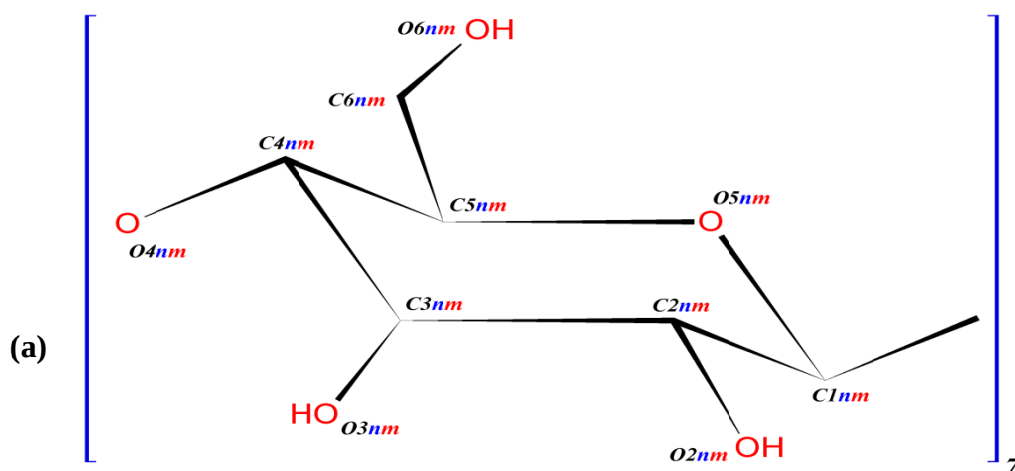


Supplementary Information

Figure S1. Structure and numbering scheme of: (a) β -Cyclodextrin; and (b) Aegelinol. Only numbering of one glycosidic residue (Gn) of the β -CD is presented.



$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ or 7 .

The number of Glucose unit in the β -CD molecule.

$m = A$ or B .

The symbol of β -CD molecules in the dimer.

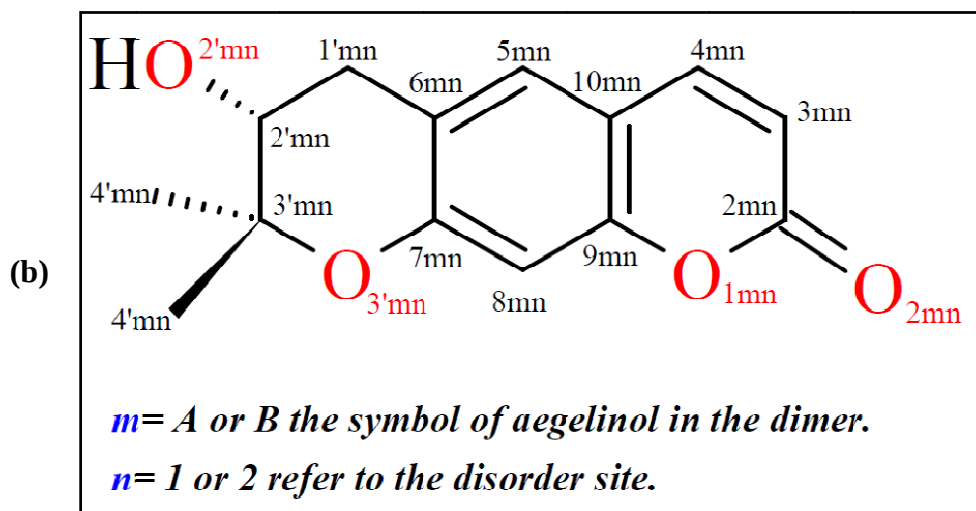


Figure S2. π - π stacking distances ($\text{\AA}$) in aegelinol. (a) Alone; (b) In complex/first site; (c) In complex /second site.

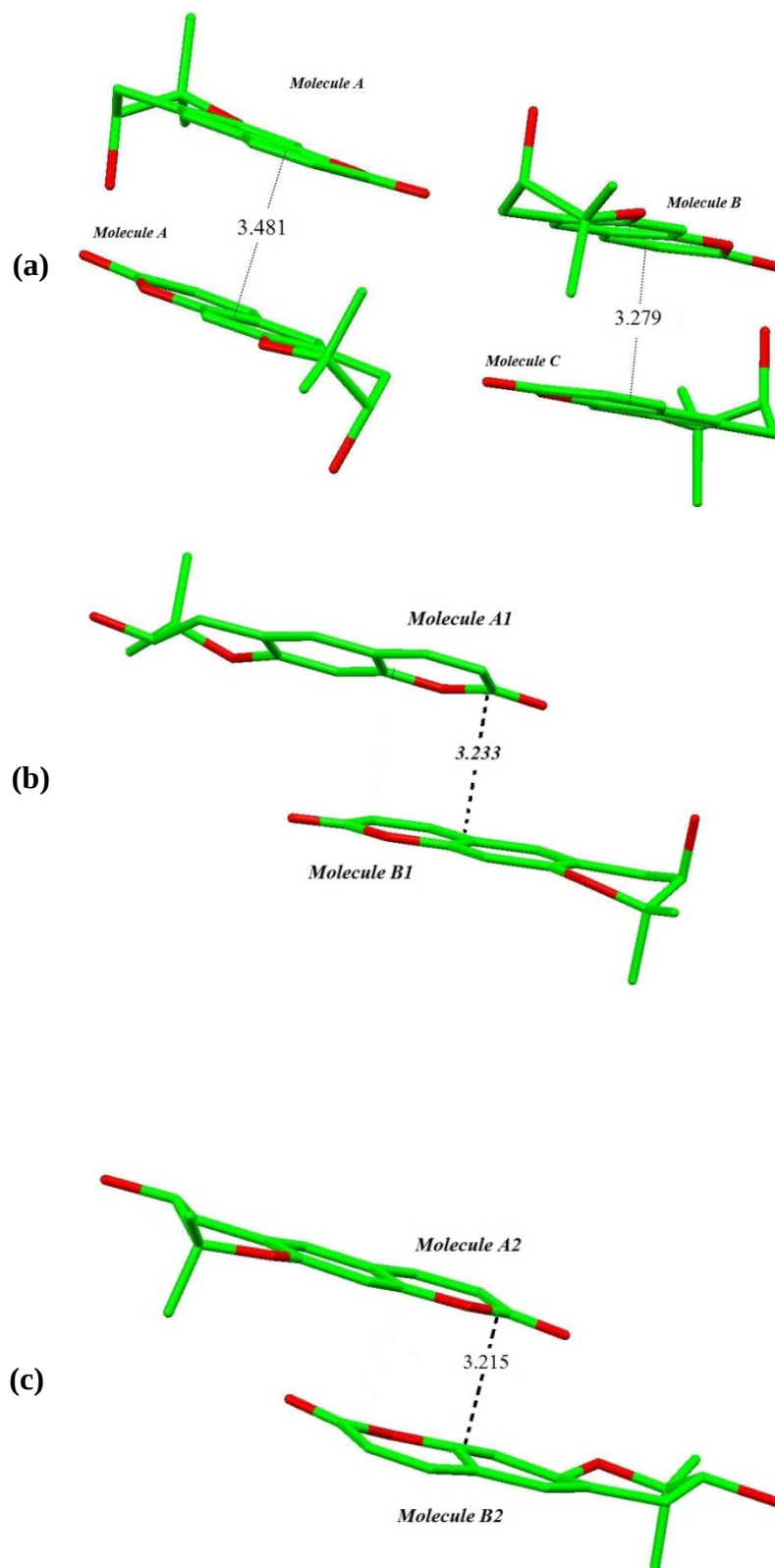
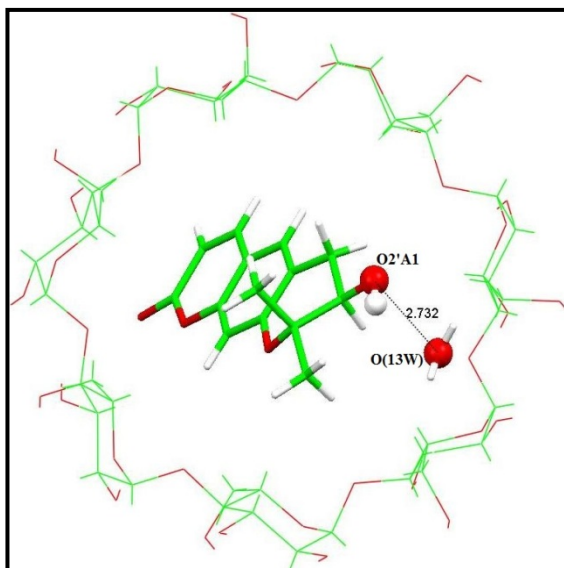
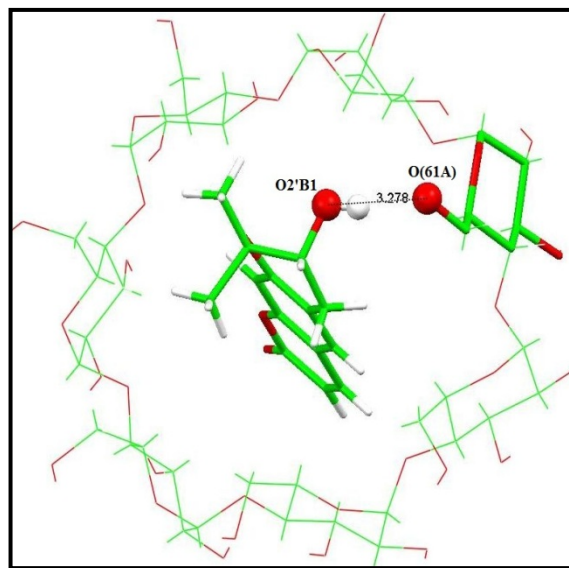


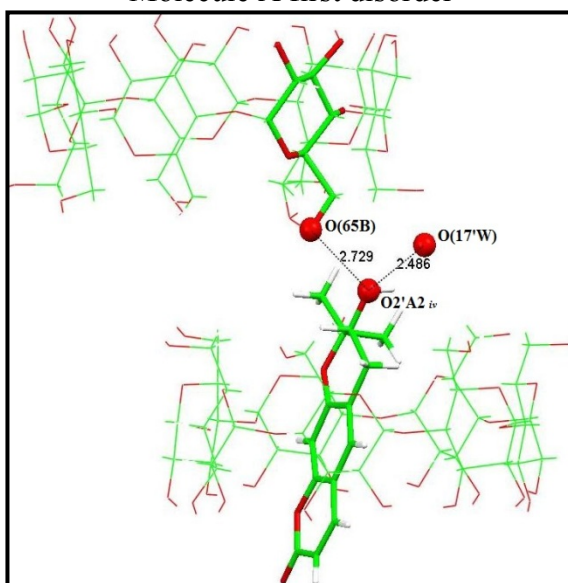
Figure S3. The involved hydrogen bonds in aegelinol in both disorder sites Symmetry transformations used to generate equivalent atoms: *iii* $[x+1, y, z+1]$; *iv* $[x, y, z+1]$.



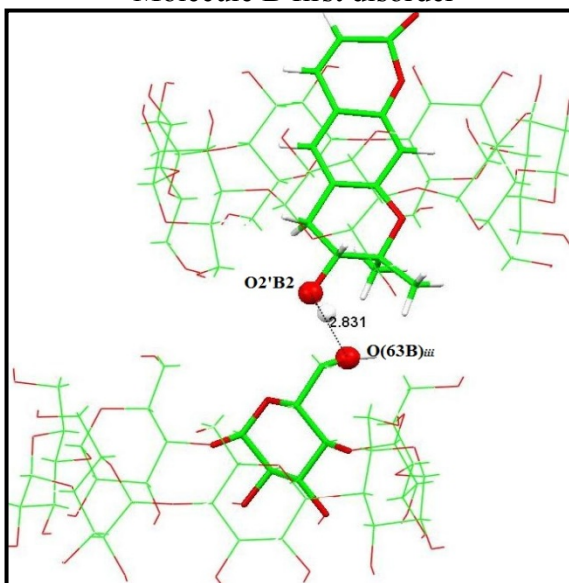
Molecule A first disorder



Molecule B first disorder



Molecule A second disorder



Molecule B second disorder

Table S1. Selected examples of crystal structure of cyclodextrins inclusion complexes with different chiral molecules.

CSD (refcode)	Structure name	Reference
CECMAY10	Permethylated- α -cyclodextrin (S)-madelic acid	[11]
CECMEC10	Permethylated- α -cyclodextrin (R)-madelic acid	[11]
COYXAP10	Permethylated- α -cyclodextrin (R)-flurbiprofen	[12]
COYXET20	Permethylated- α -cyclodextrin (S)-flurbiprofen	[12]
RONWOG	Permethylated- α -cyclodextrin (S)-ibuprofen	[13]
QOYLEV	hexakis(2,3,6-Tri-O-methyl)- α -cyclodextrin (R)-1,7-dioxaspiro(5.5)undecane clathrate	[14]
QOYLIZ	heptakis(2,3,6-tri-O-methyl)- β -cyclodextrin (S)-1,7-dioxaspiro(5.5)undecane clathrate hydrate	[14]
RACVIA	hexakis(2,3,6-Tri-O-methyl)- α -cyclodextrin (S)-1,7-dioxaspiro(5.5)undecane clathrate hexahydrate	[15]
RACVIA01	hexakis(2,3,6-tri-O-methyl) α -cyclodextrin (R)-(-)-1,7-dioxaspiro[5.5]undecane clathrate hydrate	[16]
AGAZIR	β -Cyclodextrin N-acetyl-L-phenylalanine clathrate dodecahydrate	[17]
AGAZUD	β -Cyclodextrin N-acetyl-D-phenylalanine clathrate hydrate	[17]
BEGWEQ	bis(β -Cyclodextrin) ((3S-trans)-3-((1,3-benzodioxol-5-yloxy)methyl)-4-(4-fluorophenyl)piperidine) clathrate hydrate	[18]
BIJHOR	α -Cyclodextrin 1-phenylethanol tetrahydrate clathrate	[19]
CETKUI	heptakis(2,3,6-Tri-O-methyl)- β -cyclodextrin (-)-(R)-methyl-5-(p-tolyl)imidazolidine-2,4-dione clathrate	[20]
DOCVUM04	bis(β -Cyclodextrin) bis(N-acetyl-L-phenylalanine methyl ester) clathrate hydrate	[21]
VOQDOU	bis(β -Cyclodextrin) bis(N-acetyl-L-phenylalanine amide) clathrate hydrate	[21]
VOQDUA	bis(β -Cyclodextrin) bis(N-acetyl-p-methoxy-L-phenylalanine methyl ester) clathrate hydrate	[22]
DOCVUM06	bis(β -Cyclodextrin) bis(N-acetyl-L-phenylalanine methyl ester) clathrate hydrate	[23]
EKOGOA	Per-O-methyl- β -cyclodextrin (S)-1-(p-bromophenyl)ethanol clathrate	[24]
EKOGOA01	Per-O-methyl- β -cyclodextrin (S)-1-(p-bromophenyl)ethanol clathrate	[25]
YIRZOP	hexakis(2,3,6-Tri-O-methyl)- α -cyclodextrin (S)-1-phenylethanol clathrate	[26]
ZIFQOU	(S)-Naproxen heptakis(2,3,6-tri-O-methyl)- β -cyclodextrin	[27]
GETPAW	β -Cyclodextrin (R)-(-)-fenoprofen clathrate hydrate	[28]
JEJWOK	hexakis(2,3,6-Tri-O-methyl)- α -cyclodextrin (R)-1-phenylethanol monohydrate clathrate	[29]
JEJXAX	hexakis(2,3,6-Tri-O-methyl)- α -cyclodextrin (S)-1-phenylethanol monohydrate clathrate	[29]
PACJEJ	3,5-Dihydroxy-4-(3-hydroxy-4-methoxydihydrocinnamoyl)phenyl)-2-O-(α -L-rhamnopyranosyl)- β -D-glucopyranoside β -cyclodextrin clathrate hydrate	[30]
POVSIC	β -Cyclodextrin trans-cyclohexane-1,4-diol hydrate	[31]
TUSHEV	bis(α -cyclodextrin) (R)-camphor clathrate hydrate	[32]
TUSHIZ	bis(α -cyclodextrin) (S)-camphor clathrate tetradecahydrate	[32]

Table S2. Bond lengths [$\text{\AA}$] in 1-BCD.

Bond	Bond length [$\text{\AA}$]
C2A1-O2A1	1.227(16)
C2A1-O1A1	1.350(16)
C2A1-C3A1	1.462(18)
C3A1-C4A1	1.315(18)
C4A1-C10A1	1.423(17)
C10A1-C9A1	1.333(16)
C10A1-C5A1	1.411(15)
C5A1-C6A1	1.365(15)
C6A1-C7A1	1.39(2)
C6A1-C1'A1	1.488(15)
C1'A1-C2'A1	1.451(19)
C2'A1-O2'A1	1.425(15)
C2'A1-C3'A1	1.52(2)
C3'A1-O3'A1	1.461(15)
C3'A1-C4'A1	1.492(19)
C3'A1-C4'A1	1.503(18)
C7A1-O3'A1	1.34(2)
C7A1-C8A1	1.388(16)
C8A1-C9A1	1.35(2)
C9A1-O1A1	1.383(14)
C2B1-O2B1	1.197(19)
C2B1-O1B1	1.354(18)
C2B1-C3B1	1.50(2)
C3B1-C4B1	1.26(3)
C4B1-C10B1	1.40(2)
C10B1-C9B1	1.37(2)
C10B1-C5B1	1.39(2)
C5B1-C6B1	1.360(19)
C6B1-C7B1	1.35(2)
C6B1-C1'B1	1.52(2)
C1'B1-C2'B1	1.49(3)
C2'B1-O2'B1	1.43(2)
C2'B1-C3'B1	1.45(3)
C3'B1-O3'B1	1.50(2)
C3'B1-C4'B1	1.51(3)
C3'B1-C4'B1	1.60(3)
C7B1-O3'B1	1.36(2)
C7B1-C8B1	1.406(18)
C8B1-C9B1	1.28(2)
C9B1-O1B1	1.387(17)
C2A2-O2A2	1.17(2)
C2A2-O1A2	1.33(2)
C2A2-C3A2	1.47(2)
C3A2-C4A2	1.31(2)

Table S2. Cont.

Bond	Bond length [Å]
C4A2-C10A2	1.45(2)
C10A2-C9A2	1.359(19)
C10A2-C5A2	1.392(19)
C5A2-C6A2	1.355(19)
C6A2-C7A2	1.40(2)
C6A2-C1'A2	1.491(19)
C1'A2-C2'A2	1.43(2)
C2'A2-O2'A2	1.42(3)
C2'A2-C3'A2	1.52(2)
C3'A2-O3'A2	1.43(2)
C3'A2-C4'A2	1.48(2)
C3'A2-C4'A2	1.49(2)
C7A2-O3'A2	1.35(3)
C7A2-C8A2	1.385(19)
C8A2-C9A2	1.34(2)
C9A2-O1A2	1.35(2)
C2B2-O2B2	1.14(3)
C2B2-O1B2	1.37(3)
C2B2-C3B2	1.50(3)
C3B1-C4B1	1.28(3)
C4B2-C10B1	1.42(2)
C10B2-C9B1	1.39(2)
C10B2-C5B2	1.41(2)
C5B2-C6B2	1.36(2)
C6B2-C7B2	1.34(2)
C6B2-C1'B2	1.52(2)
C1'B2-C2'B2	1.49(4)
C2'B2-O2'B2	1.45(3)
C2'B2-C3'B2	1.51(3)
C3'B2-O3'B2	1.44(3)
C3'B2-C4'B2	1.50(3)
C3'B2-C4'B2	1.58(3)
C7B2-O3'B2	1.39(3)
C7B2-C8B2	1.40(2)
C8B2-C9B2	1.27(2)
C9B2-O1B2	1.29(2)
C(11A)-O(51A)	1.406(7)
C(11A)-O(47A)	1.433(7)
C(11A)-C(21A)	1.498(8)
C(21A)-O(21A)	1.384(7)
C(21A)-C(31A)	1.522(8)
C(31A)-O(31A)	1.403(8)
C(31A)-C(41A)	1.499(8)
C(41A)-O(41A)	1.430(7)

Table S2. Cont.

Bond	Bond length [Å]
C(41A)-C(51A)	1.505(8)
C(51A)-O(51A)	1.420(7)
C(51A)-C(61A)	1.508(9)
C(61A)-O(61A)	1.354(9)
C(12A)-O(52A)	1.400(7)
C(12A)-O(41A)	1.401(7)
C(12A)-C(22A)	1.516(8)
C(22A)-O(22A)	1.397(7)
C(22A)-C(32A)	1.518(9)
C(32A)-O(32A)	1.405(6)
C(32A)-C(42A)	1.489(8)
C(42A)-O(42A)	1.449(7)
C(42A)-C(52A)	1.510(7)
C(52A)-O(52A)	1.436(8)
C(52A)-C(62A)	1.497(8)
C(62A)-O(62A)	1.429(8)
C(13A)-O(42A)	1.391(8)
C(13A)-O(53A)	1.410(7)
C(13A)-C(23A)	1.492(8)
C(23A)-O(23A)	1.413(7)
C(23A)-C(33A)	1.540(8)
C(33A)-O(33A)	1.403(7)
C(33A)-C(43A)	1.495(8)
C(43A)-O(43A)	1.429(7)
C(43A)-C(53A)	1.520(8)
C(53A)-O(53A)	1.446(8)
C(53A)-C(63A)	1.488(8)
C(63A)-O(63A)	1.410(10)
C(14A)-O(54A)	1.395(7)
C(14A)-O(43A)	1.421(7)
C(14A)-C(24A)	1.507(8)
C(24A)-O(24A)	1.397(7)
C(24A)-C(34A)	1.507(8)
C(34A)-O(34A)	1.415(7)
C(34A)-C(44A)	1.492(7)
C(44A)-O(44A)	1.421(7)
C(44A)-C(54A)	1.520(8)
C(54A)-O(54A)	1.425(7)
C(54A)-C(64A)	1.495(8)
C(64A)-O(64A)	1.439(8)
C(15A)-O(55A)	1.384(7)
C(15A)-O(44A)	1.414(7)
C(15A)-C(25A)	1.517(8)
C(25A)-O(25A)	1.383(7)

Table S2. Cont.

Bond	Bond length [Å]
C(25A)-C(35A)	1.513(7)
C(35A)-O(35A)	1.407(7)
C(35A)-C(45A)	1.503(7)
C(45A)-O(45A)	1.431(7)
C(45A)-C(55A)	1.521(8)
C(55A)-O(55A)	1.441(8)
C(55A)-C(65A)	1.47(2)
C(55A)-C(65')	1.66(8)
C(16A)-O(56A)	1.397(6)
C(16A)-O(45A)	1.416(7)
C(16A)-C(26A)	1.499(8)
C(26A)-O(26A)	1.404(6)
C(26A)-C(36A)	1.541(7)
C(36A)-O(36A)	1.402(7)
C(36A)-C(46A)	1.504(7)
C(46A)-O(46A)	1.447(6)
C(46A)-C(56A)	1.511(7)
C(56A)-O(56A)	1.442(7)
C(56A)-C(66A)	1.509(7)
C(66A)-O(66A)	1.396(8)
C(17A)-O(57A)	1.406(7)
C(17A)-O(46A)	1.421(7)
C(17A)-C(27A)	1.491(9)
C(27A)-O(27A)	1.409(7)
C(27A)-C(37A)	1.510(8)
C(37A)-O(37A)	1.395(7)
C(37A)-C(47A)	1.497(7)
C(47A)-O(47A)	1.434(7)
C(47A)-C(57A)	1.522(8)
C(57A)-O(57A)	1.417(8)
C(57A)-C(67)	1.512(9)
C(57A)-C(67')	1.59(2)
C(12B)-O(52B)	1.402(7)
C(12B)-O(41B)	1.413(6)
C(12B)-C(22B)	1.496(8)
C(22B)-O(22B)	1.392(7)
C(22B)-C(32B)	1.532(7)
C(32B)-O(32B)	1.386(7)
C(32B)-C(42B)	1.514(8)
C(42B)-O(42B)	1.441(6)
C(42B)-C(52B)	1.510(7)
C(52B)-O(52B)	1.446(6)
C(52B)-C(62B)	1.506(8)
C(62B)-O(62B)	1.417(7)

Table S2. Cont.

Bond	Bond length [Å]
C(13B)-O(53B)	1.397(6)
C(13B)-O(42B)	1.423(6)
C(13B)-C(23B)	1.505(7)
C(23B)-O(23B)	1.411(6)
C(23B)-C(33B)	1.518(7)
C(33B)-O(33B)	1.406(6)
C(33B)-C(43B)	1.509(7)
C(43B)-O(43B)	1.426(6)
C(43B)-C(53B)	1.519(7)
C(53B)-O(53B)	1.443(6)
C(53B)-C(63B)	1.492(8)
C(63B)-O(63B)	1.423(7)
C(14B)-O(54B)	1.387(6)
C(14B)-O(43B)	1.435(6)
C(14B)-C(24B)	1.514(8)
C(24B)-O(24B)	1.395(7)
C(24B)-C(34B)	1.497(8)
C(34B)-O(34B)	1.421(7)
C(34B)-C(44B)	1.497(7)
C(44B)-O(44B)	1.426(7)
C(44B)-C(54B)	1.508(8)
C(54B)-O(54B)	1.432(7)
C(54B)-C(64B)	1.506(10)
C(64B)-O(64B)	1.481(14)
C(15B)-O(55B)	1.378(7)
C(15B)-O(44B)	1.422(6)
C(15B)-C(25B)	1.514(8)
C(25B)-O(25B)	1.386(7)
C(25B)-C(35B)	1.516(9)
C(35B)-O(35B)	1.423(7)
C(35B)-C(45B)	1.487(7)
C(45B)-O(45B)	1.457(7)
C(45B)-C(55B)	1.515(8)
C(55B)-O(55B)	1.442(7)
C(55B)-C(65B)	1.490(8)
C(65B)-O(65B)	1.423(7)
C(16B)-O(56B)	1.390(7)
C(16B)-O(45B)	1.407(8)
C(16B)-C(26B)	1.522(9)
C(26B)-O(26B)	1.404(7)
C(26B)-C(36B)	1.521(8)
C(36B)-O(36B)	1.429(7)
C(36B)-C(46B)	1.503(7)
C(46B)-O(46B)	1.429(7)

Table S2. Cont.

Bond	Bond length [Å]
C(46B)-C(56B)	1.514(9)
C(56B)-O(56B)	1.445(8)
C(56B)-C(66B)	1.508(10)
C(66B)-O(66B)	1.404(13)
C(17B)-O(57B)	1.391(7)
C(17B)-O(46B)	1.427(7)
C(17B)-C(27B)	1.507(7)
C(27B)-O(27B)	1.421(7)
C(27B)-C(37B)	1.501(8)
C(37B)-O(37B)	1.426(7)
C(37B)-C(47B)	1.508(7)
C(47B)-O(47B)	1.406(7)
C(47B)-C(57B)	1.519(7)
C(57B)-O(57B)	1.431(7)
C(57B)-C(67B)	1.493(8)
C(67B)-O(67B)	1.434(8)
C(11B)-O(51B)	1.385(8)
C(11B)-O(47B)	1.417(7)
C(11B)-C(21B)	1.502(8)
C(21B)-O(21B)	1.400(7)
C(21B)-C(31B)	1.505(8)
C(31B)-O(31B)	1.407(7)
C(31B)-C(41B)	1.500(8)
C(41B)-O(41B)	1.446(7)
C(41B)-C(51B)	1.505(8)
C(51B)-O(51B)	1.432(8)
C(51B)-C(61B)	1.512(10)
C(61B)-O(61B)	1.444(12)
C(67)-O(67A)	1.446(10)
C(67')-O(67')	1.44(2)
C(65A)-O(65A)	1.456(17)
C(65')-O(65')	1.32(9)

Table S3. Angles [°] in 1-BCD.

Angle	Angle [°]
O2A1-C2A1-O1A1	116.1(11)
O2A1-C2A1-C3A1	125.5(12)
O1A1-C2A1-C3A1	118.4(10)
C4A1-C3A1-C2A1	119.0(12)
C3A1-C4A1-C10A1	121.5(12)
C9A1-C10A1-C5A1	118.1(10)
C9A1-C10A1-C4A1	118.9(11)
C5A1-C10A1-C4A1	123.0(11)
C6A1-C5A1-C10A1	122.5(11)
C5A1-C6A1-C7A1	116.2(11)
C5A1-C6A1-C1'A1	122.9(10)
C7A1-C6A1-C1'A1	120.8(11)
C2'A1-C1'A1-C6A1	110.4(10)
O2'A1-C2'A1-C1'A1	109.8(10)
O2'A1-C2'A1-C3'A1	112.2(11)
C1'A1-C2'A1-C3'A1	113.6(12)
O3'A1-C3'A1-C4'A1	107.8(12)
O3'A1-C3'A1-C4'A1	104.1(11)
C4'A1-C3'A1-C4'A1	113.1(12)
O3'A1-C3'A1-C2'A1	106.2(11)
C4'A1-C3'A1-C2'A1	113.1(12)
C4'A1-C3'A1-C2'A1	111.9(12)
O3'A1-C7A1-C8A1	116.0(18)
O3'A1-C7A1-C6A1	122.4(11)
C8A1-C7A1-C6A1	121.6(18)
C9A1-C8A1-C7A1	119(2)
C10A1-C9A1-C8A1	122.4(13)
C10A1-C9A1-O1A1	121.3(10)
C8A1-C9A1-O1A1	116.2(12)
C2A1-O1A1-C9A1	120.8(9)
C7A1-O3'A1-C3'A1	117.6(11)
O2B1-C2B1-O1B1	117.6(15)
O2B1-C2B1-C3B1	127.6(15)
O1B1-C2B1-C3B1	114.8(13)
C4B1-C3B1-C2B1	122.6(18)
C3B1-C4B1-C10B1	122(2)
C9B1-C10B1-C5B1	118.2(13)
C9B1-C10B1-C4B1	118.1(15)
C5B1-C10B1-C4B1	123.7(16)
C6B1-C5B1-C10B1	121.6(15)
C5B1-C6B1-C7B1	117.7(13)
C5B1-C6B1-C1'B1	120.4(15)
C7B1-C6B1-C1'B1	121.9(15)
C2'B1-C1'A1-C6A1	113.4(17)

Table S3. Cont.

Angle	Angle [°]
O2'B1-C2'B1-C1'B1	101.8(14)
O2'B1-C2'B1-C3'B1	114.3(17)
C1'B1-C2'B1-C3'B1	111.7(17)
O3'B1-C3'B1-C4'B1	113.6(14)
O3'B1-C3'B1-C4'B1	117(2)
C4'B1-C3'B1-C4'B1	103.6(17)
O3'B1-C3'B1-C2'B1	111.5(17)
C4'B1-C3'B1-C2'B1	103.9(18)
C4'B1-C3'B1-C2'B1	106.5(17)
O3'B1-C7B1-C8B1	124.5(13)
O3'B1-C7B1-C6B1	120.5(16)
C8B1-C7B1-C6B1	114.9(15)
C9B1-C8B1-C7B1	121.0(17)
C10B1-C9B1-C8B1	121.0(14)
C10B1-C9B1-O1B1	117.9(13)
C8B1-C9B1-O1B1	121.0(11)
C2B1-O1B1-C9B1	121.7(11)
C7B1-O3'B1-C3'B1	114.3(13)
O2 A2-C2A2-O1A2	120.3(19)
O2A2-C2A2-C3A2	123(2)
O1A2-C2A2-C3A2	116.7(16)
C4A2-C3A2-C2A2	119.9(19)
C3A2-C4A2-C10A2	121.0(18)
C9A2-C10A2-C5A2	118.5(13)
C9A2-C10A2-C4A2	117.1(14)
C5A2-C10A2-C4A2	124.4(15)
C6A2-C5A2-C10A2	122.4(15)
C5A2-C6A2-C7A2	116.7(14)
C5A2-C6A2-C1'A2	123.7(15)
C7A2-C6A2-C1'A2	119.6(14)
C2'A2-C1'A2-C6A2	109.2(15)
O2'A2-C2'A2-C1'A2	110.5(17)
O2'A2-C2'A2-C3'A2	113.7(16)
C1'A2-C2'A2-C3'A2	118.9(19)
O3'A2-C3'A2-C4'A2	105.9(15)
O3'A2-C3'A2-C4'A2	104.2(16)
C4'A2-C3'A2-C4'A2	111.2(17)
O3'A2-C3'A2-C2'A2	109.0(15)
C4'A2-C3'A2-C2'A2	116.2(16)
C4'A2-C3'A2-C2'A2	109.6(16)
O3'A2-C7A2-C8A2	113.0(19)
O3'A2-C7A2-C6A2	125.3(16)
C8A2-C7A2-C6A2	121.7(17)
C9A2-C8A2-C7A2	118.9(19)

Table S3. Cont.

Angle	Angle [°]
C10A2-C9A2-C8A2	116.5(16)
C10A2-C9A2-O1A2	121.7(16)
C8A2-C9A2-O1A2	121.4(14)
C2A2-O1A2-C9A2	123.6(15)
C7A2-O3'A2-C3'A2	118.8(15)
O2B2-C2B2-O1B2	119(2)
O2B2-C2B2-C3B2	134(2)
O1B2-C2B2-C3B2	106.7(18)
C4B2-C3B2-C2B2	123(2)
C3B2-C4B2-C10B2	121(2)
C9B2-C10B2-C5B2	115.9(16)
C9B2-C10B2-C4B2	123(2)
C5B2-C10B2-C4B2	120.9(18)
C6B2-C5B2-C10B2	120.8(19)
C5B2-C6B2-C7B2	118.6(17)
C5B2-C6B2-C1'B2	119.2(18)
C7B2-C6B2-C1'B2	122(2)
C2'B2-C1'A2-C6A2	110(2)
O2'B2-C2'B2-C1'B2	115(2)
O2'B2-C2'B2-C3'B2	118(2)
C1'B2-C2'B2-C3'B2	105(2)
O3'B2-C3'B2-C4'B2	112(2)
O3'B2-C3'B2-C4'B2	100(2)
C4'B2-C3'B2-C4'B2	120(2)
O3'B2-C3'B2-C2'B2	103(2)
C4'B2-C3'B2-C2'B2	114(3)
C4'B2-C3'B2-C2'B2	106(2)
O3'B2-C7B2-C8B2	124(2)
O3'B2-C7B2-C6B2	120.2(17)
C8B2-C7B2-C6B2	110(2)
C9B2-C8B2-C7B2	119(2)
C10B2-C9B2-C8B2	124.4(19)
C10B2-C9B2-O1B2	122.6(19)
C8B2-C9B2-O1B2	111.0(16)
C2B2-O1B2-C9B2	135.7(18)
C7B2-O3'B2-C3'B2	114(2)
O(51A)-C(11A)-O(47A)	111.1(5)
O(51A)-C(11A)-C(21A)	109.3(5)
O(47A)-C(11A)-C(21A)	109.2(4)
O(21A)-C(21A)-C(11A)	112.1(5)
O(21A)-C(21A)-C(31A)	112.0(5)
C(11A)-C(21A)-C(31A)	109.3(5)
O(31A)-C(31A)-C(41A)	107.7(5)
O(31A)-C(31A)-C(21A)	111.2(5)

Table S3. Cont.

Angle	Angle [°]
C(41A)-C(31A)-C(21A)	109.7(5)
O(41A)-C(41A)-C(31A)	107.6(4)
O(41A)-C(41A)-C(51A)	107.2(5)
C(31A)-C(41A)-C(51A)	109.4(5)
O(51A)-C(51A)-C(41A)	110.3(5)
O(51A)-C(51A)-C(61A)	105.6(5)
C(41A)-C(51A)-C(61A)	111.4(5)
O(61A)-C(61A)-C(51A)	108.1(6)
O(52A)-C(12A)-O(41A)	112.4(5)
O(52A)-C(12A)-C(22A)	109.2(5)
O(41A)-C(12A)-C(22A)	106.2(4)
O(22A)-C(22A)-C(12A)	110.4(5)
O(22A)-C(22A)-C(32A)	113.1(5)
C(12A)-C(22A)-C(32A)	108.6(5)
O(32A)-C(32A)-C(42A)	109.1(5)
O(32A)-C(32A)-C(22A)	110.0(5)
C(42A)-C(32A)-C(22A)	109.3(5)
O(42A)-C(42A)-C(32A)	107.5(4)
O(42A)-C(42A)-C(52A)	109.9(5)
C(32A)-C(42A)-C(52A)	111.8(5)
O(52A)-C(52A)-C(62A)	106.7(5)
O(52A)-C(52A)-C(42A)	111.2(5)
C(62A)-C(52A)-C(42A)	113.4(5)
O(62A)-C(62A)-C(52A)	111.4(5)
O(42A)-C(13A)-O(53A)	111.3(5)
O(42A)-C(13A)-C(23A)	110.6(5)
O(53A)-C(13A)-C(23A)	109.2(5)
O(23A)-C(23A)-C(13A)	108.6(5)
O(23A)-C(23A)-C(33A)	111.8(5)
C(13A)-C(23A)-C(33A)	111.6(5)
O(33A)-C(33A)-C(43A)	107.9(5)
O(33A)-C(33A)-C(23A)	111.3(5)
C(43A)-C(33A)-C(23A)	107.6(5)
O(43A)-C(43A)-C(33A)	109.4(4)
O(43A)-C(43A)-C(53A)	110.1(4)
C(33A)-C(43A)-C(53A)	108.5(5)
O(53A)-C(53A)-C(63A)	107.6(5)
O(53A)-C(53A)-C(43A)	109.6(5)
C(63A)-C(53A)-C(43A)	111.4(5)
O(63A)-C(63A)-C(53A)	110.4(6)
O(54A)-C(14A)-O(43A)	111.3(4)
O(54A)-C(14A)-C(24A)	109.4(5)
O(43A)-C(14A)-C(24A)	109.2(4)
O(24A)-C(24A)-C(34A)	111.8(4)

Table S3. Cont.

Angle	Angle [°]
O(24A)-C(24A)-C(14A)	109.6(5)
C(34A)-C(24A)-C(14A)	110.2(4)
O(34A)-C(34A)-C(44A)	107.3(5)
O(34A)-C(34A)-C(24A)	111.7(4)
C(44A)-C(34A)-C(24A)	109.0(5)
O(44A)-C(44A)-C(34A)	106.4(4)
O(44A)-C(44A)-C(54A)	109.4(4)
C(34A)-C(44A)-C(54A)	111.6(5)
O(54A)-C(54A)-C(64A)	106.0(5)
O(54A)-C(54A)-C(44A)	111.3(4)
C(64A)-C(54A)-C(44A)	112.5(5)
O(64A)-C(64A)-C(54A)	112.2(5)
O(55A)-C(15A)-O(44A)	110.3(5)
O(55A)-C(15A)-C(25A)	110.7(4)
O(44A)-C(15A)-C(25A)	108.0(4)
O(25A)-C(25A)-C(35A)	111.7(5)
O(25A)-C(25A)-C(15A)	112.6(5)
C(35A)-C(25A)-C(15A)	109.8(5)
O(35A)-C(35A)-C(45A)	108.6(4)
O(35A)-C(35A)-C(25A)	110.5(5)
C(45A)-C(35A)-C(25A)	109.5(4)
O(45A)-C(45A)-C(35A)	108.2(4)
O(45A)-C(45A)-C(55A)	107.8(5)
C(35A)-C(45A)-C(55A)	110.3(4)
O(55A)-C(55A)-C(65A)	108.2(9)
O(55A)-C(55A)-C(45A)	109.8(5)
C(65A)-C(55A)-C(45A)	112.1(10)
O(55A)-C(55A)-C(65')	95(3)
C(65A)-C(55A)-C(65')	20(4)
C(45A)-C(55A)-C(65')	105(3)
O(56A)-C(16A)-O(45A)	109.8(4)
O(56A)-C(16A)-C(26A)	110.5(4)
O(45A)-C(16A)-C(26A)	108.1(4)
O(26A)-C(26A)-C(16A)	111.9(4)
O(26A)-C(26A)-C(36A)	112.0(4)
C(16A)-C(26A)-C(36A)	108.8(4)
O(36A)-C(36A)-C(46A)	108.0(4)
O(36A)-C(36A)-C(26A)	110.9(4)
C(46A)-C(36A)-C(26A)	108.7(4)
O(46A)-C(46A)-C(36A)	108.6(4)
O(46A)-C(46A)-C(56A)	108.9(4)
C(36A)-C(46A)-C(56A)	110.9(4)
O(56A)-C(56A)-C(66A)	106.6(4)
O(56A)-C(56A)-C(46A)	111.4(4)

Table S3. Cont.

Angle	Angle [°]
C(66A)-C(56A)-C(46A)	111.7(4)
O(66A)-C(66A)-C(56A)	112.6(5)
O(57A)-C(17A)-O(46A)	110.5(5)
O(57A)-C(17A)-C(27A)	109.2(5)
O(46A)-C(17A)-C(27A)	109.7(4)
O(27A)-C(27A)-C(17A)	110.3(5)
O(27A)-C(27A)-C(37A)	113.0(5)
C(17A)-C(27A)-C(37A)	110.6(5)
O(37A)-C(37A)-C(47A)	108.1(4)
O(37A)-C(37A)-C(27A)	110.9(5)
C(47A)-C(37A)-C(27A)	108.7(4)
O(47A)-C(47A)-C(37A)	109.2(4)
O(47A)-C(47A)-C(57A)	109.9(5)
C(37A)-C(47A)-C(57A)	108.4(5)
O(57A)-C(57A)-C(67)	103.7(5)
O(57A)-C(57A)-C(47A)	111.7(5)
C(67)-C(57A)-C(47A)	110.1(5)
O(57A)-C(57A)-C(67')	121.8(10)
C(67)-C(57A)-C(67')	30.3(10)
C(47A)-C(57A)-C(67')	116.9(9)
O(52B)-C(12B)-O(41B)	110.8(4)
O(52B)-C(12B)-C(22B)	110.3(4)
O(41B)-C(12B)-C(22B)	108.2(4)
O(22B)-C(22B)-C(12B)	110.1(5)
O(22B)-C(22B)-C(32B)	112.0(5)
C(12B)-C(22B)-C(32B)	110.0(4)
O(32B)-C(32B)-C(42B)	112.1(4)
O(32B)-C(32B)-C(22B)	108.6(4)
C(42B)-C(32B)-C(22B)	109.2(4)
O(42B)-C(42B)-C(52B)	109.3(4)
O(42B)-C(42B)-C(32B)	108.0(4)
C(52B)-C(42B)-C(32B)	110.4(4)
O(52B)-C(52B)-C(62B)	108.2(4)
O(52B)-C(52B)-C(42B)	110.9(4)
C(62B)-C(52B)-C(42B)	112.4(5)
O(62B)-C(62B)-C(52B)	112.0(4)
O(53B)-C(13B)-O(42B)	112.2(4)
O(53B)-C(13B)-C(23B)	109.3(4)
O(42B)-C(13B)-C(23B)	108.4(4)
O(23B)-C(23B)-C(13B)	108.2(4)
O(23B)-C(23B)-C(33B)	111.2(4)
C(13B)-C(23B)-C(33B)	109.7(4)
O(33B)-C(33B)-C(43B)	110.6(4)
O(33B)-C(33B)-C(23B)	108.6(4)

Table S3. Cont.

Angle	Angle [°]
C(43B)-C(33B)-C(23B)	108.6(4)
O(43B)-C(43B)-C(33B)	107.2(4)
O(43B)-C(43B)-C(53B)	108.9(4)
C(33B)-C(43B)-C(53B)	109.5(4)
O(53B)-C(53B)-C(63B)	105.2(4)
O(53B)-C(53B)-C(43B)	111.5(4)
C(63B)-C(53B)-C(43B)	112.0(5)
O(63B)-C(63B)-C(53B)	113.0(4)
O(54B)-C(14B)-O(43B)	110.3(4)
O(54B)-C(14B)-C(24B)	109.6(4)
O(43B)-C(14B)-C(24B)	108.9(4)
O(24B)-C(24B)-C(34B)	111.5(5)
O(24B)-C(24B)-C(14B)	108.3(4)
C(34B)-C(24B)-C(14B)	110.4(5)
O(34B)-C(34B)-C(24B)	108.9(5)
O(34B)-C(34B)-C(44B)	110.2(4)
C(24B)-C(34B)-C(44B)	108.3(5)
O(44B)-C(44B)-C(34B)	108.6(5)
O(44B)-C(44B)-C(54B)	108.0(5)
C(34B)-C(44B)-C(54B)	110.6(5)
O(54B)-C(54B)-C(64B)	104.9(5)
O(54B)-C(54B)-C(44B)	111.5(5)
C(64B)-C(54B)-C(44B)	110.9(6)
O(64B)-C(64B)-C(54B)	107.7(7)
O(55B)-C(15B)-O(44B)	111.8(5)
O(55B)-C(15B)-C(25B)	110.1(5)
O(44B)-C(15B)-C(25B)	107.3(4)
O(25B)-C(25B)-C(15B)	110.6(5)
O(25B)-C(25B)-C(35B)	110.5(5)
C(15B)-C(25B)-C(35B)	109.2(5)
O(35B)-C(35B)-C(45B)	110.7(5)
O(35B)-C(35B)-C(25B)	108.7(5)
C(45B)-C(35B)-C(25B)	108.5(5)
O(45B)-C(45B)-C(35B)	106.9(4)
O(45B)-C(45B)-C(55B)	109.7(4)
C(35B)-C(45B)-C(55B)	110.9(5)
O(55B)-C(55B)-C(65B)	105.6(4)
O(55B)-C(55B)-C(45B)	111.4(4)
C(65B)-C(55B)-C(45B)	112.7(5)
O(65B)-C(65B)-C(55B)	109.5(5)
O(56B)-C(16B)-O(45B)	110.4(5)
O(56B)-C(16B)-C(26B)	109.6(5)
O(45B)-C(16B)-C(26B)	108.5(5)
O(26B)-C(26B)-C(36B)	112.1(4)

Table S3. Cont.

Angle	Angle [°]
O(26B)-C(26B)-C(16B)	107.5(5)
C(36B)-C(26B)-C(16B)	110.4(5)
O(36B)-C(36B)-C(46B)	109.2(5)
O(36B)-C(36B)-C(26B)	109.1(5)
C(46B)-C(36B)-C(26B)	108.7(4)
O(46B)-C(46B)-C(36B)	108.6(4)
O(46B)-C(46B)-C(56B)	110.9(5)
C(36B)-C(46B)-C(56B)	109.7(5)
O(56B)-C(56B)-C(66B)	106.5(6)
O(56B)-C(56B)-C(46B)	110.4(6)
C(66B)-C(56B)-C(46B)	110.6(6)
O(66B)-C(66B)-C(56B)	113.2(8)
O(57B)-C(17B)-O(46B)	111.5(5)
O(57B)-C(17B)-C(27B)	109.2(4)
O(46B)-C(17B)-C(27B)	109.0(4)
O(27B)-C(27B)-C(37B)	110.7(4)
O(27B)-C(27B)-C(17B)	108.7(4)
C(37B)-C(27B)-C(17B)	109.8(5)
O(37B)-C(37B)-C(27B)	110.7(5)
O(37B)-C(37B)-C(47B)	106.5(4)
C(27B)-C(37B)-C(47B)	109.5(4)
O(47B)-C(47B)-C(37B)	107.8(4)
O(47B)-C(47B)-C(57B)	109.1(5)
C(37B)-C(47B)-C(57B)	110.6(4)
O(57B)-C(57B)-C(67B)	106.9(5)
O(57B)-C(57B)-C(47B)	111.0(4)
C(67B)-C(57B)-C(47B)	112.5(5)
O(67B)-C(67B)-C(57B)	111.8(5)
O(51B)-C(11B)-O(47B)	111.1(5)
O(51B)-C(11B)-C(21B)	110.3(5)
O(47B)-C(11B)-C(21B)	108.5(5)
O(21B)-C(21B)-C(11B)	110.5(5)
O(21B)-C(21B)-C(31B)	112.4(5)
C(11B)-C(21B)-C(31B)	109.1(5)
O(31B)-C(31B)-C(41B)	112.3(5)
O(31B)-C(31B)-C(21B)	107.2(5)
C(41B)-C(31B)-C(21B)	109.1(5)
O(41B)-C(41B)-C(31B)	108.6(4)
O(41B)-C(41B)-C(51B)	107.7(5)
C(31B)-C(41B)-C(51B)	111.0(5)
O(51B)-C(51B)-C(41B)	109.7(5)
O(51B)-C(51B)-C(61B)	106.7(5)
C(41B)-C(51B)-C(61B)	111.3(5)
O(61B)-C(61B)-C(51B)	109.2(7)

Table S3. Cont.

Angle	Angle [°]
C(12A)-O(41A)-C(41A)	119.3(4)
C(11A)-O(51A)-C(51A)	114.4(4)
C(13A)-O(42A)-C(42A)	118.5(4)
C(12A)-O(52A)-C(52A)	113.5(4)
C(14A)-O(43A)-C(43A)	118.1(4)
C(13A)-O(53A)-C(53A)	114.4(4)
C(15A)-O(44A)-C(44A)	118.8(4)
C(14A)-O(54A)-C(54A)	114.6(4)
C(16A)-O(45A)-C(45A)	117.3(4)
C(15A)-O(55A)-C(55A)	113.9(4)
C(17A)-O(46A)-C(46A)	118.4(4)
C(16A)-O(56A)-C(56A)	115.1(4)
C(11A)-O(47A)-C(47A)	118.4(4)
C(17A)-O(57A)-C(57A)	116.7(4)
O(67A)-C(67)-C(57A)	112.4(6)
O(67')-C(67')-C(57A)	113.1(17)
C(13B)-O(42B)-C(42B)	118.7(4)
C(12B)-O(52B)-C(52B)	115.4(4)
C(43B)-O(43B)-C(14B)	118.0(4)
C(13B)-O(53B)-C(53B)	114.9(4)
C(15B)-O(44B)-C(44B)	117.5(4)
C(14B)-O(54B)-C(54B)	115.1(4)
C(16B)-O(45B)-C(45B)	118.7(4)
C(15B)-O(55B)-C(55B)	114.5(4)
C(17B)-O(46B)-C(46B)	118.3(4)
C(16B)-O(56B)-C(56B)	115.1(5)
C(47B)-O(47B)-C(11B)	118.4(4)
C(17B)-O(57B)-C(57B)	114.4(4)
C(12B)-O(41B)-C(41B)	117.4(4)
C(11B)-O(51B)-C(51B)	115.5(4)
O(65A)-C(65A)-C(55A)	109.1(15)
O(65')-C(65')-C(55A)	109(6)

Table S4. Torsion angles [°] in 1-BCD.

Torsion angle	Torsion angle [°]
O2A1-C2A1-C3A1-C4A1	179.7(4)
O1A1-C2A1-C3A1-C4A1	−0.2(3)
C2A1-C3A1-C4A1-C10A1	−0.3(3)
C3A1-C4A1-C10A1-C9A1	0.9(6)
C3A1-C4A1-C10A1-C5A1	179.8(4)
C9A1-C10A1-C5A1-C6A1	−0.6(9)
C4A1-C10A1-C5A1-C6A1	−179.6(5)
C10A1-C5A1-C6A1-C7A1	0.1(9)
C10A1-C5A1-C6A1-C1'A1	178.7(9)
C5A1-C6A1-C1'A1-C2'A1	−164.5(9)
C7A1-C6A1-C1'A1-C2'A1	13.9(13)
C6A1-C1'A1-C2'A1-O2'A1	−172.1(10)
C6A1-C1'A1-C2'A1-C3'A1	−45.7(14)
O2'A1-C2'A1-C3'A1-O3'A1	−172.7(10)
C1'A1-C2'A1-C3'A1-O3'A1	62.1(13)
O2'A1-C2'A1-C3'A1-C4'A1	69.3(15)
C1'A1-C2'A1-C3'A1-C4'A1	−55.9(15)
O2'A1-C2'A1-C3'A1-C4'A1	−59.8(14)
C1'A1-C2'A1-C3'A1-C4'A1	175.0(11)
C5A1-C6A1-C7A1-O3'A1	179.1(11)
C1'A1-C6A1-C7A1-O3'A1	0.5(14)
C5A1-C6A1-C7A1-C8A1	0.0(9)
C1'A1-C6A1-C7A1-C8A1	−178.6(9)
O3'A1-C7A1-C8A1-C9A1	−178.7(11)
C6A1-C7A1-C8A1-C9A1	0.5(10)
C5A1-C10A1-C9A1-C8A1	1.1(9)
C4A1-C10A1-C9A1-C8A1	−179.9(5)
C5A1-C10A1-C9A1-O1A1	180.0(5)
C4A1-C10A1-C9A1-O1A1	−1.0(8)
C7A1-C8A1-C9A1-C10A1	−1.0(10)
C7A1-C8A1-C9A1-O1A1	−180.0(6)
O2A1-C2A1-O1A1-C9A1	−179.8(5)
C3A1-C2A1-O1A1-C9A1	0.1(6)
C10A1-C9A1-O1A1-C2A1	0.5(9)
C8A1-C9A1-O1A1-C2A1	179.5(5)
C8A1-C7A1-O3'A1-C3'A1	−162.8(9)
C6A1-C7A1-O3'A1-C3'A1	18.0(15)
C4'A1-C3'A1-O3'A1-C7A1	74.9(14)
C4'A1-C3'A1-O3'A1-C7A1	−164.9(11)
C2'A1-C3'A1-O3'A1-C7A1	−46.6(14)
O2B1-C2B1-C3B1-C4B1	−179.5(4)
O1B1-C2B1-C3B1-C4B1	0.2(3)
C2B1-C3B1-C4B1-C10B1	−0.1(3)
C3B1-C4B1-C10B1-C9B1	0.4(7)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C3B1-C4B1-C10B1-C5B1	−179.8(5)
C9B1-C10B1-C5B1-C6B1	0.5(10)
C4B1-C10B1-C5B1-C6B1	−179.3(6)
C10B1-C5B1-C6B1-C7B1	−1.1(10)
C10B1-C5B1-C6B1-C1'B1	178.1(18)
C5B1-C6B1-C1'B1-C2'B1	−10(3)
C7B1-C6B1-C1'B1-C2'B1	170.3(15)
C6B1-C1'B1-C2'B1-O2'B1	−78(3)
C6B1-C1'B1-C2'B1-C3'B1	37(3)
O2'B1-C2'B1-C3'B1-O3'B1	67.6(17)
C1'B1-C2'B1-C3'B1-O3'B1	−55(2)
O2'B1-C2'B1-C3'B1-C4'B1	−52.8(19)
C1'B1-C2'B1-C3'B1-C4'B1	−175.1(19)
O2'B1-C2'B1-C3'B1-C4'B1	−175.5(13)
C1'B1-C2'B1-C3'B1-C4'B1	62(2)
C5B1-C6B1-C7B1-O3'B1	179.1(15)
C1'B1-C6B1-C7B1-O3'B1	0(2)
C5B1-C6B1-C7B1-C8B1	0.9(10)
C1'B1-C6B1-C7B1-C8B1	−178.3(18)
O3'B1-C7B1-C8B1-C9B1	−0.2(11)
C6B1-C7B1-C8B1-C9B1	−178.6(14)
C5B1-C10B1-C9B1-C8B1	−0.4(11)
C4B1-C10B1-C9B1-C8B1	−179.6(6)
C5B1-C10B1-C9B1-O1B1	0.3(10)
C4B1-C10B1-C9B1-O1B1	−179.9(6)
C7B1-C8B1-C9B1-C10B1	179.4(6)
C7B1-C8B1-C9B1-O1B1	−0.8(9)
O2B1-C2B1-O1B1-C9B1	179.1(6)
C3B1-C2B1-O1B1-C9B1	−0.7(7)
C10B1-C9B1-O1B1-C2B1	−179.9(6)
C8B1-C9B1-O1B1-C2B1	1.0(10)
C8B1-C7B1-O3'B1-C3'B1	−16(2)
C6B1-C7B1-O3'B1-C3'B1	162.0(13)
C4'B1-C3'B1-O3'B1-C7B1	44(2)
C4'B1-C3'B1-O3'B1-C7B1	171.8(19)
C2'B1-C3'B1-O3'B1-C7B1	−77.0(19)
O2A2-C2A2-C3A2-C4A2	175(2)
O1A2-C2A2-C3A2-C4A2	−5(3)
C2A2-C3A2-C4A2-C10A2	4(3)
C3A2-C4A2-C10A2-C9A2	−4(3)
C3A2-C4A2-C10A2-C5A2	178(2)
C9A2-C10A2-C5A2-C6A2	2(3)
C4A2-C10A2-C5A2-C6A2	−179.0(18)
C10A2-C5A2-C6A2-C7A2	1(3)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C10A2-C5A2-C6A2-C1'A2	−179.5(19)
C5A2-C6A2-C1'A2-C2'A2	−162.7(19)
C7A2-C6A2-C1'A2-C2'A2	17(3)
C6A2-C1'A2-C2'A2-O2'A2	−177.6(16)
C6A2-C1'A2-C2'A2-C3'A2	−44(3)
O2'A2-C2'A2-C3'A2-O3'A2	−175.1(15)
C1'A2-C2'A2-C3'A2-O3'A2	52(2)
O2'A2-C2'A2-C3'A2-C4'A2	−56(2)
C1'A2-C2'A2-C3'A2-C4'A2	172(2)
O2'A2-C2'A2-C3'A2-C4'A2	71(2)
C1'A2-C2'A2-C3'A2-C4'A2	−61(2)
C5A2-C6A2-C7A2-O3'A2	179(3)
C1'A2-C6A2-C7A2-O3'A2	0(5)
C5A2-C6A2-C7A2-C8A2	−2(5)
C1'A2-C6A2-C7A2-C8A2	178(3)
O3'A2-C7A2-C8A2-C9A2	179(4)
C6A2-C7A2-C8A2-C9A2	1(6)
C5A2-C10A2-C9A2-C8A2	176(3)
C4A2-C10A2-C9A2-C8A2	3(5)
C5A2-C10A2-C9A2-O1A2	−4(4)
C4A2-C10A2-C9A2-O1A2	177(3)
C7A2-C8A2-C9A2-C10A2	−176.9(16)
C7A2-C8A2-C9A2-O1A2	4(3)
O2A2-C2A2-O1A2-C9A2	−174.1(19)
C3A2-C2A2-O1A2-C9A2	6(3)
C10A2-C9A2-O1A2-C2A2	−179(3)
C8A2-C9A2-O1A2-C2A2	−6(3)
C8A2-C7A2-O3'A2-C3'A2	−169(3)
C6A2-C7A2-O3'A2-C3'A2	10(5)
C4'A2-C3'A2-O3'A2-C7A2	−158(3)
C4'A2-C3'A2-O3'A2-C7A2	85(3)
C2'A2-C3'A2-O3'A2-C7A2	−32(3)
O2B2-C2B2-C3B2-C4B2	−175(3)
O1B2-C2B2-C3B2-C4B2	6(4)
C2B2-C3B2-C4B2-C10B2	−1(4)
C3B2-C4B2-C10B2-C9B2	174(3)
C3B2-C4B2-C10B2-C5B2	2(4)
C9B2-C10B2-C5B2-C6B2	−5(4)
C4B2-C10B2-C5B2-C6B2	−178(2)
C10B2-C5B2-C6B2-C7B2	−10(4)
C10B2-C5B2-C6B2-C1'B2	177(4)
C5B2-C6B2-C1'B2-C2'B2	25(6)
C7B2-C6B2-C1'B2-C2'B2	−162(3)
C6B2-C1'B2-C2'B2-O2'B2	−43(5)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C6B2-C1'B2-C2'B2-C3'B2	−174(3)
O2'B2-C2'B2-C3'B2-O3'B2	56(4)
C1'B2-C2'B2-C3'B2-O3'B2	−180(2)
O2'B2-C2'B2-C3'B2-C4'B2	172(3)
C1'B2-C2'B2-C3'B2-C4'B2	−63(3)
O2'B2-C2'B2-C3'B2-C4'B2	−60(4)
C1'B2-C2'B2-C3'B2-C4'B2	64(3)
C5B2-C6B2-C7B2-O3'B2	166(3)
C1'B2-C6B2-C7B2-O3'B2	−21(6)
C5B2-C6B2-C7B2-C8B2	17(5)
C1'B2-C6B2-C7B2-C8B2	−170(4)
O3'B2-C7B2-C8B2-C9B2	−8(6)
C6B2-C7B2-C8B2-C9B2	−161(4)
C5B2-C10B2-C9B2-C8B2	−170(3)
C4B2-C10B2-C9B2-C8B2	−8(6)
C5B2-C10B2-C9B2-O1B2	14(4)
C4B2-C10B2-C9B2-O1B2	−173(3)
C7B2-C8B2-C9B2-C10B2	178(2)
C7B2-C8B2-C9B2-O1B2	−9(3)
O2B2-C2B2-O1B2-C9B2	−177(4)
C3B2-C2B2-O1B2-C9B2	19(4)
C10B2-C9B2-O1B2-C2B2	164(3)
C8B2-C9B2-O1B2-C2B2	−17(4)
C8B2-C7B2-O3'B2-C3'B2	32(5)
C6B2-C7B2-O3'B2-C3'B2	−176(3)
C4'B2-C3'B2-O3'B2-C7B2	−48(3)
C4'B2-C3'B2-O3'B2-C7B2	−175(3)
C2'B2-C3'B2-O3'B2-C7B2	75(3)
O(51A)-C(11A)-C(21A)-O(21A)	−177.5(4)
O(47A)-C(11A)-C(21A)-O(21A)	60.8(6)
O(51A)-C(11A)-C(21A)-C(31A)	57.7(6)
O(47A)-C(11A)-C(21A)-C(31A)	−64.0(6)
O(21A)-C(21A)-C(31A)-O(31A)	59.2(6)
C(11A)-C(21A)-C(31A)-O(31A)	−175.9(5)
O(21A)-C(21A)-C(31A)-C(41A)	178.3(5)
C(11A)-C(21A)-C(31A)-C(41A)	−56.8(6)
O(31A)-C(31A)-C(41A)-O(41A)	−67.3(6)
C(21A)-C(31A)-C(41A)-O(41A)	171.5(5)
O(31A)-C(31A)-C(41A)-C(51A)	176.5(5)
C(21A)-C(31A)-C(41A)-C(51A)	55.3(7)
O(41A)-C(41A)-C(51A)-O(51A)	−171.9(4)
C(31A)-C(41A)-C(51A)-O(51A)	−55.5(6)
O(41A)-C(41A)-C(51A)-C(61A)	71.3(6)
C(31A)-C(41A)-C(51A)-C(61A)	−172.3(5)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
O(51A)-C(51A)-C(61A)-O(61A)	58.8(7)
C(41A)-C(51A)-C(61A)-O(61A)	178.5(6)
O(52A)-C(12A)-C(22A)-O(22A)	-174.0(5)
O(41A)-C(12A)-C(22A)-O(22A)	64.5(6)
O(52A)-C(12A)-C(22A)-C(32A)	61.5(6)
O(41A)-C(12A)-C(22A)-C(32A)	-60.0(6)
O(22A)-C(22A)-C(32A)-O(32A)	59.9(6)
C(12A)-C(22A)-C(32A)-O(32A)	-177.2(4)
O(22A)-C(22A)-C(32A)-C(42A)	179.7(4)
C(12A)-C(22A)-C(32A)-C(42A)	-57.4(6)
O(32A)-C(32A)-C(42A)-O(42A)	-66.0(6)
C(22A)-C(32A)-C(42A)-O(42A)	173.7(4)
O(32A)-C(32A)-C(42A)-C(52A)	173.2(5)
C(22A)-C(32A)-C(42A)-C(52A)	53.0(6)
O(42A)-C(42A)-C(52A)-O(52A)	-170.7(4)
C(32A)-C(42A)-C(52A)-O(52A)	-51.3(6)
O(42A)-C(42A)-C(52A)-C(62A)	69.1(6)
C(32A)-C(42A)-C(52A)-C(62A)	-171.6(5)
O(52A)-C(52A)-C(62A)-O(62A)	-69.3(6)
C(42A)-C(52A)-C(62A)-O(62A)	53.5(7)
O(42A)-C(13A)-C(23A)-O(23A)	56.8(6)
O(53A)-C(13A)-C(23A)-O(23A)	179.6(5)
O(42A)-C(13A)-C(23A)-C(33A)	-66.9(6)
O(53A)-C(13A)-C(23A)-C(33A)	55.9(6)
O(23A)-C(23A)-C(33A)-O(33A)	62.3(6)
C(13A)-C(23A)-C(33A)-O(33A)	-175.8(5)
O(23A)-C(23A)-C(33A)-C(43A)	-179.7(5)
C(13A)-C(23A)-C(33A)-C(43A)	-57.8(6)
O(33A)-C(33A)-C(43A)-O(43A)	-61.4(6)
C(23A)-C(33A)-C(43A)-O(43A)	178.4(4)
O(33A)-C(33A)-C(43A)-C(53A)	178.5(5)
C(23A)-C(33A)-C(43A)-C(53A)	58.3(6)
O(43A)-C(43A)-C(53A)-O(53A)	-179.2(4)
C(33A)-C(43A)-C(53A)-O(53A)	-59.6(6)
O(43A)-C(43A)-C(53A)-C(63A)	61.9(7)
C(33A)-C(43A)-C(53A)-C(63A)	-178.5(5)
O(53A)-C(53A)-C(63A)-O(63A)	-62.3(7)
C(43A)-C(53A)-C(63A)-O(63A)	57.7(8)
O(54A)-C(14A)-C(24A)-O(24A)	-176.7(4)
O(43A)-C(14A)-C(24A)-O(24A)	61.2(6)
O(54A)-C(14A)-C(24A)-C(34A)	59.8(6)
O(43A)-C(14A)-C(24A)-C(34A)	-62.3(6)
O(24A)-C(24A)-C(34A)-O(34A)	62.6(6)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C(14A)-C(24A)-C(34A)-O(34A)	−175.2(4)
O(24A)-C(24A)-C(34A)-C(44A)	−179.0(4)
C(14A)-C(24A)-C(34A)-C(44A)	−56.8(6)
O(34A)-C(34A)-C(44A)-O(44A)	−67.2(5)
C(24A)-C(34A)-C(44A)-O(44A)	171.7(4)
O(34A)-C(34A)-C(44A)-C(54A)	173.5(4)
C(24A)-C(34A)-C(44A)-C(54A)	52.4(6)
O(44A)-C(44A)-C(54A)-O(54A)	−168.5(4)
C(34A)-C(44A)-C(54A)-O(54A)	−51.0(6)
O(44A)-C(44A)-C(54A)-C(64A)	72.7(6)
C(34A)-C(44A)-C(54A)-C(64A)	−169.8(5)
O(54A)-C(54A)-C(64A)-O(64A)	−63.5(6)
C(44A)-C(54A)-C(64A)-O(64A)	58.3(7)
O(55A)-C(15A)-C(25A)-O(25A)	−177.7(5)
O(44A)-C(15A)-C(25A)-O(25A)	61.5(6)
O(55A)-C(15A)-C(25A)-C(35A)	57.2(6)
O(44A)-C(15A)-C(25A)-C(35A)	−63.7(6)
O(25A)-C(25A)-C(35A)-O(35A)	59.8(6)
C(15A)-C(25A)-C(35A)-O(35A)	−174.6(4)
O(25A)-C(25A)-C(35A)-C(45A)	179.3(5)
C(15A)-C(25A)-C(35A)-C(45A)	−55.0(6)
O(35A)-C(35A)-C(45A)-O(45A)	−66.7(6)
C(25A)-C(35A)-C(45A)-O(45A)	172.6(5)
O(35A)-C(35A)-C(45A)-C(55A)	175.6(5)
C(25A)-C(35A)-C(45A)-C(55A)	54.9(7)
O(45A)-C(45A)-C(55A)-O(55A)	−173.3(4)
C(35A)-C(45A)-C(55A)-O(55A)	−55.4(7)
O(45A)-C(45A)-C(55A)-C(65A)	66.4(10)
C(35A)-C(45A)-C(55A)-C(65A)	−175.7(9)
O(45A)-C(45A)-C(55A)-C(65')	86(3)
C(35A)-C(45A)-C(55A)-C(65')	−156(3)
O(56A)-C(16A)-C(26A)-O(26A)	−176.3(4)
O(45A)-C(16A)-C(26A)-O(26A)	63.5(6)
O(56A)-C(16A)-C(26A)-C(36A)	59.4(5)
O(45A)-C(16A)-C(26A)-C(36A)	−60.7(5)
O(26A)-C(26A)-C(36A)-O(36A)	59.0(6)
C(16A)-C(26A)-C(36A)-O(36A)	−176.8(4)
O(26A)-C(26A)-C(36A)-C(46A)	177.6(4)
C(16A)-C(26A)-C(36A)-C(46A)	−58.2(5)
O(36A)-C(36A)-C(46A)-O(46A)	−65.1(6)
C(26A)-C(36A)-C(46A)-O(46A)	174.4(4)
O(36A)-C(36A)-C(46A)-C(56A)	175.2(4)
C(26A)-C(36A)-C(46A)-C(56A)	54.8(6)
O(46A)-C(46A)-C(56A)-O(56A)	−171.4(4)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C(36A)-C(46A)-C(56A)-O(56A)	−51.9(6)
O(46A)-C(46A)-C(56A)-C(66A)	69.5(6)
C(36A)-C(46A)-C(56A)-C(66A)	−171.1(5)
O(56A)-C(56A)-C(66A)-O(66A)	−65.5(6)
C(46A)-C(56A)-C(66A)-O(66A)	56.5(7)
O(57A)-C(17A)-C(27A)-O(27A)	−177.5(4)
O(46A)-C(17A)-C(27A)-O(27A)	61.2(6)
O(57A)-C(17A)-C(27A)-C(37A)	56.7(6)
O(46A)-C(17A)-C(27A)-C(37A)	−64.6(6)
O(27A)-C(27A)-C(37A)-O(37A)	56.7(6)
C(17A)-C(27A)-C(37A)-O(37A)	−179.1(4)
O(27A)-C(27A)-C(37A)-C(47A)	175.5(4)
C(17A)-C(27A)-C(37A)-C(47A)	−60.3(6)
O(37A)-C(37A)-C(47A)-O(47A)	−62.6(6)
C(27A)-C(37A)-C(47A)-O(47A)	176.9(4)
O(37A)-C(37A)-C(47A)-C(57A)	177.7(5)
C(27A)-C(37A)-C(47A)-C(57A)	57.1(6)
O(47A)-C(47A)-C(57A)-O(57A)	−173.0(4)
C(37A)-C(47A)-C(57A)-O(57A)	−53.8(6)
O(47A)-C(47A)-C(57A)-C(67)	72.4(7)
C(37A)-C(47A)-C(57A)-C(67)	−168.4(6)
O(47A)-C(47A)-C(57A)-C(67')	40.1(14)
C(37A)-C(47A)-C(57A)-C(67')	159.3(13)
O(52B)-C(12B)-C(22B)-O(22B)	−178.5(4)
O(41B)-C(12B)-C(22B)-O(22B)	60.1(5)
O(52B)-C(12B)-C(22B)-C(32B)	57.5(6)
O(41B)-C(12B)-C(22B)-C(32B)	−63.8(6)
O(22B)-C(22B)-C(32B)-O(32B)	57.8(6)
C(12B)-C(22B)-C(32B)-O(32B)	−179.4(4)
O(22B)-C(22B)-C(32B)-C(42B)	−179.7(4)
C(12B)-C(22B)-C(32B)-C(42B)	−56.9(6)
O(32B)-C(32B)-C(42B)-O(42B)	−65.5(5)
C(22B)-C(32B)-C(42B)-O(42B)	174.1(4)
O(32B)-C(32B)-C(42B)-C(52B)	175.1(4)
C(22B)-C(32B)-C(42B)-C(52B)	54.6(5)
O(42B)-C(42B)-C(52B)-O(52B)	−171.6(4)
C(32B)-C(42B)-C(52B)-O(52B)	−53.0(6)
O(42B)-C(42B)-C(52B)-C(62B)	67.1(6)
C(32B)-C(42B)-C(52B)-C(62B)	−174.2(4)
O(52B)-C(52B)-C(62B)-O(62B)	−66.4(6)
C(42B)-C(52B)-C(62B)-O(62B)	56.4(6)
O(53B)-C(13B)-C(23B)-O(23B)	−178.6(4)
O(42B)-C(13B)-C(23B)-O(23B)	58.9(5)
O(53B)-C(13B)-C(23B)-C(33B)	59.9(5)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
O(42B)-C(13B)-C(23B)-C(33B)	−62.6(5)
O(23B)-C(23B)-C(33B)-O(33B)	60.5(6)
C(13B)-C(23B)-C(33B)-O(33B)	−179.9(4)
O(23B)-C(23B)-C(33B)-C(43B)	−179.3(4)
C(13B)-C(23B)-C(33B)-C(43B)	−59.6(5)
O(33B)-C(33B)-C(43B)-O(43B)	−67.3(5)
C(23B)-C(33B)-C(43B)-O(43B)	173.7(4)
O(33B)-C(33B)-C(43B)-C(53B)	174.7(4)
C(23B)-C(33B)-C(43B)-C(53B)	55.7(6)
O(43B)-C(43B)-C(53B)-O(53B)	−170.0(4)
C(33B)-C(43B)-C(53B)-O(53B)	−53.0(6)
O(43B)-C(43B)-C(53B)-C(63B)	72.4(6)
C(33B)-C(43B)-C(53B)-C(63B)	−170.6(4)
O(53B)-C(53B)-C(63B)-O(63B)	−61.1(6)
C(43B)-C(53B)-C(63B)-O(63B)	60.2(6)
O(54B)-C(14B)-C(24B)-O(24B)	−178.8(4)
O(43B)-C(14B)-C(24B)-O(24B)	60.4(5)
O(54B)-C(14B)-C(24B)-C(34B)	58.8(6)
O(43B)-C(14B)-C(24B)-C(34B)	−61.9(5)
O(24B)-C(24B)-C(34B)-O(34B)	61.4(6)
C(14B)-C(24B)-C(34B)-O(34B)	−178.1(4)
O(24B)-C(24B)-C(34B)-C(44B)	−178.8(5)
C(14B)-C(24B)-C(34B)-C(44B)	−58.3(6)
O(34B)-C(34B)-C(44B)-O(44B)	−67.4(6)
C(24B)-C(34B)-C(44B)-O(44B)	173.6(4)
O(34B)-C(34B)-C(44B)-C(54B)	174.2(5)
C(24B)-C(34B)-C(44B)-C(54B)	55.2(6)
O(44B)-C(44B)-C(54B)-O(54B)	−171.4(4)
C(34B)-C(44B)-C(54B)-O(54B)	−52.7(7)
O(44B)-C(44B)-C(54B)-C(64B)	72.1(7)
C(34B)-C(44B)-C(54B)-C(64B)	−169.2(6)
O(54B)-C(54B)-C(64B)-O(64B)	−59.6(7)
C(44B)-C(54B)-C(64B)-O(64B)	61.0(7)
O(55B)-C(15B)-C(25B)-O(25B)	−178.2(5)
O(44B)-C(15B)-C(25B)-O(25B)	60.0(6)
O(55B)-C(15B)-C(25B)-C(35B)	60.1(6)
O(44B)-C(15B)-C(25B)-C(35B)	−61.8(6)
O(25B)-C(25B)-C(35B)-O(35B)	59.2(6)
C(15B)-C(25B)-C(35B)-O(35B)	−179.0(4)
O(25B)-C(25B)-C(35B)-C(45B)	179.7(4)
C(15B)-C(25B)-C(35B)-C(45B)	−58.5(6)
O(35B)-C(35B)-C(45B)-O(45B)	−66.1(6)
C(25B)-C(35B)-C(45B)-O(45B)	174.7(4)
O(35B)-C(35B)-C(45B)-C(55B)	174.3(4)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C(25B)-C(35B)-C(45B)-C(55B)	55.1(6)
O(45B)-C(45B)-C(55B)-O(55B)	−170.1(4)
C(35B)-C(45B)-C(55B)-O(55B)	−52.3(6)
O(45B)-C(45B)-C(55B)-C(65B)	71.4(6)
C(35B)-C(45B)-C(55B)-C(65B)	−170.8(5)
O(55B)-C(55B)-C(65B)-O(65B)	−65.2(6)
C(45B)-C(55B)-C(65B)-O(65B)	56.6(7)
O(56B)-C(16B)-C(26B)-O(26B)	179.4(5)
O(45B)-C(16B)-C(26B)-O(26B)	58.8(6)
O(56B)-C(16B)-C(26B)-C(36B)	56.8(6)
O(45B)-C(16B)-C(26B)-C(36B)	−63.8(6)
O(26B)-C(26B)-C(36B)-O(36B)	64.1(6)
C(16B)-C(26B)-C(36B)-O(36B)	−176.1(4)
O(26B)-C(26B)-C(36B)-C(46B)	−177.0(5)
C(16B)-C(26B)-C(36B)-C(46B)	−57.1(6)
O(36B)-C(36B)-C(46B)-O(46B)	−63.3(6)
C(26B)-C(36B)-C(46B)-O(46B)	177.8(5)
O(36B)-C(36B)-C(46B)-C(56B)	175.3(5)
C(26B)-C(36B)-C(46B)-C(56B)	56.4(7)
O(46B)-C(46B)-C(56B)-O(56B)	−175.6(5)
C(36B)-C(46B)-C(56B)-O(56B)	−55.6(7)
O(46B)-C(46B)-C(56B)-C(66B)	66.8(8)
C(36B)-C(46B)-C(56B)-C(66B)	−173.2(7)
O(56B)-C(56B)-C(66B)-O(66B)	−74.2(9)
C(46B)-C(56B)-C(66B)-O(66B)	45.8(10)
O(57B)-C(17B)-C(27B)-O(27B)	−178.5(4)
O(46B)-C(17B)-C(27B)-O(27B)	59.4(6)
O(57B)-C(17B)-C(27B)-C(37B)	60.2(6)
O(46B)-C(17B)-C(27B)-C(37B)	−61.8(6)
O(27B)-C(27B)-C(37B)-O(37B)	65.8(6)
C(17B)-C(27B)-C(37B)-O(37B)	−174.1(4)
O(27B)-C(27B)-C(37B)-C(47B)	−177.0(4)
C(17B)-C(27B)-C(37B)-C(47B)	−57.0(6)
O(37B)-C(37B)-C(47B)-O(47B)	−68.3(5)
C(27B)-C(37B)-C(47B)-O(47B)	172.0(4)
O(37B)-C(37B)-C(47B)-C(57B)	172.5(4)
C(27B)-C(37B)-C(47B)-C(57B)	52.8(6)
O(47B)-C(47B)-C(57B)-O(57B)	−170.0(4)
C(37B)-C(47B)-C(57B)-O(57B)	−51.6(6)
O(47B)-C(47B)-C(57B)-C(67B)	70.3(6)
C(37B)-C(47B)-C(57B)-C(67B)	−171.3(5)
O(57B)-C(57B)-C(67B)-O(67B)	−64.4(6)
C(47B)-C(57B)-C(67B)-O(67B)	57.7(7)
O(51B)-C(11B)-C(21B)-O(21B)	−177.7(5)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
O(47B)-C(11B)-C(21B)-O(21B)	60.4(6)
O(51B)-C(11B)-C(21B)-C(31B)	58.3(6)
O(47B)-C(11B)-C(21B)-C(31B)	−63.7(6)
O(21B)-C(21B)-C(31B)-O(31B)	57.9(6)
C(11B)-C(21B)-C(31B)-O(31B)	−179.1(5)
O(21B)-C(21B)-C(31B)-C(41B)	179.8(5)
C(11B)-C(21B)-C(31B)-C(41B)	−57.3(6)
O(31B)-C(31B)-C(41B)-O(41B)	−67.3(6)
C(21B)-C(31B)-C(41B)-O(41B)	174.0(4)
O(31B)-C(31B)-C(41B)-C(51B)	174.5(5)
C(21B)-C(31B)-C(41B)-C(51B)	55.8(6)
O(41B)-C(41B)-C(51B)-O(51B)	−171.9(4)
C(31B)-C(41B)-C(51B)-O(51B)	−53.2(6)
O(41B)-C(41B)-C(51B)-C(61B)	70.2(7)
C(31B)-C(41B)-C(51B)-C(61B)	−171.1(6)
O(51B)-C(51B)-C(61B)-O(61B)	−61.1(7)
C(41B)-C(51B)-C(61B)-O(61B)	58.6(8)
O(52A)-C(12A)-O(41A)-C(41A)	114.1(5)
C(22A)-C(12A)-O(41A)-C(41A)	−126.5(5)
C(31A)-C(41A)-O(41A)-C(12A)	127.8(5)
C(51A)-C(41A)-O(41A)-C(12A)	−114.6(5)
O(47A)-C(11A)-O(51A)-C(51A)	59.8(6)
C(21A)-C(11A)-O(51A)-C(51A)	−60.8(6)
C(41A)-C(51A)-O(51A)-C(11A)	59.8(6)
C(61A)-C(51A)-O(51A)-C(11A)	−179.8(5)
O(53A)-C(13A)-O(42A)-C(42A)	116.3(5)
C(23A)-C(13A)-O(42A)-C(42A)	−122.1(5)
C(32A)-C(42A)-O(42A)-C(13A)	130.6(5)
C(52A)-C(42A)-O(42A)-C(13A)	−107.5(5)
O(41A)-C(12A)-O(52A)-C(52A)	55.9(6)
C(22A)-C(12A)-O(52A)-C(52A)	−61.8(6)
C(62A)-C(52A)-O(52A)-C(12A)	−179.4(5)
C(42A)-C(52A)-O(52A)-C(12A)	56.4(6)
O(54A)-C(14A)-O(43A)-C(43A)	110.4(5)
C(24A)-C(14A)-O(43A)-C(43A)	−128.7(5)
C(33A)-C(43A)-O(43A)-C(14A)	124.9(5)
C(53A)-C(43A)-O(43A)-C(14A)	−116.0(5)
O(42A)-C(13A)-O(53A)-C(53A)	64.6(6)
C(23A)-C(13A)-O(53A)-C(53A)	−57.7(7)
C(63A)-C(53A)-O(53A)-C(13A)	−178.5(5)
C(43A)-C(53A)-O(53A)-C(13A)	60.3(7)
O(55A)-C(15A)-O(44A)-C(44A)	111.4(5)
C(25A)-C(15A)-O(44A)-C(44A)	−127.5(5)
C(34A)-C(44A)-O(44A)-C(15A)	127.4(5)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C(54A)-C(44A)-O(44A)-C(15A)	−111.9(5)
O(43A)-C(14A)-O(54A)-C(54A)	61.0(6)
C(24A)-C(14A)-O(54A)-C(54A)	−59.8(6)
C(64A)-C(54A)-O(54A)-C(14A)	178.2(4)
C(44A)-C(54A)-O(54A)-C(14A)	55.6(6)
O(56A)-C(16A)-O(45A)-C(45A)	115.2(5)
C(26A)-C(16A)-O(45A)-C(45A)	−124.2(5)
C(35A)-C(45A)-O(45A)-C(16A)	123.1(5)
C(55A)-C(45A)-O(45A)-C(16A)	−117.6(5)
O(44A)-C(15A)-O(55A)-C(55A)	59.4(6)
C(25A)-C(15A)-O(55A)-C(55A)	−60.1(7)
C(65A)-C(55A)-O(55A)-C(15A)	−178.2(10)
C(45A)-C(55A)-O(55A)-C(15A)	59.1(7)
C(65')-C(55A)-O(55A)-C(15A)	167(3)
O(57A)-C(17A)-O(46A)-C(46A)	117.9(5)
C(27A)-C(17A)-O(46A)-C(46A)	−121.6(5)
C(36A)-C(46A)-O(46A)-C(17A)	124.9(5)
C(56A)-C(46A)-O(46A)-C(17A)	−114.2(5)
O(45A)-C(16A)-O(56A)-C(56A)	60.6(5)
C(26A)-C(16A)-O(56A)-C(56A)	−58.5(6)
C(66A)-C(56A)-O(56A)-C(16A)	176.5(4)
C(46A)-C(56A)-O(56A)-C(16A)	54.3(6)
O(51A)-C(11A)-O(47A)-C(47A)	116.6(5)
C(21A)-C(11A)-O(47A)-C(47A)	−122.9(5)
C(37A)-C(47A)-O(47A)-C(11A)	128.8(5)
C(57A)-C(47A)-O(47A)-C(11A)	−112.4(5)
O(46A)-C(17A)-O(57A)-C(57A)	65.9(7)
C(27A)-C(17A)-O(57A)-C(57A)	−54.9(7)
C(67)-C(57A)-O(57A)-C(17A)	173.0(5)
C(47A)-C(57A)-O(57A)-C(17A)	54.4(7)
C(67')-C(57A)-O(57A)-C(17A)	−160.5(12)
O(57A)-C(57A)-C(67)-O(67A)	−55.4(8)
C(47A)-C(57A)-C(67)-O(67A)	64.2(8)
C(67')-C(57A)-C(67)-O(67A)	173.4(19)
O(57A)-C(57A)-C(67')-O(67')	47(2)
C(67)-C(57A)-C(67')-O(67')	106(3)
C(47A)-C(57A)-C(67')-O(67')	−169.5(15)
O(53B)-C(13B)-O(42B)-C(42B)	115.5(5)
C(23B)-C(13B)-O(42B)-C(42B)	−123.7(4)
C(52B)-C(42B)-O(42B)-C(13B)	−115.0(5)
C(32B)-C(42B)-O(42B)-C(13B)	124.9(4)
O(41B)-C(12B)-O(52B)-C(52B)	61.7(5)
C(22B)-C(12B)-O(52B)-C(52B)	−58.0(5)
C(62B)-C(52B)-O(52B)-C(12B)	179.5(4)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C(42B)-C(52B)-O(52B)-C(12B)	55.9(6)
C(33B)-C(43B)-O(43B)-C(14B)	129.9(4)
C(53B)-C(43B)-O(43B)-C(14B)	-111.7(5)
O(54B)-C(14B)-O(43B)-C(43B)	118.0(4)
C(24B)-C(14B)-O(43B)-C(43B)	-121.8(5)
O(42B)-C(13B)-O(53B)-C(53B)	61.7(5)
C(23B)-C(13B)-O(53B)-C(53B)	-58.5(5)
C(63B)-C(53B)-O(53B)-C(13B)	177.5(4)
C(43B)-C(53B)-O(53B)-C(13B)	55.9(6)
O(55B)-C(15B)-O(44B)-C(44B)	115.5(5)
C(25B)-C(15B)-O(44B)-C(44B)	-123.7(5)
C(34B)-C(44B)-O(44B)-C(15B)	123.8(5)
C(54B)-C(44B)-O(44B)-C(15B)	-116.2(5)
O(43B)-C(14B)-O(54B)-C(54B)	62.8(6)
C(24B)-C(14B)-O(54B)-C(54B)	-57.1(6)
C(64B)-C(54B)-O(54B)-C(14B)	175.0(6)
C(44B)-C(54B)-O(54B)-C(14B)	54.9(7)
O(56B)-C(16B)-O(45B)-C(45B)	116.7(5)
C(26B)-C(16B)-O(45B)-C(45B)	-123.2(5)
C(35B)-C(45B)-O(45B)-C(16B)	131.6(5)
C(55B)-C(45B)-O(45B)-C(16B)	-108.1(5)
O(44B)-C(15B)-O(55B)-C(55B)	60.6(6)
C(25B)-C(15B)-O(55B)-C(55B)	-58.6(6)
C(65B)-C(55B)-O(55B)-C(15B)	177.5(4)
C(45B)-C(55B)-O(55B)-C(15B)	54.9(6)
O(57B)-C(17B)-O(46B)-C(46B)	111.2(5)
C(27B)-C(17B)-O(46B)-C(46B)	-128.2(5)
C(36B)-C(46B)-O(46B)-C(17B)	125.1(5)
C(56B)-C(46B)-O(46B)-C(17B)	-114.2(6)
O(45B)-C(16B)-O(56B)-C(56B)	61.6(7)
C(26B)-C(16B)-O(56B)-C(56B)	-57.9(8)
C(66B)-C(56B)-O(56B)-C(16B)	178.1(7)
C(46B)-C(56B)-O(56B)-C(16B)	58.0(8)
C(37B)-C(47B)-O(47B)-C(11B)	128.3(5)
C(57B)-C(47B)-O(47B)-C(11B)	-111.6(5)
O(51B)-C(11B)-O(47B)-C(47B)	113.7(5)
C(21B)-C(11B)-O(47B)-C(47B)	-124.8(5)
O(46B)-C(17B)-O(57B)-C(57B)	59.6(6)
C(27B)-C(17B)-O(57B)-C(57B)	-61.0(6)
C(67B)-C(57B)-O(57B)-C(17B)	-179.8(5)
C(47B)-C(57B)-O(57B)-C(17B)	57.2(6)
O(52B)-C(12B)-O(41B)-C(41B)	116.0(5)
C(22B)-C(12B)-O(41B)-C(41B)	-123.0(5)
C(31B)-C(41B)-O(41B)-C(12B)	122.5(5)

Table S4. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C(51B)-C(41B)-O(41B)-C(12B)	−117.2(5)
O(47B)-C(11B)-O(51B)-C(51B)	61.4(6)
C(21B)-C(11B)-O(51B)-C(51B)	−59.1(6)
C(41B)-C(51B)-O(51B)-C(11B)	56.1(7)
C(61B)-C(51B)-O(51B)-C(11B)	176.8(6)
O(55A)-C(55A)-C(65A)-O(65A)	−56.7(15)
C(45A)-C(55A)-C(65A)-O(65A)	64.5(15)
C(65')-C(55A)-C(65A)-O(65A)	−7(10)
O(55A)-C(55A)-C(65')-O(65')	59(6)
C(65A)-C(55A)-C(65')-O(65')	−74(11)
C(45A)-C(55A)-C(65')-O(65')	171(5)

Table S5. Bond lengths [Å] in aegelinol.

Bond	Bond length [Å]
C2A-O2A	1.222(3)
C2A-O1A	1.374(3)
C2A-C3A	1.437(3)
C3A-C4A	1.343(3)
C4A-C10A	1.432(3)
C10A-C9A	1.393(3)
C10A-C5A	1.398(3)
C5A-C6A	1.387(3)
C6A-C7A	1.406(3)
C6A-C1'A	1.503(3)
C1'A-C2'A	1.518(4)
C2'A-O2'A	1.431(3)
C2'A-C3'A	1.522(4)
C3'A-O3'A	1.463(3)
C3'A-C4'A	1.513(4)
C3'A-C4'A	1.526(4)
C7A-O3'A	1.363(3)
C7A-C8A	1.385(3)
C8A-C9A	1.373(3)
C9A-O1A	1.384(3)
C2B-O2B	1.218(3)
C2B-O1B	1.373(3)
C2B-C3B	1.436(4)
C3B-C4B	1.346(4)
C4B-C10B	1.430(4)
C10B-C9B	1.391(3)
C10B-C5B	1.400(3)
C5B-C6B	1.385(4)
C6B-C7B	1.405(3)
C6B-C1'B	1.501(3)
C1'B-C2'B	1.523(4)
C2'B-O2'B	1.422(3)
C2'B-C3'B	1.527(4)
C3'B-O3'B	1.470(3)
C3'B-C4'B	1.512(4)
C3'B-C4'B	1.524(4)
C7B-O3'B	1.361(3)
C7B-C8B	1.389(3)
C8B-C9B	1.379(3)
C9B-O1B	1.385(3)
C2C-O2C	1.213(3)
C2C-O1C	1.377(3)
C2C-C3C	1.438(3)
C3C-C4C	1.342(3)
C4C-C10C	1.424(3)

Table S5. Cont.

Bond	Bond length [Å]
C10C-C9C	1.396(3)
C10C-C5C	1.398(3)
C5C-C6C	1.387(3)
C6C-C7C	1.400(3)
C6C-C1'C	1.501(3)
C1'C-C2'C	1.520(4)
C2'C-O2'C	1.429(3)
C2'C-C3'C	1.521(4)
C3'C-O3'C	1.467(3)
C3'C-C4'C	1.511(4)
C3'C-C4'C	1.516(4)
C7C-O3'C	1.357(3)
C7C-C8C	1.388(3)
C8C-C9C	1.376(3)
C9C-O1C	1.380(3)

Table S6. Angles [°] in aegelinol.

Angle	Angle [°]
O2A-C2A-O1A	116.4(2)
O2A-C2A-C3A	126.0(2)
O1A-C2A-C3A	117.6(2)
C4A-C3A-C2A	121.6(2)
C3A-C4A-C10A	120.2(2)
C9A-C10A-C5A	117.6(2)
C9A-C10A-C4A	118.3(2)
C5A-C10A-C4A	124.1(2)
C6A-C5A-C10A	122.1(2)
C5A-C6A-C7A	117.8(2)
C5A-C6A-C1'A	122.1(2)
C7A-C6A-C1'A	120.0(2)
C6A-C1'A-C2'A	110.4(2)
O2'A-C2'A-C1'A	111.4(2)
O2'A-C2'A-C3'A	108.6(2)
C1'A-C2'A-C3'A	110.3(2)
O3'A-C3'A-C4'A	104.6(2)
O3'A-C3'A-C2'A	109.73(19)
C4'A-C3'A-C2'A	112.2(2)
O3'A-C3'A-C4'A	108.4(2)
C4'A-C3'A-C4'A	110.3(2)
C2'A-C3'A-C4'A	111.4(2)
O3'A-C7A-C8A	115.8(2)
O3'A-C7A-C6A	122.9(2)
C8A-C7A-C6A	121.2(2)
C9A-C8A-C7A	119.1(2)
C8A-C9A-O1A	117.3(2)
C8A-C9A-C10A	122.0(2)
O1A-C9A-C10A	120.7(2)
C2A-O1A-C9A	121.6(2)
C7A-O3'A-C3'A	118.61(19)
O2B-C2B-O1B	116.3(2)
O2B-C2B-C3B	126.3(2)
O1B-C2B-C3B	117.4(2)
C4B-C3B-C2B	121.4(2)
C3B-C4B-C10B	120.6(3)
C9B-C10B-C5B	117.3(2)
C9B-C10B-C4B	117.8(2)
C5B-C10B-C4B	124.9(2)
C6B-C5B-C10B	122.5(2)
C5B-C6B-C7B	117.9(2)
C5B-C6B-C1'B	122.1(2)
C7B-C6B-C1'B	120.0(2)
C6B-C1'B-C2'B	111.6(2)
O2'B-C2'B-C1'B	111.8(2)
O2'B-C2'B-C3'B	112.3(2)
C1'B-C2'B-C3'B	110.7(2)

Table S6. Cont.

Angle	Angle [°]
O3'B-C3'B-C4'B	104.3(2)
O3'B-C3'B-C2'B	108.5(2)
C4'B-C3'B-C2'B	110.6(3)
O3'B-C3'B-C4'B	109.7(2)
C4'B-C3'B-C4'B	112.1(2)
C2'B-C3'B-C4'B	111.2(2)
O3'B-C7B-C8B	115.9(2)
O3'B-C7B-C6B	123.0(2)
C8B-C7B-C6B	121.0(2)
C9B-C8B-C7B	119.0(2)
C8B-C9B-O1B	116.9(2)
C8B-C9B-C10B	122.2(2)
O1B-C9B-C10B	120.8(2)
C2B-O1B-C9B	121.8(2)
C7B-O3'B-C3'B	118.43(19)
O2C-C2C-O1C	116.2(2)
O2C-C2C-C3C	126.2(2)
O1C-C2C-C3C	117.6(2)
C4C-C3C-C2C	121.2(2)
C3C-C4C-C10C	120.8(2)
C9C-C10C-C5C	117.5(2)
C9C-C10C-C4C	118.0(2)
C5C-C10C-C4C	124.5(2)
C6C-C5C-C10C	122.1(2)
C5C-C6C-C7C	118.3(2)
C5C-C6C-C1'C	121.6(2)
C7C-C6C-C1'C	120.1(2)
C6C-C1'C-C2'C	110.2(2)
O2'C-C2'C-C1'C	111.3(2)
O2'C-C2'C-C3'C	110.0(2)
C1'C-C2'C-C3'C	110.6(2)
O3'C-C3'C-C4'C	104.5(2)
O3'C-C3'C-C2'C	108.5(2)
C4'C-C3'C-C2'C	109.8(2)
O3'C-C3'C-C4'C	110.3(2)
C4'C-C3'C-C4'C	111.9(2)
C2'C-C3'C-C4'C	111.6(2)
O3'C-C7C-C8C	116.0(2)
O3'C-C7C-C6C	123.2(2)
C8C-C7C-C6C	120.8(2)
C9C-C8C-C7C	119.4(2)
C8C-C9C-O1C	117.3(2)
C8C-C9C-C10C	121.9(2)
O1C-C9C-C10C	120.8(2)
C2C-O1C-C9C	121.56(19)
C7C-O3'C-C3'C	119.00(19)

Table S7. Torsion angles [°] in aegelinol.

Torsion angle	Torsion angle [°]
O2A-C2A-C3A-C4A	177.1(2)
O1A-C2A-C3A-C4A	−2.2(3)
C2A-C3A-C4A-C10A	−0.3(4)
C3A-C4A-C10A-C9A	1.2(4)
C3A-C4A-C10A-C5A	−178.7(2)
C9A-C10A-C5A-C6A	0.2(3)
C4A-C10A-C5A-C6A	−179.9(2)
C10A-C5A-C6A-C7A	−0.4(4)
C10A-C5A-C6A-C1'A	178.0(2)
C5A-C6A-C1'A-C2'A	−156.9(2)
C7A-C6A-C1'A-C2'A	21.4(3)
C6A-C1'A-C2'A-O2'A	70.3(3)
C6A-C1'A-C2'A-C3'A	−50.4(3)
O2'A-C2'A-C3'A-O3'A	−62.3(3)
C1'A-C2'A-C3'A-O3'A	60.0(3)
O2'A-C2'A-C3'A-C4'A	53.5(3)
C1'A-C2'A-C3'A-C4'A	175.8(2)
O2'A-C2'A-C3'A-C4'A	177.6(2)
C1'A-C2'A-C3'A-C4'A	−60.0(3)
C5A-C6A-C7A-O3'A	178.0(2)
C1'A-C6A-C7A-O3'A	−0.4(4)
C5A-C6A-C7A-C8A	0.7(3)
C1'A-C6A-C7A-C8A	−177.7(2)
O3'A-C7A-C8A-C9A	−178.3(2)
C6A-C7A-C8A-C9A	−0.8(4)
C5A-C10A-C9A-C8A	−179.89(19)
C4A-C10A-C9A-C8A	0.6(4)
C5A-C10A-C9A-O1A	−0.3(3)
C4A-C10A-C9A-O1A	179.8(2)
C7A-C8A-C9A-C10A	−179.8(2)
C7A-C8A-C9A-O1A	0.3(3)
O2A-C2A-O1A-C9A	−175.61(19)
C3A-C2A-O1A-C9A	3.7(3)
C10A-C9A-O1A-C2A	177.6(2)
C8A-C9A-O1A-C2A	−2.8(3)
C8A-C7A-O3'A-C3'A	−172.5(2)
C6A-C7A-O3'A-C3'A	10.1(3)
C4'A-C3'A-O3'A-C7A	−160.1(2)
C4'A-C3'A-O3'A-C7A	−39.6(3)
C2'A-C3'A-O3'A-C7A	82.3(3)
O2B-C2B-C3B-C4B	176.1(2)
O1B-C2B-C3B-C4B	−3.6(3)
C2B-C3B-C4B-C10B	0.4(4)

Table S7. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C3B-C4B-C10B-C9B	2.4(4)
C3B-C4B-C10B-C5B	−177.5(2)
C9B-C10B-C5B-C6B	0.4(3)
C4B-C10B-C5B-C6B	−179.6(2)
C10B-C5B-C6B-C7B	1.1(4)
C10B-C5B-C6B-C1'B	−179.1(2)
C5B-C6B-C1'B-C2'B	−159.3(2)
C7B-C6B-C1'B-C2'B	20.5(3)
C6B-C1'B-C2'B-O2'B	79.0(3)
C6B-C1'B-C2'B-C3'B	−47.1(3)
O2'B-C2'B-C3'B-O3'B	−67.7(3)
C1'B-C2'B-C3'B-O3'B	58.2(3)
O2'B-C2'B-C3'B-C4'B	47.7(3)
C1'B-C2'B-C3'B-C4'B	173.6(2)
O2'B-C2'B-C3'B-C4'B	172.2(2)
C1'B-C2'B-C3'B-C4'B	−62.0(3)
C5B-C6B-C7B-O3'B	175.7(2)
C1'B-C6B-C7B-O3'B	−4.0(4)
C5B-C6B-C7B-C8B	−1.7(3)
C1'B-C6B-C7B-C8B	178.6(2)
O3'B-C7B-C8B-C9B	−176.9(2)
C6B-C7B-C8B-C9B	0.7(3)
C5B-C10B-C9B-C8B	−178.59(19)
C4B-C10B-C9B-C8B	1.0(3)
C5B-C10B-C9B-O1B	−1.5(3)
C4B-C10B-C9B-O1B	178.5(2)
C7B-C8B-C9B-C10B	178.1(2)
C7B-C8B-C9B-O1B	−1.9(3)
O2B-C2B-O1B-C9B	−175.6(2)
C3B-C2B-O1B-C9B	4.2(3)
C10B-C9B-O1B-C2B	178.1(2)
C8B-C9B-O1B-C2B	−1.5(3)
C8B-C7B-O3'B-C3'B	−166.6(2)
C6B-C7B-O3'B-C3'B	15.8(3)
C4'B-C3'B-O3'B-C7B	−162.9(2)
C4'B-C3'B-O3'B-C7B	79.1(3)
C2'B-C3'B-O3'B-C7B	−42.6(3)
O2C-C2C-C3C-C4C	178.0(2)
O1C-C2C-C3C-C4C	−2.0(3)
C2C-C3C-C4C-C10C	0.2(4)
C3C-C4C-C10C-C9C	1.3(3)
C3C-C4C-C10C-C5C	−180.0(2)
C9C-C10C-C5C-C6C	0.9(3)
C4C-C10C-C5C-C6C	−177.8(2)

Table S7. Cont.

Torsion angle	Torsion angle [°]
C10C-C5C-C6C-C7C	0.5(3)
C10C-C5C-C6C-C1'C	179.3(2)
C5C-C6C-C1'C-C2'C	-154.0(2)
C7C-C6C-C1'C-C2'C	24.7(3)
C6C-C1'C-C2'C-O2'C	71.9(3)
C6C-C1'C-C2'C-C3'C	-50.8(3)
O2'C-C2'C-C3'C-O3'C	-65.7(3)
C1'C-C2'C-C3'C-O3'C	57.7(3)
O2'C-C2'C-C3'C-C4'C	50.2(3)
C1'C-C2'C-C3'C-C4'C	173.6(2)
O2'C-C2'C-C3'C-C4'C	173.7(2)
C1'C-C2'C-C3'C-C4'C	-62.9(3)
C5C-C6C-C7C-O3'C	174.5(2)
C1'C-C6C-C7C-O3'C	-4.3(4)
C5C-C6C-C7C-C8C	-2.0(3)
C1'C-C6C-C7C-C8C	179.2(2)
O3'C-C7C-C8C-C9C	-174.8(2)
C6C-C7C-C8C-C9C	1.9(3)
C5C-C10C-C9C-C8C	178.46(19)
C4C-C10C-C9C-C8C	-0.4(4)
C5C-C10C-C9C-O1C	-1.0(3)
C4C-C10C-C9C-O1C	177.9(2)
C7C-C8C-C9C-C10C	-179.80(19)
C7C-C8C-C9C-O1C	-1.0(3)
O2C-C2C-O1C-C9C	-177.72(19)
C3C-C2C-O1C-C9C	2.3(3)
C10C-C9C-O1C-C2C	-179.7(2)
C8C-C9C-O1C-C2C	-0.9(3)
C8C-C7C-O3'C-C3'C	-172.36(19)
C6C-C7C-O3'C-C3'C	11.0(4)
C4'C-C3'C-O3'C-C7C	-158.1(2)
C4'C-C3'C-O3'C-C7C	84.9(3)
C2'C-C3'C-O3'C-C7C	-37.6(3)

Table S8. H-Bonds in 1-BCD.

D	A	$d_{(D-H)}$ [Å]	$d_{(H..A)}$ [Å]	$\angle DHA$ [°]	$d_{(D..A)}$ [Å]
O2'A1	O13W	0.840	2.122	129.16	2.731
O2'B1	O61A	0.840	2.524	150.01	3.278
O2'A2	O17'W	0.840	1.824	134.51	2.487
O2'B2	O63B _[x+1, y, z+1]	0.840	2.065	151.37	2.831
O21	O37A	0.840	2.163	140.99	2.864
O31A	O31B	0.840	1.969	173.10	2.804
O61A	O14W	1.068	1.960	121.96	2.683
O22A	O37B	0.840	2.289	148.87	3.039
O22A	O18'W _[x+1, y, z]	0.840	2.607	143.00	3.316
O32A	O37B	0.840	1.863	166.02	2.686
O62A	O17W _[x+1, y, z+1]	0.863	1.935	147.92	2.705
O62A	O17'W _[x+1, y, z+1]	0.863	2.012	175.31	2.873
O23A	O15W	0.840	2.188	118.35	2.691
O23A	O36B	0.840	2.404	150.53	3.162
O33A	O24A	0.840	2.008	165.69	2.830
O33A	O43A	0.840	2.312	114.03	2.763
O63A	O9W	0.840	1.950	142.32	2.664
O24A	O35B	0.840	2.281	142.75	2.993
O34A	O25A	0.840	2.010	168.15	2.837
O34A	O44A	0.840	2.341	111.17	2.758
O64A	O67A _[x, y-1, z]	0.840	2.261	126.43	2.841
O25A	O1W	0.840	2.290	156.49	3.078
O25A	O7W _[x-1, y-1, z]	0.840	2.408	125.26	2.973
O35A	O34B	0.840	1.970	171.85	2.804
O26A	O35A	0.840	2.031	142.63	2.747
O36A	O18'W	0.840	1.974	138.08	2.659
O66A	O62A _[x-1, y, z]	0.840	2.117	133.75	2.765
O27A	O36A	0.840	1.924	161.39	2.733
O27A	O46A	0.840	2.388	111.57	2.807
O37A	O21A	0.840	2.197	136.46	2.864
O67A1	O24W	0.840	2.499	154.48	3.277
O67A2	O20W _[x, y, z+1]	0.840	2.627	161.97	3.436
O22B	O31B	0.840	2.013	145.77	2.748
O32B	O37A	0.840	1.934	164.80	2.753
O62B	O65B _[x, y+1, z]	0.840	2.140	132.42	2.777
O23B	O32B	0.840	1.949	160.47	2.755
O23B	O42B	0.840	2.279	114.51	2.736
O33B	O36A	0.840	1.938	162.04	2.749
O63B	O3W _[x-1, y, z]	0.840	1.865	176.56	2.704
O24B	O35A	0.840	2.508	135.02	3.159
O24B	O26A	0.840	2.630	110.55	3.029
O34B	O25B	0.840	1.979	147.99	2.728
O64B	O51A _[x-1, y-1, z-1]	0.840	2.196	169.12	3.025
O64B	O61A _[x-1, y-1, z-1]	0.840	2.220	116.96	2.707

Table S8. Cont.

D	A	$d_{(D-H)}$ [Å]	$d_{(H..A)}$ [Å]	<DHA [°]	$d_{(D..A)}$ [Å]
O25B	O5W	0.840	2.101	124.89	2.672
O35B	O34A	0.840	1.924	154.65	2.707
O65B	O2W	0.840	1.916	161.11	2.724
O26B	O4W	0.840	2.112	126.99	2.702
O26B	O33A	0.840	2.434	148.31	3.180
O36B	O33A	0.840	1.923	168.68	2.751
O66B	O24W _[x, y-1, z-1]	0.840	2.576	124.04	3.124
O27B	O32A	0.840	2.373	133.66	3.015
O37B	O21B	0.840	2.036	147.68	2.782
O67B	O63B _[x+1, y, z]	0.840	1.957	162.82	2.770
O21B	O7W	0.840	2.280	129.63	2.889
O21B	O18W _[x+1, y, z]	0.840	2.349	154.82	3.129
O31B	O22B	0.840	1.994	148.98	2.748
O61B	O20W	0.939	2.015	157.93	2.907
O65A	O19W	0.840	2.405	127.62	2.993
O13W	O21W _[x-1, y, z-1]	0.848	1.948	149.22	2.712
O13W	O19W _[x, y, z-1]	0.842	1.905	156.68	2.700

Table S9. H-Bonds in aegelinol.

D	A	$d_{(D-H)}$ [Å]	$d_{(H..A)}$ [Å]	<DHA [°]	$d_{(D..A)}$ [Å]
O2`A	O2A _[x-1/2, -y+3/2, -z+2]	0.84	2.08	2.902	164.5
O2`B	O2C _[x+1, y, z]	0.84	2.01	2.816	159.4
O2`C	O2B	0.84	2.03	2.851	165.8