141

a4= 122.48

d4= 180.58

r5= 1.1879

a5= 119.18

d5= 178.68

r6= 1.5241

a6= 118.54

d6= 359.78

r7= 1.5096

a7= 113.82

d7= 187.09

r8= 1.3199

a8= 115.98

d8= 112.49

r9= 1.3237

a9= 118.58

d9= 179.05

r10= 1.3798

a10= 123.51

d10= 359.71

r11= 1.3864

a11= 117.88

d11= 0.12

r12= 1.3786

a12= 118.94

d12= 359.97

r13= 1.4677

a13= 125.35

d13= 359.93

r14= 0.9551

a14= 108.92

d14= 0.28

r15= 1.0879

a15= 107.71

d15= 64.39

r16= 1.0766

a16= 116.02

d16= 179.84

r17= 1.0744

a17= 120.58

d17= 180.03

r18= 1.0758

a18= 120.65

d18= 179.84

r19= 1.0740
 a19= 121.05
 d19= 179.14
 r20= 1.3306
 a20= 118.58
 d20= 0.07
 r21= 1.3958
 a21= 120.20
 d21= 180.09
 r22= 1.3782
 a22= 119.04
 d22= 179.97
 r23= 1.3867
 a23= 119.28
 d23= 0.03
 r24= 1.3214
 a24= 119.33
 d24= 180.03
 r25= 1.0708
 a25= 118.74
 d25= 180.03
 r26= 1.0743
 a26= 120.02
 d26= 0.04
 r27= 1.0758
 a27= 120.22
 d27= 180.03
 r28= 1.0738
 a28= 121.72
 d28= 180.03
 r29= 1.0761
 a29= 116.01
 d29= 179.97
 r30= 1.0820
 a30= 109.59
 d30= 307.86

OK''

C
 C 1 r2
 O 2 r3 1 a3
 C 2 r4 1 a4 3 d4
 O 4 r5 2 a5 1 d5
 C 4 r6 2 a6 1 d6
 C 6 r7 4 a7 2 d7
 N 7 r8 6 a8 4 d8

C 8 r9 7 a9 6 d9
 C 9 r10 8 a10 7 d10
 C 10 r11 9 a11 8 d11
 C 11 r12 10 a12 9 d12
 C 1 r13 2 a13 3 d13
 H 3 r14 2 a14 1 d14
 H 6 r15 4 a15 2 d15
 H 9 r16 8 a16 7 d16
 H 10 r17 9 a17 8 d17
 H 11 r18 10 a18 9 d18
 H 12 r19 11 a19 10 d19
 N 13 r20 1 a20 2 d20
 C 13 r21 1 a21 2 d21
 C 21 r22 13 a22 1 d22
 C 22 r23 21 a23 13 d23
 C 20 r24 13 a24 1 d24
 H 1 r25 2 a25 3 d25
 H 21 r26 13 a26 1 d26
 H 22 r27 21 a27 13 d27
 H 23 r28 22 a28 21 d28
 H 24 r29 20 a29 13 d29
 H 6 r30 4 a30 2 d30

Variables:

r2= 1.3316
 r3= 1.3293
 a3= 125.20
 r4= 1.5076
 a4= 122.03
 d4= 180.49
 r5= 1.1965
 a5= 117.02
 d5= 179.02
 r6= 1.5186
 a6= 120.73
 d6= 0.13
 r7= 1.5095
 a7= 113.34
 d7= 186.93
 r8= 1.3201
 a8= 116.01
 d8= 103.68
 r9= 1.3228
 a9= 118.52
 d9= 179.66
 r10= 1.3810
 a10= 123.51
 d10= 359.71
 r11= 1.3854
 a11= 117.91
 d11= 0.05
 r12= 1.3798

a12= 118.89
d12= 0.04
r13= 1.4721
a13= 129.04
d13= 0.09
r14= 0.9489
a14= 107.97
d14= 179.80
r15= 1.0870
a15= 107.64
d15= 64.05
r16= 1.0764
a16= 116.05
d16= 179.90
r17= 1.0743
a17= 120.54
d17= 180.13
r18= 1.0757
a18= 120.67
d18= 179.97
r19= 1.0746
a19= 121.01
d19= 179.50
r20= 1.3257
a20= 119.92
d20= 2.86
r21= 1.3953
a21= 118.31
d21= 182.72
r22= 1.3807
a22= 119.12
d22= 180.03
r23= 1.3828
a23= 118.81
d23= 0.05
r24= 1.3170
a24= 118.65
d24= 179.97
r25= 1.0723
a25= 116.51
d25= 180.38
r26= 1.0749
a26= 120.25
d26= 0.12
r27= 1.0759
a27= 120.39
d27= 180.03
r28= 1.0743
a28= 121.70
d28= 180.03
r29= 1.0769

$a_{29}=115.90$
 $d_{29}=179.97$
 $r_{30}=1.0820$
 $a_{30}=109.19$
 $d_{30}=307.58$

OK''

C
 C 1 r2
 N 2 r3 1 a3
 C 3 r4 2 a4 1 d4
 C 4 r5 3 a5 2 d5
 C 1 r6 2 a6 3 d6
 C 2 r7 1 a7 3 d7
 C 7 r8 2 a8 1 d8
 O 8 r9 7 a9 2 d9
 C 8 r10 7 a10 2 d10
 O 10 r11 8 a11 7 d11
 C 10 r12 8 a12 7 d12
 C 12 r13 10 a13 8 d13
 N 13 r14 12 a14 10 d14
 C 14 r15 13 a15 12 d15
 C 15 r16 14 a16 13 d16
 C 16 r17 15 a17 14 d17
 C 17 r18 16 a18 15 d18
 H 4 r19 3 a19 2 d19
 H 5 r20 4 a20 3 d20
 H 6 r21 1 a21 2 d21
 H 7 r22 2 a22 1 d22
 H 11 r23 10 a23 8 d23
 H 12 r24 10 a24 8 d24
 H 15 r25 14 a25 13 d25
 H 16 r26 15 a26 14 d26
 H 17 r27 16 a27 15 d27
 H 18 r28 17 a28 16 d28
 H 7 r29 2 a29 1 d29
 H 1 r30 2 a30 3 d30

Variables:

$r_2=1.3976$
 $r_3=1.3135$
 $a_3=120.98$
 $r_4=1.3288$
 $a_4=120.09$
 $d_4=359.97$
 $r_5=1.3738$
 $a_5=122.95$

d5= 359.97
r6= 1.3756
a6= 119.09
d6= 0.03
r7= 1.5173
a7= 116.91
d7= 179.97
r8= 1.5509
a8= 130.74
d8= 180.03
r9= 1.1956
a9= 111.61
d9= 180.03
r10= 1.5198
a10= 129.20
d10= 359.97
r11= 1.3237
a11= 121.13
d11= 0.03
r12= 1.3349
a12= 115.56
d12= 180.03
r13= 1.4704
a13= 129.20
d13= 180.03
r14= 1.3272
a14= 120.93
d14= 359.96
r15= 1.3173
a15= 118.70
d15= 180.03
r16= 1.3843
a16= 124.13
d16= 359.97
r17= 1.3837
a17= 117.57
d17= 0.03
r18= 1.3795
a18= 118.81
d18= 359.97
r19= 1.0752
a19= 115.87
d19= 179.97
r20= 1.0737
a20= 120.72
d20= 180.03
r21= 1.0756
a21= 120.24
d21= 179.97
r22= 1.0852
a22= 107.08

d22= 304.20
 r23= 0.9582
 a23= 114.01
 d23= 0.03
 r24= 1.0708
 a24= 115.53
 d24= 359.97
 r25= 1.0774
 a25= 115.84
 d25= 179.97
 r26= 1.0745
 a26= 120.66
 d26= 180.03
 r27= 1.0761
 a27= 120.80
 d27= 179.97
 r28= 1.0746
 a28= 120.68
 d28= 179.97
 r29= 1.0852
 a29= 107.08
 d29= 55.80
 r30= 1.0747
 a30= 120.10
 d30= 179.97

OO

C
 C 1 r2
 O 2 r3 1 a3
 C 2 r4 1 a4 3 d4
 O 4 r5 2 a5 1 d5
 C 4 r6 2 a6 1 d6
 C 6 r7 4 a7 2 d7
 N 7 r8 6 a8 4 d8
 C 8 r9 7 a9 6 d9
 C 9 r10 8 a10 7 d10
 C 10 r11 9 a11 8 d11
 C 11 r12 10 a12 9 d12
 C 1 r13 2 a13 3 d13
 H 3 r14 2 a14 1 d14
 H 5 r15 4 a15 2 d15
 H 6 r16 4 a16 2 d16
 H 9 r17 8 a17 7 d17
 H 10 r18 9 a18 8 d18
 H 11 r19 10 a19 9 d19
 H 12 r20 11 a20 10 d20
 N 13 r21 1 a21 2 d21

C 13 r22 1 a22 2 d22
 C 22 r23 13 a23 1 d23
 C 23 r24 22 a24 13 d24
 C 21 r25 13 a25 1 d25
 H 1 r26 2 a26 3 d26
 H 22 r27 13 a27 1 d27
 H 23 r28 22 a28 13 d28
 H 24 r29 23 a29 22 d29
 H 25 r30 21 a30 13 d30

Variables:

r2= 1.3378
 r3= 1.3312
 a3= 125.05
 r4= 1.4834
 a4= 121.36
 d4= 179.97
 r5= 1.3312
 a5= 113.59
 d5= 0.03
 r6= 1.3378
 a6= 121.36
 d6= 180.03
 r7= 1.4636
 a7= 125.09
 d7= 179.97
 r8= 1.3322
 a8= 118.93
 d8= 359.97
 r9= 1.3221
 a9= 119.41
 d9= 179.97
 r10= 1.3788
 a10= 123.56
 d10= 0.03
 r11= 1.3883
 a11= 117.56
 d11= 359.97
 r12= 1.3766
 a12= 119.36
 d12= 0.03
 r13= 1.4636
 a13= 125.09
 d13= 0.03
 r14= 0.9563
 a14= 108.56
 d14= 0.03
 r15= 0.9563
 a15= 108.56
 d15= 179.97
 r16= 1.0703
 a16= 117.54

d16= 359.97
r17= 1.0765
a17= 115.97
d17= 179.97
r18= 1.0738
a18= 120.67
d18= 179.97
r19= 1.0760
a19= 120.45
d19= 179.97
r20= 1.0741
a20= 121.05
d20= 179.97
r21= 1.3322
a21= 118.93
d21= 0.03
r22= 1.3982
a22= 120.11
d22= 180.03
r23= 1.3766
a23= 119.16
d23= 179.97
r24= 1.3883
a24= 119.36
d24= 0.03
r25= 1.3221
a25= 119.41
d25= 180.03
r26= 1.0703
a26= 117.54
d26= 180.03
r27= 1.0741
a27= 119.79
d27= 359.97
r28= 1.0760
a28= 120.19
d28= 179.97
r29= 1.0738
a29= 121.77
d29= 179.97
r30= 1.0765
a30= 115.98
d30= 180.03

OO'

C
 C 1 r2
 O 2 r3 1 a3
 C 2 r4 1 a4 3 d4
 O 4 r5 2 a5 1 d5
 C 4 r6 2 a6 1 d6
 C 6 r7 4 a7 2 d7
 N 7 r8 6 a8 4 d8
 C 8 r9 7 a9 6 d9
 C 9 r10 8 a10 7 d10
 C 10 r11 9 a11 8 d11
 C 11 r12 10 a12 9 d12
 C 1 r13 2 a13 3 d13
 H 3 r14 2 a14 1 d14
 H 5 r15 4 a15 2 d15
 H 6 r16 4 a16 2 d16
 H 9 r17 8 a17 7 d17
 H 10 r18 9 a18 8 d18
 H 11 r19 10 a19 9 d19
 H 12 r20 11 a20 10 d20
 N 13 r21 1 a21 2 d21
 C 13 r22 1 a22 2 d22
 C 22 r23 13 a23 1 d23
 C 23 r24 22 a24 13 d24
 C 21 r25 13 a25 1 d25
 H 1 r26 2 a26 3 d26
 H 22 r27 13 a27 1 d27
 H 23 r28 22 a28 13 d28
 H 24 r29 23 a29 22 d29
 H 25 r30 21 a30 13 d30

Variables:

r2= 1.3390
 r3= 1.3238
 a3= 125.66
 r4= 1.4905
 a4= 121.77
 d4= 179.09
 r5= 1.3238
 a5= 112.57
 d5= 224.67
 r6= 1.3390
 a6= 121.77
 d6= 45.47
 r7= 1.4645
 a7= 125.11
 d7= 180.13
 r8= 1.3316
 a8= 118.70
 d8= 359.58
 r9= 1.3224
 a9= 119.39

d9= 180.16
r10= 1.3788
a10= 123.57
d10= 359.97
r11= 1.3883
a11= 117.54
d11= 0.07
r12= 1.3767
a12= 119.37
d12= 359.96
r13= 1.4645
a13= 125.11
d13= 1.04
r14= 0.9560
a14= 108.78
d14= 0.56
r15= 0.9560
a15= 108.78
d15= 181.40
r16= 1.0718
a16= 117.86
d16= 1.58
r17= 1.0764
a17= 115.95
d17= 179.97
r18= 1.0738
a18= 120.69
d18= 180.03
r19= 1.0760
a19= 120.45
d19= 179.97
r20= 1.0743
a20= 120.99
d20= 179.90
r21= 1.3316
a21= 118.70
d21= 359.58
r22= 1.3981
a22= 120.30
d22= 179.80
r23= 1.3767
a23= 119.14
d23= 179.86
r24= 1.3883
a24= 119.37
d24= 359.96
r25= 1.3224
a25= 119.39
d25= 180.16
r26= 1.0718
a26= 117.86

d26= 182.49
 r27= 1.0743
 a27= 119.88
 d27= 359.93
 r28= 1.0760
 a28= 120.19
 d28= 179.97
 r29= 1.0738
 a29= 121.77
 d29= 180.03
 r30= 1.0764
 a30= 115.95
 d30= 179.97

OO''

C
 C 1 r2
 O 2 r3 1 a3
 C 2 r4 1 a4 3 d4
 C 4 r5 2 a5 1 d5
 N 5 r6 4 a6 2 d6
 C 6 r7 5 a7 4 d7
 C 7 r8 6 a8 5 d8
 C 8 r9 7 a9 6 d9
 C 9 r10 8 a10 7 d10
 H 3 r11 2 a11 1 d11
 H 4 r12 2 a12 1 d12
 H 7 r13 6 a13 5 d13
 H 8 r14 7 a14 6 d14
 H 9 r15 8 a15 7 d15
 H 10 r16 9 a16 8 d16
 C 1 r17 2 a17 3 d17
 O 1 r18 2 a18 3 d18
 H 18 r19 1 a19 2 d19
 C 17 r20 1 a20 2 d20
 N 20 r21 17 a21 1 d21
 C 21 r22 20 a22 17 d22
 C 22 r23 21 a23 20 d23
 C 23 r24 22 a24 21 d24
 C 24 r25 23 a25 22 d25
 H 17 r26 1 a26 2 d26
 H 25 r27 24 a27 23 d27
 H 24 r28 23 a28 22 d28
 H 23 r29 22 a29 21 d29
 H 22 r30 21 a30 20 d30

Variables:

r2= 1.4991

r3= 1.3344
a3= 110.47
r4= 1.3388
a4= 126.22
d4= 179.97
r5= 1.4636
a5= 124.87
d5= 179.97
r6= 1.3319
a6= 118.94
d6= 359.97
r7= 1.3229
a7= 119.53
d7= 179.97
r8= 1.3780
a8= 123.47
d8= 0.03
r9= 1.3888
a9= 117.55
d9= 0.03
r10= 1.3762
a10= 119.43
d10= 359.97
r11= 0.9610
a11= 109.33
d11= 179.97
r12= 1.0700
a12= 119.06
d12= 0.03
r13= 1.0761
a13= 115.96
d13= 180.03
r14= 1.0737
a14= 120.69
d14= 179.97
r15= 1.0759
a15= 120.42
d15= 179.97
r16= 1.0742
a16= 120.96
d16= 180.03
r17= 1.3335
a17= 122.77
d17= 180.03
r18= 1.3323
a18= 114.06
d18= 0.03
r19= 0.9455
a19= 109.66
d19= 359.97
r20= 1.4696

a20= 129.05
 d20= 180.03
 r21= 1.3263
 a21= 120.58
 d21= 0.11
 r22= 1.3178
 a22= 118.75
 d22= 179.97
 r23= 1.3838
 a23= 124.13
 d23= 359.97
 r24= 1.3842
 a24= 117.49
 d24= 359.97
 r25= 1.3789
 a25= 118.89
 d25= 0.03
 r26= 1.0714
 a26= 116.73
 d26= 0.03
 r27= 1.0749
 a27= 120.57
 d27= 179.97
 r28= 1.0762
 a28= 120.76
 d28= 180.03
 r29= 1.0744
 a29= 120.72
 d29= 180.03
 r30= 1.0773
 a30= 115.79
 d30= 179.97

Table S1. ^1H and ^{13}C NMR Chemical Shifts (δ) for **OO** and **OO'** Calculated with B3LYP (GIAO) and RHF (Geometry Optimization) Methods with Different Basis Sets

Tautomer	B3LYP/6-311G	B3LYP/6-311G	B3LYP/6-311G**
	//RHF/3-21G	//RHF/6-31G**	//RHF/6-31G**

OO	C2/C2'	159.08	162.52	164.15
	C3/C3'	123.20	127.89	127.03
	C4/C4'	135.87	140.32	141.19
	C5/C5'	119.45	123.73	122.53
	C6/C6'	145.75	149.48	150.90
	C7/C7'	99.40	103.81	101.60
	C8/C8'	159.78	161.63	162.56
	r^a	0.999	0.999	0.999
	H3/H3'	6.34	7.17	7.22
	H4/H4'	6.72	7.56	7.68
	H5/H5'	6.12	6.93	6.98
	H6/H6'	7.68	8.45	8.50
	H7/H7'	5.86	6.48	6.38
	H9/H9'	11.01	9.96	10.47
	r^b	0.991	0.943	0.957
OO'	C2/C2'	159.11	162.61	164.34
	C3/C3'	121.79	126.53	125.76
	C4/C4'	135.70	140.26	141.13
	C5/C5'	119.44	123.71	122.44
	C6/C6'	146.02	149.75	151.12
	C7/C7'	98.18	103.25	101.35
	C8/C8'	166.59	168.57	169.03
	r^a	0.993	0.995	0.997
	H3/H3'	6.16	7.00	7.08
	H4/H4'	6.74	7.54	7.66

H5/H5'	6.14	6.94	6.98
H6/H6'	7.69	8.47	8.49
H7/H7'	4.94	5.60	5.70
H9/H9'	11.26	10.15	10.49
r^b	0.979	0.908	0.928

^{a,b} Coefficient of the linear correlation experimental vs. calculated chemical shifts for ¹³C and ¹H, respectively [chemical shifts of H9/H9' included].

Table S2. ¹H and ¹³C NMR Chemical Shifts (δ) for **OK** and **OK'** and its
Tautomers Calculated with B3LYP (GIAO) and RHF (Geometry Optimization)
Methods with Different Basis Sets

Tautomer	B3LYP/6-311G	B3LYP/6-311G	B3LYP/6-311G**
	//RHF/3-21G	// RHF/6-31G**	// RHF/6-31G**

OK	C2	158.14	161.61	163.17
	C3	125.11	129.52	128.63
	C4	136.40	140.81	141.63
	C5	121.28	125.34	124.11
	C6	146.53	150.03	151.38
	C7	100.91	104.80	103.50
	C8	158.93	161.50	161.85
	C2'	155.73	160.15	161.29
	C3'	127.64	131.14	129.94
	C4'	133.45	138.48	139.37
	C5'	122.36	126.41	125.23
	C6'	148.65	152.19	153.03
	C7'	48.57	54.72	53.91
	C8'	201.75	200.76	197.72
	r^a	0.998	0.999	0.999
	H3	6.51	7.30	7.35
	H4	6.85	7.65	7.76
	H5	6.29	7.07	7.11
	H6	7.79	8.54	8.58
	H7	5.96	6.49	6.51
	H9	10.94	9.89	10.33
	H3'	6.98	7.20	7.29
	H4'	6.83	7.61	7.75
	H5'	6.35	7.14	7.18
	H6'	8.09	8.85	8.75

OK'	H7'	3.63; 4.17 ^b	4.22; 4.48 ^b	4.12; 4.39 ^b
	r ^c	0.968	0.882	0.904
	C2	158.17	161.69	163.26
	C3	123.62	127.87	127.19
	C4	136.20	140.71	141.56
	C5	121.52	125.53	124.39
	C6	146.46	150.19	151.57
	C7	104.13	109.17	108.16
	C8	159.15	161.34	162.10
	C2'	154.79	158.53	160.00
	C3'	128.06	132.00	130.84
	C4'	133.79	138.51	139.33
	C5'	122.81	126.85	125.60
	C6'	148.45	151.94	152.76
	C7'	46.30	51.91	51.63
	C8'	194.95	194.08	192.23
	r ^a	0.998	0.998	0.997
	H3	6.38	7.16	7.29
	H4	6.86	7.65	7.78
	H5	6.31	7.09	7.14
	H6	7.80	8.56	8.60
	H7	5.43	6.00	6.27
	H9	11.08	9.94	10.25
	H3'	7.02	7.29	7.35
	H4'	6.88	7.66	7.79

H5'	6.39	7.19	7.21
H6'	8.08	8.82	8.73
H7'	3.47; 3.71 ^b	4.06; 4.24 ^b	4.02; 4.28 ^b
r ^c	0.990	0.995	0.998

^{a,c} Coefficients of the linear correlation experimental vs. calculated chemical shifts for ¹³C and ¹H, respectively (chemical shift of H7' excluded). ^b Due to stereotopism, two H7' protons are not equivalent.

Table S3. ¹H and ¹³C NMR Chemical Shifts (δ) for **OK** and **OK'** and its Tautomers Calculated with B3LYP (GIAO) and RHF (Geometry Optimization) Methods with Different Basis Sets

Tautomer	B3LYP/6-311G	B3LYP/6-311G	B3LYP/6-311G**
	//RHF/3-21G	//RHF/6-31**	//RHF/6-31G**

OK	C2	158.14	161.61	163.17
	C3	125.11	129.52	128.63
	C4	136.40	140.81	141.63
	C5	121.28	125.34	124.11
	C6	146.53	150.03	151.38
	C7	100.91	104.80	103.50
	C8	158.93	161.50	161.85
	C2'	155.73	160.15	161.29
	C3'	127.64	131.14	129.94
	C4'	133.45	138.48	139.37
	C5'	122.36	126.41	125.23
	C6'	148.65	152.19	153.03
	C7'	48.57	54.72	53.91
	C8'	201.75	200.76	197.72
	r^a	0.998	0.999	0.999
	H3	6.51	7.30	7.35
	H4	6.85	7.65	7.76
	H5	6.29	7.07	7.11
	H6	7.79	8.54	8.58
	H7	5.96	6.49	6.51
	H9	10.94	9.89	10.33
	H3'	6.98	7.20	7.29
	H4'	6.83	7.61	7.75
	H5'	6.35	7.14	7.18
	H6'	8.09	8.85	8.75

OK'	H7'	3.63; 4.17 ^b	4.22; 4.48 ^b	4.12; 4.39 ^b
	r ^c	0.968	0.882	0.904
	C2	158.17	161.69	163.26
	C3	123.62	127.87	127.19
	C4	136.20	140.71	141.56
	C5	121.52	125.53	124.39
	C6	146.46	150.19	151.57
	C7	104.13	109.17	108.16
	C8	159.15	161.34	162.10
	C2'	154.79	158.53	160.00
	C3'	128.06	132.00	130.84
	C4'	133.79	138.51	139.33
	C5'	122.81	126.85	125.60
	C6'	148.45	151.94	152.76
	C7'	46.30	51.91	51.63
	C8'	194.95	194.08	192.23
	r ^a	0.998	0.998	0.997
	H3	6.38	7.16	7.29
	H4	6.86	7.65	7.78
	H5	6.31	7.09	7.14
	H6	7.80	8.56	8.60
	H7	5.43	6.00	6.27
	H9	11.08	9.94	10.25
	H3'	7.02	7.29	7.35
	H4'	6.88	7.66	7.79

H5'	6.39	7.19	7.21
H6'	8.08	8.82	8.73
H7'	3.47; 3.71 ^b	4.06; 4.24 ^b	4.02; 4.28 ^b
r ^c	0.990	0.995	0.998

^{a,c} Coefficients of the linear correlation experimental vs. calculated chemical shifts for ¹³C and ¹H, respectively (chemical shift of H7' excluded). ^b Due to stereotopism, two H7' protons are not equivalent.

Table S4. RHF/6-31G** Optimized Dihedral Angles [deg] in (*IZ,3Z*)-1,4-Di(pyridin-2-yl)buta-1,3-diene-2,3-diol and in Its Tautomers (Initial Angles in Parentheses)^a

Tautomer	N1C2C7C8	C2C7C8O9	O9C8C8'O9'	C2'C7'C8'O9'	N1'C2'C7'C8'
EE	0.00 (0)	0.00 (0)	179.97 (180)	0.00 (0)	0.00 (0)
EE'	1.32 (0)	-1.93 (0)	0.58 (0)	-1.93 (0)	1.32 (0)
EE''	0.00 (0)	180.00 (180)	179.95 (180)	0.00 (0)	0.00 (0)
EK	0.27 (0)	-0.56 (0)	-173.37 (180)	-6.83 (-15.51)	-101.83 (-135.38)
EK'	0.00 (0)	0.00 (0)	0.20 (0)	5.8 (0)	114.95 (135.38)
EK''	0.00	180.00 (180)	-180.00 (180)	-3.28 (0.97)	-86.95(-89.47)
KK	90.57 (106.59)	8.24 (115.10)	167.69 (150.01)	8.24 (115.10)	90.57 (106.59)
KK'	106.67 (0)	14.25 (0)	-1.22 (0)	15.77 (0)	106.6 (0)
OE	0.00 (0)	0.00 (0)	179.98 (180)	0.00 (0)	0.00 (0)
OE'	1.04 (0)	-0.51 (0)	39.16 (0)	1.06 (0)	0.70 (0)
OE''	0.02 (0)	0.00 (0)	0.00 (0)	0.00 (0)	0.00 (0)
OK	-0.24 (0)	0.23 (0)	176.12 (180)	6.29 (9.64)	103.85 (133.66)
OK'	0.07 (0)	-0.07 (0)	-0.81 (0)	8.23 (9.17)	112.49 (133.77)

OK''	2.86 (0)	0.00 (0)	-0.54 (0)	8.1 (0)	103.68 (72.21)
OK'''	0.00 (0)	180.00 (180)	180.00 (180)	0.00 (0)	0.04 (0)
OO	0.00 (0)	0.00 (0)	-179.98 (180)	0.00 (0)	0.00 (0)
OO'	-0.42 (0)	1.04 (0)	0.44 (0)	1.04 (0)	-0.42 (0)
OO''	0.00 (0)	0.00 (0)	0.00 (0)	0.00 (0)	0.11 (0)

^a In the nonsymmetric forms, *e.g.* **EK**, the primed positions are these in the latter part of the molecule (**K**).

Table S5. Experimental Data for the X-ray
Diffraction Studies on (*1Z,3Z*)-1,4-Di-
(pyridin-2-yl)buta-1,3-diene-2,3-diol

Formula	C ₁₄ H ₁₂ N ₂ O ₂
Formula weight	240.26
Crystal system	Monoclinic
Space group	P 2 ₁ /n (No. 14)
<i>a</i> /pm	582.45(8)
<i>b</i> /pm	1316.2(2)
<i>c</i> /pm	1498.2(3)
β(°)	93.422(8)
<i>V</i> ·10 ⁶ /pm ³	1146.5(3)
<i>Z</i>	4
μ(Mo K _α)/mm ⁻¹	0.095
No. of measd reflections	5902

No. of independent refl.	1991
R_{int}	0.1033
R , %	12.8
R_w , %	17.6
GOF	1.290

Table S6. Selected Bond Lengths (pm) and Bond and Dihedral Angles (°)
for **OO**

N1-C2	134.5 (6)	N1C2C7	117.2 (5)
N1'-C2'	135.6 (6)	N1'C2'C7'	117.5 (6)
N1-C6	134.3 (7)	C2C7C8	124.5 (5)
N1'-C6'	132.2 (7)	C2'C7'C8'	125.5 (6)
C2-C7	144.9 (7)	C7C8O9	122.6 (5)
C2'-C7'	144.4 (7)	C7C8C8'	123.2 (5)
C7-C8	135.3 (7)	C7'C8'O9'	123.2 (5)
C7'-C8'	133.3 (7)	N1C2C7C8	1.6 (8)
C8-O9	134.7 (6)	N1'C2'C7'C8'	-2.5 (8)
C8'-C9'	135.8 (6)	C2C7C8O9	0.4 (8)
C8-C8'	146.9 (7)	C2'C7'C8'O9'	1.5 (8)
O9-H9	106 (6)	O9C8C8'O9'	176.3 (5)
O9'-H9'	91 (6)	C7C8C8'C7'	178.8 (6)
H9...N1	165 (6)	O9H9N1	144 (4)
H9'...N1'	178 (6)	O9'H9'N1'	151 (5)
O9...N1	258.0 (6)	C2C7C8C8'	178.6 (5)

O9'...N1'	261.9 (6)	C2'C7'C8'C8	-179.4 (5)
C2N1C6	117.8 (5)	C8C8'C7'C2'	179.3 (5)
C2'N1'C6'	118.3 (5)	C8'C8C7C2	178.6 (5)

Table S7. Experimental Data for the X-ray
Diffraction Studies on (*1Z,3Z*)-1,4-Di-
(pyridin-2-yl)buta-1,3-diene-2,3-diol

Formula	C ₁₄ H ₁₂ N ₂ O ₂
Formula weight	240.26
Crystal system	Monoclinic
Space group	P 2 ₁ /n (No. 14)
<i>a</i> /pm	582.45(8)
<i>b</i> /pm	1316.2(2)
<i>c</i> /pm	1498.2(3)
β(°)	93.422(8)
<i>V</i> ·10 ⁶ /pm ³	1146.5(3)
<i>Z</i>	4
μ(Mo K _α)/mm ⁻¹	0.095
No. of measd reflections	5902
No. of independent refl.	1991
<i>R</i> _{int}	0.1033
<i>R</i> , %	12.8
<i>R</i> _w , %	17.6
GOF	1.290

Table S8. Crystal data and structure refinement for erk012.

Identification code	erk012	
Empirical formula	C ₅₀ H _{77.50} Cl ₃ O _{14.50}	
Formula weight	1016.97	
Temperature	173.0(1) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Monoclinic	
Space group	I 2	
Unit cell dimensions	a = 14.8582(6) Å	α = 90°.
	b = 9.2466(4) Å	β = 94.079(2)°.
	c = 39.3741(14) Å	γ = 90°.
Volume	5395.8(4) Å ³	
Z	4	
Density (calculated)	1.252 Mg/m ³	
Absorption coefficient	0.232 mm ⁻¹	
F(000)	2178	
Crystal size	0.50 x 0.20 x 0.15 mm ³	
Theta range for data collection	3.11 to 25.68°.	
Index ranges	-18 ≤ h ≤ 18, -9 ≤ k ≤ 10, -28 ≤ l ≤ 47	
Reflections collected	10868	
Independent reflections	8188 [R(int) = 0.0221]	
Completeness to theta = 25.68°	47.6 %	
Max. and min. transmission	0.9660 and 0.8929	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F ²	
Data / restraints / parameters	8188 / 1 / 797	
Goodness-of-fit on F ²	1.070	
Final R indices [I > 2σ(I)]	R1 = 0.0420, wR2 = 0.0932	
R indices (all data)	R1 = 0.0506, wR2 = 0.0987	
Absolute structure parameter	-0.03(5)	
Largest diff. peak and hole	0.578 and -0.346 e.Å ⁻³	

Table S9. Atomic coordinates ($\times 10^4$) and equivalent isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$)

for erk012. $U(\text{eq})$ is defined as one third of the trace of the orthogonalized U_{ij} tensor.

	x	y	z	$U(\text{eq})$
C(2)	12612(2)	9917(4)	1137(1)	36(1)
C(3)	12978(2)	9933(4)	782(1)	37(1)
C(4)	12261(2)	9376(4)	525(1)	41(1)
C(5)	11416(2)	10283(4)	540(1)	48(1)
C(6)	11102(2)	10393(4)	898(1)	41(1)
C(8)	10237(2)	8987(3)	1275(1)	32(1)
C(9)	9243(2)	9356(3)	1204(1)	33(1)
C(10)	8768(2)	9157(4)	1529(1)	36(1)
C(11)	8895(2)	7629(3)	1663(1)	33(1)
C(13)	10328(2)	7438(3)	1413(1)	35(1)
C(15)	8426(2)	5221(3)	1460(1)	32(1)
C(16)	8101(2)	4593(4)	1108(1)	33(1)
C(17)	7175(2)	5133(4)	999(1)	33(1)
C(18)	6512(2)	4361(4)	845(1)	31(1)
C(19)	5619(2)	4941(3)	747(1)	30(1)
C(20)	4915(2)	4210(3)	612(1)	29(1)
C(21)	4883(2)	2656(4)	506(1)	35(1)
C(23)	3762(2)	3918(3)	187(1)	32(1)
C(24)	2770(2)	3875(4)	52(1)	38(1)
C(25)	2102(2)	4173(4)	315(1)	42(1)
C(26)	2356(2)	4467(4)	636(1)	39(1)
C(27)	3313(2)	4369(4)	780(1)	32(1)
C(28)	3987(2)	4792(3)	512(1)	30(1)
C(29)	3500(2)	5282(3)	1098(1)	32(1)
C(31)	4403(2)	5391(4)	1627(1)	32(1)
C(32)	3795(2)	5112(4)	1911(1)	36(1)
C(33)	4230(2)	5567(3)	2260(1)	33(1)
C(35)	5701(2)	5463(3)	2051(1)	30(1)
C(36)	5343(2)	4808(4)	1714(1)	32(1)
C(37)	6661(2)	4996(4)	2159(1)	35(1)
C(38)	7295(2)	5461(4)	1897(1)	35(1)
C(39)	7870(2)	4644(3)	1742(1)	31(1)
C(41)	4589(2)	7690(4)	2593(1)	37(1)

C(42)	3972(2)	7253(4)	2869(1)	42(1)
C(43)	3954(2)	5617(4)	2886(1)	42(1)
C(44)	3696(2)	4947(5)	2544(1)	41(1)
C(45)	4734(2)	9297(4)	2544(1)	46(1)
C(46)	5419(3)	9589(5)	2280(1)	62(1)
C(47)	5858(4)	11033(6)	2307(1)	93(2)
C(48)	13267(2)	10527(5)	1410(1)	53(1)
C(50)	12277(3)	8381(5)	-34(1)	59(1)
C(53)	8819(2)	10945(4)	744(1)	56(1)
C(54)	11287(2)	7017(4)	1524(1)	55(1)
C(55)	8767(2)	4965(4)	840(1)	42(1)
C(57)	1126(2)	4239(5)	177(1)	57(1)
C(60)	8017(2)	3063(4)	1817(1)	43(1)
C(61)	4257(2)	7888(4)	3219(1)	54(1)
C(62)	3855(3)	10125(5)	2461(1)	64(1)
O(1)	11810(1)	10795(2)	1136(1)	40(1)
O(7)	10722(1)	9022(2)	972(1)	37(1)
O(12)	9817(1)	7245(2)	1706(1)	37(1)
O(14)	8398(1)	6746(2)	1419(1)	32(1)
O(22)	4072(1)	2498(2)	277(1)	35(1)
O(30)	4061(1)	4599(2)	1321(1)	33(1)
O(34)	5129(1)	5021(2)	2313(1)	32(1)
O(40)	4237(1)	7098(2)	2269(1)	34(1)
O(49)	12603(2)	9483(3)	194(1)	54(1)
O(51)	13798(2)	9134(3)	781(1)	43(1)
O(52)	9132(1)	10816(2)	1088(1)	40(1)
O(56)	2567(2)	2584(3)	-135(1)	48(1)
O(58)	3933(1)	6307(2)	465(1)	34(1)
O(59)	3196(1)	6467(3)	1140(1)	45(1)
O(200)	5000	7389(3)	0	55(1)
C(201)	5000	8740(7)	0	74(2)
C(202)	4578(4)	9638(6)	96(1)	28(1)
C(100)	5736(2)	-327(4)	1127(1)	42(1)
Cl(1)	5848(1)	1334(1)	1335(1)	71(1)
Cl(2)	6421(1)	-430(2)	786(1)	88(1)
Cl(3)	5980(1)	-1743(1)	1412(1)	62(1)

Table S10. Bond lengths [$\text{\AA}$] and angles [$^\circ$] for erk012.

C(2)-O(1)	1.441(4)
C(2)-C(48)	1.506(4)
C(2)-C(3)	1.537(4)
C(3)-O(51)	1.424(4)
C(3)-C(4)	1.507(4)
C(4)-O(49)	1.436(3)
C(4)-C(5)	1.514(5)
C(5)-C(6)	1.519(5)
C(6)-O(1)	1.407(4)
C(6)-O(7)	1.426(4)
C(8)-O(7)	1.439(3)
C(8)-C(9)	1.522(4)
C(8)-C(13)	1.534(4)
C(9)-O(52)	1.431(4)
C(9)-C(10)	1.514(4)
C(10)-C(11)	1.516(4)
C(11)-O(12)	1.414(3)
C(11)-O(14)	1.425(3)
C(13)-O(12)	1.436(3)
C(13)-C(54)	1.512(4)
C(15)-O(14)	1.420(4)
C(15)-C(39)	1.526(4)
C(15)-C(16)	1.549(4)
C(16)-C(17)	1.496(4)
C(16)-C(55)	1.535(4)
C(17)-C(18)	1.327(4)
C(18)-C(19)	1.457(4)
C(19)-C(20)	1.325(4)
C(20)-C(21)	1.495(4)
C(20)-C(28)	1.507(4)
C(21)-O(22)	1.459(3)
C(23)-O(22)	1.428(4)
C(23)-C(28)	1.531(4)
C(23)-C(24)	1.531(4)
C(24)-O(56)	1.424(4)
C(24)-C(25)	1.510(4)
C(25)-C(26)	1.323(4)
C(25)-C(57)	1.513(4)
C(26)-C(27)	1.497(4)

C(27)-C(29)	1.517(4)
C(27)-C(28)	1.556(4)
C(28)-O(58)	1.415(4)
C(29)-O(59)	1.201(4)
C(29)-O(30)	1.328(3)
C(31)-O(30)	1.469(3)
C(31)-C(32)	1.510(4)
C(31)-C(36)	1.513(4)
C(32)-C(33)	1.535(4)
C(33)-O(40)	1.416(4)
C(33)-O(34)	1.429(3)
C(33)-C(44)	1.527(4)
C(35)-O(34)	1.441(3)
C(35)-C(36)	1.520(4)
C(35)-C(37)	1.522(4)
C(37)-C(38)	1.508(4)
C(38)-C(39)	1.322(4)
C(39)-C(60)	1.505(5)
C(41)-O(40)	1.451(3)
C(41)-C(45)	1.515(5)
C(41)-C(42)	1.527(4)
C(42)-C(43)	1.514(5)
C(42)-C(61)	1.530(4)
C(43)-C(44)	1.507(4)
C(45)-C(46)	1.528(4)
C(45)-C(62)	1.529(5)
C(46)-C(47)	1.487(6)
C(50)-O(49)	1.419(4)
C(53)-O(52)	1.407(4)
O(200)-C(201)	1.250(7)
C(201)-C(202)	1.122(6)
C(100)-Cl(1)	1.742(3)
C(100)-Cl(2)	1.745(3)
C(100)-Cl(3)	1.746(3)
O(1)-C(2)-C(48)	106.5(3)
O(1)-C(2)-C(3)	109.7(2)
C(48)-C(2)-C(3)	113.1(2)
O(51)-C(3)-C(4)	112.6(3)

O(51)-C(3)-C(2)	110.9(2)
C(4)-C(3)-C(2)	109.2(2)
O(49)-C(4)-C(3)	107.9(2)
O(49)-C(4)-C(5)	110.2(3)
C(3)-C(4)-C(5)	109.4(3)
C(4)-C(5)-C(6)	112.6(3)
O(1)-C(6)-O(7)	112.8(2)
O(1)-C(6)-C(5)	111.7(2)
O(7)-C(6)-C(5)	106.3(3)
O(7)-C(8)-C(9)	112.3(2)
O(7)-C(8)-C(13)	106.1(2)
C(9)-C(8)-C(13)	109.5(2)
O(52)-C(9)-C(10)	109.5(2)
O(52)-C(9)-C(8)	111.0(2)
C(10)-C(9)-C(8)	108.8(2)
C(9)-C(10)-C(11)	110.7(2)
O(12)-C(11)-O(14)	112.8(2)
O(12)-C(11)-C(10)	111.8(2)
O(14)-C(11)-C(10)	104.7(2)
O(12)-C(13)-C(54)	106.0(2)
O(12)-C(13)-C(8)	111.1(2)
C(54)-C(13)-C(8)	113.6(2)
O(14)-C(15)-C(39)	114.7(2)
O(14)-C(15)-C(16)	105.4(2)
C(39)-C(15)-C(16)	111.7(2)
C(17)-C(16)-C(55)	110.7(2)
C(17)-C(16)-C(15)	110.7(2)
C(55)-C(16)-C(15)	110.8(2)
C(18)-C(17)-C(16)	126.1(3)
C(17)-C(18)-C(19)	123.8(3)
C(20)-C(19)-C(18)	126.6(3)
C(19)-C(20)-C(21)	127.7(3)
C(19)-C(20)-C(28)	127.2(3)
C(21)-C(20)-C(28)	105.0(2)
O(22)-C(21)-C(20)	106.1(2)
O(22)-C(23)-C(28)	103.3(2)
O(22)-C(23)-C(24)	110.4(2)
C(28)-C(23)-C(24)	116.8(2)
O(56)-C(24)-C(25)	112.4(2)

O(56)-C(24)-C(23)	111.4(3)
C(25)-C(24)-C(23)	114.9(2)
C(26)-C(25)-C(24)	122.5(3)
C(26)-C(25)-C(57)	122.4(3)
C(24)-C(25)-C(57)	114.9(3)
C(25)-C(26)-C(27)	123.3(3)
C(26)-C(27)-C(29)	113.1(2)
C(26)-C(27)-C(28)	111.5(2)
C(29)-C(27)-C(28)	109.3(2)
O(58)-C(28)-C(20)	115.4(2)
O(58)-C(28)-C(23)	113.9(2)
C(20)-C(28)-C(23)	99.8(2)
O(58)-C(28)-C(27)	107.8(2)
C(20)-C(28)-C(27)	110.7(2)
C(23)-C(28)-C(27)	108.9(2)
O(59)-C(29)-O(30)	124.6(3)
O(59)-C(29)-C(27)	124.9(3)
O(30)-C(29)-C(27)	110.5(3)
O(30)-C(31)-C(32)	109.4(2)
O(30)-C(31)-C(36)	105.6(2)
C(32)-C(31)-C(36)	111.2(2)
C(31)-C(32)-C(33)	112.4(2)
O(40)-C(33)-O(34)	110.1(2)
O(40)-C(33)-C(44)	111.1(3)
O(34)-C(33)-C(44)	106.8(2)
O(40)-C(33)-C(32)	107.3(2)
O(34)-C(33)-C(32)	111.3(2)
C(44)-C(33)-C(32)	110.1(2)
O(34)-C(35)-C(36)	108.9(2)
O(34)-C(35)-C(37)	108.0(2)
C(36)-C(35)-C(37)	113.1(2)
C(31)-C(36)-C(35)	108.4(2)
C(38)-C(37)-C(35)	110.3(2)
C(39)-C(38)-C(37)	127.5(3)
C(38)-C(39)-C(60)	123.6(3)
C(38)-C(39)-C(15)	122.5(3)
C(60)-C(39)-C(15)	113.8(2)
O(40)-C(41)-C(45)	107.7(3)
O(40)-C(41)-C(42)	109.2(2)

C(45)-C(41)-C(42)	116.7(3)
C(43)-C(42)-C(41)	108.0(3)
C(43)-C(42)-C(61)	110.4(3)
C(41)-C(42)-C(61)	113.4(3)
C(44)-C(43)-C(42)	112.0(3)
C(43)-C(44)-C(33)	112.8(3)
C(41)-C(45)-C(46)	111.6(3)
C(41)-C(45)-C(62)	113.0(3)
C(46)-C(45)-C(62)	111.6(3)
C(47)-C(46)-C(45)	114.9(3)
C(6)-O(1)-C(2)	115.6(2)
C(6)-O(7)-C(8)	114.7(2)
C(11)-O(12)-C(13)	115.8(2)
C(15)-O(14)-C(11)	118.8(2)
C(23)-O(22)-C(21)	107.4(2)
C(29)-O(30)-C(31)	118.0(2)
C(33)-O(34)-C(35)	112.8(2)
C(33)-O(40)-C(41)	113.6(2)
C(50)-O(49)-C(4)	113.4(2)
C(53)-O(52)-C(9)	114.3(2)
C(202)-C(201)-O(200)	137.7(4)
Cl(1)-C(100)-Cl(2)	111.63(19)
Cl(1)-C(100)-Cl(3)	110.57(17)
Cl(2)-C(100)-Cl(3)	110.38(18)

Table S11. Anisotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for erk012. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2 [h^2 a^{*2} U^{11} + \dots + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
C(2)	28(1)	40(2)	42(2)	0(1)	9(1)	-6(1)
C(3)	32(2)	35(2)	43(2)	2(1)	7(1)	-6(1)
C(4)	41(2)	47(2)	36(2)	3(1)	7(1)	-12(2)
C(5)	40(2)	55(2)	48(2)	19(2)	2(2)	-8(2)
C(6)	35(2)	36(2)	53(2)	8(2)	4(1)	-3(2)
C(8)	28(1)	32(2)	38(2)	-1(1)	5(1)	-2(1)
C(9)	32(1)	25(2)	42(2)	-2(1)	2(1)	-1(1)
C(10)	26(2)	38(2)	45(2)	-8(1)	4(1)	-3(1)
C(11)	24(1)	40(2)	35(2)	-4(1)	4(1)	-8(1)
C(13)	27(1)	33(2)	46(2)	5(2)	7(1)	-2(1)
C(15)	21(1)	34(2)	39(2)	-2(1)	2(1)	1(1)
C(16)	26(1)	33(2)	41(2)	-2(1)	3(1)	2(1)
C(17)	30(1)	31(2)	38(2)	-5(1)	3(1)	2(1)
C(18)	28(1)	34(2)	31(1)	-1(1)	6(1)	-2(1)
C(19)	30(1)	31(2)	30(1)	1(1)	6(1)	-1(1)
C(20)	27(1)	33(2)	25(1)	-1(1)	2(1)	-3(1)
C(21)	33(2)	37(2)	35(2)	2(1)	-2(1)	-5(1)
C(23)	34(1)	33(2)	28(1)	3(1)	3(1)	-6(1)
C(24)	34(2)	47(2)	32(2)	-1(1)	-6(1)	-8(1)
C(25)	29(1)	55(2)	41(2)	3(2)	-2(1)	-7(2)
C(26)	26(1)	53(2)	38(2)	-1(2)	3(1)	-6(1)
C(27)	27(1)	41(2)	28(1)	-1(1)	1(1)	-4(1)
C(28)	29(1)	32(2)	30(1)	-2(1)	1(1)	-3(1)
C(29)	26(1)	40(2)	31(1)	2(1)	2(1)	0(1)
C(31)	33(2)	33(2)	28(1)	-5(1)	-3(1)	-2(1)
C(32)	28(2)	46(2)	35(2)	-3(1)	1(1)	-5(1)
C(33)	27(1)	39(2)	34(2)	-1(1)	3(1)	-2(1)
C(35)	29(1)	36(2)	26(1)	3(1)	6(1)	-1(1)
C(36)	30(1)	37(2)	29(1)	-2(1)	4(1)	-3(1)
C(37)	26(1)	47(2)	31(1)	1(1)	2(1)	1(1)
C(38)	26(1)	37(2)	41(2)	2(1)	2(1)	-2(1)
C(39)	21(1)	35(2)	37(1)	0(1)	-1(1)	0(1)
C(41)	26(1)	51(2)	35(2)	-10(1)	0(1)	6(2)
C(42)	28(2)	62(2)	37(2)	-8(2)	5(1)	6(2)

C(43)	34(2)	62(2)	31(2)	-2(1)	4(1)	1(2)
C(44)	34(2)	55(3)	34(2)	1(1)	10(1)	-7(2)
C(45)	43(2)	51(2)	45(2)	-15(2)	6(1)	2(2)
C(46)	72(2)	53(3)	64(2)	-12(2)	24(2)	-14(2)
C(47)	128(4)	78(4)	74(3)	-1(3)	19(3)	-33(3)
C(48)	44(2)	74(3)	43(2)	-6(2)	8(1)	-8(2)
C(50)	68(2)	71(3)	38(2)	-3(2)	5(2)	-9(2)
C(53)	58(2)	52(2)	56(2)	8(2)	-9(2)	6(2)
C(54)	29(2)	47(2)	91(3)	28(2)	11(2)	2(2)
C(55)	36(2)	50(2)	40(2)	-3(1)	6(1)	2(2)
C(57)	32(2)	89(3)	49(2)	3(2)	-7(1)	-9(2)
C(60)	37(2)	44(2)	47(2)	7(2)	8(1)	7(2)
C(61)	56(2)	68(3)	39(2)	-11(2)	9(2)	4(2)
C(62)	62(2)	55(3)	76(3)	-2(2)	6(2)	12(2)
O(1)	35(1)	34(1)	53(1)	-2(1)	8(1)	-5(1)
O(7)	34(1)	36(1)	42(1)	2(1)	11(1)	-3(1)
O(12)	24(1)	46(1)	40(1)	5(1)	-1(1)	-7(1)
O(14)	23(1)	30(1)	41(1)	-1(1)	1(1)	-4(1)
O(22)	35(1)	33(1)	37(1)	0(1)	-5(1)	-6(1)
O(30)	36(1)	35(1)	28(1)	-3(1)	-2(1)	-2(1)
O(34)	24(1)	43(1)	30(1)	2(1)	4(1)	-1(1)
O(40)	28(1)	42(1)	30(1)	-6(1)	0(1)	2(1)
O(49)	59(1)	67(2)	38(1)	0(1)	14(1)	-22(1)
O(51)	36(1)	42(2)	51(1)	-5(1)	11(1)	-6(1)
O(52)	42(1)	31(1)	48(1)	1(1)	0(1)	2(1)
O(56)	56(2)	51(2)	37(1)	-3(1)	-8(1)	-14(1)
O(58)	34(1)	29(1)	38(1)	0(1)	7(1)	-1(1)
O(59)	45(1)	47(2)	42(1)	-6(1)	-3(1)	17(1)
O(200)	85(2)	28(2)	54(2)	0	28(2)	0
C(201)	77(4)	41(4)	97(5)	0	-50(4)	0
C(202)	37(3)	19(3)	28(2)	-7(2)	0(2)	15(3)
C(100)	38(2)	43(2)	44(2)	-2(2)	4(1)	4(2)
Cl(1)	116(1)	39(1)	57(1)	-2(1)	-10(1)	-9(1)
Cl(2)	86(1)	128(1)	55(1)	20(1)	33(1)	35(1)
Cl(3)	81(1)	42(1)	65(1)	12(1)	18(1)	8(1)

Table S12. Hydrogen coordinates ($\times 10^4$) and isotropic displacement parameters ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) for erk012.

	x	y	z	U(eq)
H(46A)	5894	8837	2303	74
H(46B)	5111	9493	2050	74
H(47A)	5412	11785	2244	139
H(47B)	6347	11076	2153	139
H(47C)	6105	11191	2541	139
H(48A)	13446	11503	1345	80
H(48B)	13802	9906	1436	80
H(48C)	12979	10567	1626	80
H(50A)	12391	7433	72	89
H(50B)	12588	8442	-245	89
H(50C)	11627	8508	-86	89
H(53A)	9207	10378	603	84
H(53B)	8834	11964	675	84
H(53C)	8199	10584	713	84
H(54A)	11543	7728	1688	83
H(54B)	11648	6993	1325	83
H(54C)	11291	6059	1630	83
H(55A)	8583	4475	626	63
H(55B)	9374	4646	921	63
H(55C)	8769	6014	803	63
H(57A)	740	4408	364	86
H(57B)	958	3322	65	86
H(57C)	1048	5031	12	86
H(60A)	8118	2923	2064	64
H(60B)	8545	2722	1705	64
H(60C)	7484	2513	1732	64
H(61A)	3822	7601	3382	81
H(61B)	4275	8945	3203	81
H(61C)	4857	7524	3295	81
H(62A)	3523	9682	2264	96
H(62B)	3993	11134	2409	96
H(62C)	3486	10090	2658	96
H(20A)	5611	8975	102	89

H(20B)	5019	8975	-245	89
H(20C)	4041	9774	-61	42
H(20D)	4931	10534	109	42
H(20E)	4392	9390	322	42
H(2)	12406(17)	8890(30)	1194(6)	20(7)
H(3)	13171(17)	11030(30)	724(7)	27(7)
H(4)	12152(18)	8260(40)	585(7)	33(7)
H(5A)	11560(20)	11250(40)	479(9)	53(10)
H(5B)	10870(20)	9960(40)	377(8)	43(8)
H(6)	10637(19)	11180(40)	918(7)	35(8)
H(8)	10514(15)	9660(30)	1437(6)	13(6)
H(9)	9022(16)	8640(30)	1010(6)	17(6)
H(10A)	9009(18)	9870(30)	1699(7)	30(7)
H(10B)	8128(19)	9290(30)	1485(6)	26(7)
H(11)	8678(17)	7510(30)	1896(7)	27(7)
H(13)	10100(20)	6840(40)	1241(8)	43(9)
H(15)	9064(19)	4920(30)	1512(7)	33(7)
H(16)	8080(20)	3600(40)	1142(8)	46(10)
H(17)	7043(18)	6060(40)	1038(7)	30(8)
H(18)	6610(20)	3330(40)	810(7)	38(8)
H(19)	5534(16)	5930(30)	792(6)	20(7)
H(21A)	4774(19)	2020(40)	693(8)	37(8)
H(21B)	5439(18)	2270(30)	393(6)	23(7)
H(23)	4143(18)	4260(30)	16(7)	33(8)
H(24)	2680(20)	4730(50)	-127(9)	59(10)
H(26)	1940(20)	4600(40)	806(8)	48(9)
H(27)	3487(18)	3330(40)	862(7)	30(7)
H(31)	4379(17)	6420(30)	1581(6)	21(7)
H(32A)	3706(16)	4100(30)	1933(6)	15(6)
H(32B)	3189(17)	5660(30)	1869(6)	18(6)
H(35)	5682(16)	6560(30)	2033(6)	16(6)
H(36A)	5300(19)	3770(40)	1745(7)	31(8)
H(36B)	5780(20)	5020(40)	1543(9)	56(10)
H(37A)	6840(20)	5480(40)	2383(9)	49(9)
H(37B)	6634(18)	3850(30)	2200(7)	30(7)
H(38)	7240(20)	6500(40)	1865(8)	39(9)
H(41)	5169(18)	7220(30)	2652(6)	25(7)
H(42)	3390(20)	7590(30)	2803(7)	35(8)
H(43A)	4560(20)	5270(30)	2964(7)	38(8)

H(43B)	3510(20)	5230(40)	3064(8)	44(9)
H(44A)	3812(19)	3950(40)	2551(7)	31(8)
H(44B)	3100(20)	5190(40)	2484(8)	45(9)
H(45)	5010(20)	9710(40)	2766(8)	45(8)
H(51)	13670(30)	8370(50)	762(11)	70(16)
H(56)	2666(19)	1910(30)	-41(7)	15(8)
H(58)	4310(20)	6550(40)	316(8)	44(10)
H(100)	5090(20)	-460(40)	1037(8)	45(8)

Table S13. Torsion angles [°] for erk012.

O(1)-C(2)-C(3)-O(51)	177.0(2)
C(48)-C(2)-C(3)-O(51)	58.2(4)
O(1)-C(2)-C(3)-C(4)	-58.4(3)
C(48)-C(2)-C(3)-C(4)	-177.1(3)
O(51)-C(3)-C(4)-O(49)	-59.7(3)
C(2)-C(3)-C(4)-O(49)	176.6(3)
O(51)-C(3)-C(4)-C(5)	-179.6(2)
C(2)-C(3)-C(4)-C(5)	56.7(3)
O(49)-C(4)-C(5)-C(6)	-171.5(3)
C(3)-C(4)-C(5)-C(6)	-53.0(4)
C(4)-C(5)-C(6)-O(1)	49.9(4)
C(4)-C(5)-C(6)-O(7)	-73.5(3)
O(7)-C(8)-C(9)-O(52)	-64.7(3)
C(13)-C(8)-C(9)-O(52)	177.8(2)
O(7)-C(8)-C(9)-C(10)	174.7(2)
C(13)-C(8)-C(9)-C(10)	57.2(3)
O(52)-C(9)-C(10)-C(11)	-178.6(2)
C(8)-C(9)-C(10)-C(11)	-57.1(3)
C(9)-C(10)-C(11)-O(12)	54.4(3)
C(9)-C(10)-C(11)-O(14)	-68.0(3)
O(7)-C(8)-C(13)-O(12)	-176.2(2)
C(9)-C(8)-C(13)-O(12)	-54.9(3)
O(7)-C(8)-C(13)-C(54)	64.3(3)
C(9)-C(8)-C(13)-C(54)	-174.3(3)
O(14)-C(15)-C(16)-C(17)	-58.1(3)
C(39)-C(15)-C(16)-C(17)	67.0(3)
O(14)-C(15)-C(16)-C(55)	65.0(3)
C(39)-C(15)-C(16)-C(55)	-169.9(2)
C(55)-C(16)-C(17)-C(18)	97.2(4)
C(15)-C(16)-C(17)-C(18)	-139.6(3)
C(16)-C(17)-C(18)-C(19)	179.4(3)
C(17)-C(18)-C(19)-C(20)	-175.8(3)
C(18)-C(19)-C(20)-C(21)	-4.4(4)
C(18)-C(19)-C(20)-C(28)	179.5(2)
C(19)-C(20)-C(21)-O(22)	-162.1(3)
C(28)-C(20)-C(21)-O(22)	14.7(3)
O(22)-C(23)-C(24)-O(56)	-34.8(3)

C(28)-C(23)-C(24)-O(56)	-152.3(3)
O(22)-C(23)-C(24)-C(25)	94.5(3)
C(28)-C(23)-C(24)-C(25)	-23.0(4)
O(56)-C(24)-C(25)-C(26)	129.7(3)
C(23)-C(24)-C(25)-C(26)	0.9(5)
O(56)-C(24)-C(25)-C(57)	-55.5(4)
C(23)-C(24)-C(25)-C(57)	175.7(3)
C(24)-C(25)-C(26)-C(27)	-7.3(5)
C(57)-C(25)-C(26)-C(27)	178.3(3)
C(25)-C(26)-C(27)-C(29)	157.4(3)
C(25)-C(26)-C(27)-C(28)	33.8(5)
C(19)-C(20)-C(28)-O(58)	19.9(4)
C(21)-C(20)-C(28)-O(58)	-157.0(2)
C(19)-C(20)-C(28)-C(23)	142.4(3)
C(21)-C(20)-C(28)-C(23)	-34.4(3)
C(19)-C(20)-C(28)-C(27)	-102.9(3)
C(21)-C(20)-C(28)-C(27)	80.2(3)
O(22)-C(23)-C(28)-O(58)	166.2(2)
C(24)-C(23)-C(28)-O(58)	-72.4(3)
O(22)-C(23)-C(28)-C(20)	42.6(2)
C(24)-C(23)-C(28)-C(20)	163.9(2)
O(22)-C(23)-C(28)-C(27)	-73.4(3)
C(24)-C(23)-C(28)-C(27)	47.9(3)
C(26)-C(27)-C(28)-O(58)	72.6(3)
C(29)-C(27)-C(28)-O(58)	-53.2(3)
C(26)-C(27)-C(28)-C(20)	-160.2(3)
C(29)-C(27)-C(28)-C(20)	74.0(3)
C(26)-C(27)-C(28)-C(23)	-51.4(3)
C(29)-C(27)-C(28)-C(23)	-177.2(2)
C(26)-C(27)-C(29)-O(59)	-39.2(4)
C(28)-C(27)-C(29)-O(59)	85.6(3)
C(26)-C(27)-C(29)-O(30)	141.9(2)
C(28)-C(27)-C(29)-O(30)	-93.2(3)
O(30)-C(31)-C(32)-C(33)	165.2(2)
C(36)-C(31)-C(32)-C(33)	48.9(4)
C(31)-C(32)-C(33)-O(40)	72.2(3)
C(31)-C(32)-C(33)-O(34)	-48.4(4)
C(31)-C(32)-C(33)-C(44)	-166.7(3)
O(30)-C(31)-C(36)-C(35)	-173.9(2)

C(32)-C(31)-C(36)-C(35)	-55.3(3)
O(34)-C(35)-C(36)-C(31)	62.1(3)
C(37)-C(35)-C(36)-C(31)	-177.8(3)
O(34)-C(35)-C(37)-C(38)	-178.8(2)
C(36)-C(35)-C(37)-C(38)	60.6(4)
C(35)-C(37)-C(38)-C(39)	-126.8(3)
C(37)-C(38)-C(39)-C(60)	-3.0(5)
C(37)-C(38)-C(39)-C(15)	175.1(3)
O(14)-C(15)-C(39)-C(38)	10.5(4)
C(16)-C(15)-C(39)-C(38)	-109.3(3)
O(14)-C(15)-C(39)-C(60)	-171.3(2)
C(16)-C(15)-C(39)-C(60)	68.9(3)
O(40)-C(41)-C(42)-C(43)	60.2(3)
C(45)-C(41)-C(42)-C(43)	-177.5(3)
O(40)-C(41)-C(42)-C(61)	-177.1(3)
C(45)-C(41)-C(42)-C(61)	-54.8(4)
C(41)-C(42)-C(43)-C(44)	-54.1(3)
C(61)-C(42)-C(43)-C(44)	-178.7(3)
C(42)-C(43)-C(44)-C(33)	48.7(4)
O(40)-C(33)-C(44)-C(43)	-48.2(4)
O(34)-C(33)-C(44)-C(43)	72.0(4)
C(32)-C(33)-C(44)-C(43)	-167.0(3)
O(40)-C(41)-C(45)-C(46)	-61.3(3)
C(42)-C(41)-C(45)-C(46)	175.6(3)
O(40)-C(41)-C(45)-C(62)	65.4(3)
C(42)-C(41)-C(45)-C(62)	-57.7(4)
C(41)-C(45)-C(46)-C(47)	-158.0(4)
C(62)-C(45)-C(46)-C(47)	74.5(5)
O(7)-C(6)-O(1)-C(2)	66.6(3)
C(5)-C(6)-O(1)-C(2)	-53.1(3)
C(48)-C(2)-O(1)-C(6)	-179.5(2)
C(3)-C(2)-O(1)-C(6)	57.8(3)
O(1)-C(6)-O(7)-C(8)	68.0(3)
C(5)-C(6)-O(7)-C(8)	-169.2(2)
C(9)-C(8)-O(7)-C(6)	89.9(3)
C(13)-C(8)-O(7)-C(6)	-150.6(2)
O(14)-C(11)-O(12)-C(13)	64.2(3)
C(10)-C(11)-O(12)-C(13)	-53.5(3)
C(54)-C(13)-O(12)-C(11)	177.8(3)

C(8)-C(13)-O(12)-C(11)	54.0(3)
C(39)-C(15)-O(14)-C(11)	74.7(3)
C(16)-C(15)-O(14)-C(11)	-162.0(2)
O(12)-C(11)-O(14)-C(15)	54.4(3)
C(10)-C(11)-O(14)-C(15)	176.2(2)
C(28)-C(23)-O(22)-C(21)	-35.2(3)
C(24)-C(23)-O(22)-C(21)	-160.7(2)
C(20)-C(21)-O(22)-C(23)	13.0(3)
O(59)-C(29)-O(30)-C(31)	-6.0(4)
C(27)-C(29)-O(30)-C(31)	172.9(2)
C(32)-C(31)-O(30)-C(29)	92.5(3)
C(36)-C(31)-O(30)-C(29)	-147.8(2)
O(40)-C(33)-O(34)-C(35)	-62.2(3)
C(44)-C(33)-O(34)-C(35)	177.0(2)
C(32)-C(33)-O(34)-C(35)	56.7(3)
C(36)-C(35)-O(34)-C(33)	-64.3(3)
C(37)-C(35)-O(34)-C(33)	172.4(2)
O(34)-C(33)-O(40)-C(41)	-61.7(3)
C(44)-C(33)-O(40)-C(41)	56.5(3)
C(32)-C(33)-O(40)-C(41)	177.0(2)
C(45)-C(41)-O(40)-C(33)	168.7(2)
C(42)-C(41)-O(40)-C(33)	-63.7(3)
C(3)-C(4)-O(49)-C(50)	148.0(3)
C(5)-C(4)-O(49)-C(50)	-92.6(4)
C(10)-C(9)-O(52)-C(53)	-129.4(3)
C(8)-C(9)-O(52)-C(53)	110.5(3)

Table S14. Hydrogen bonds for erk012 [$\text{\AA}$ and $^\circ$].

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	<(DHA)
O(51)-H(51)...O(58)#1	0.73(5)	2.29(5)	2.909(3)	144(4)
O(51)-H(51)...O(59)#1	0.73(5)	2.44(5)	3.010(4)	136(4)
O(56)-H(56)...O(49)#2	0.73(3)	2.43(3)	3.145(4)	164(3)
O(58)-H(58)...O(200)	0.86(3)	1.84(4)	2.696(2)	170(3)

Symmetry transformations used to generate equivalent atoms:

#1 x+1,y,z #2 x-1,y-1,z