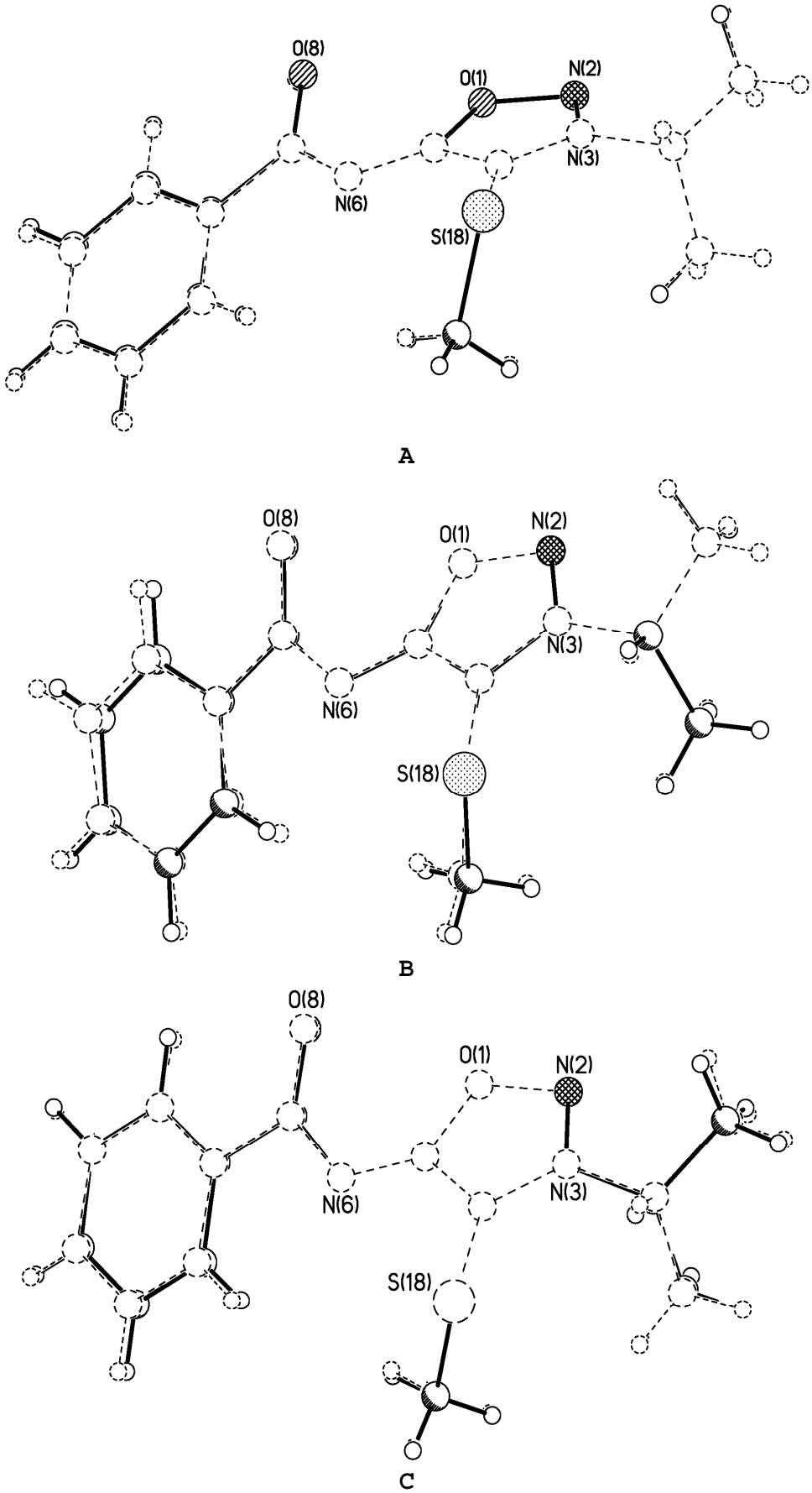
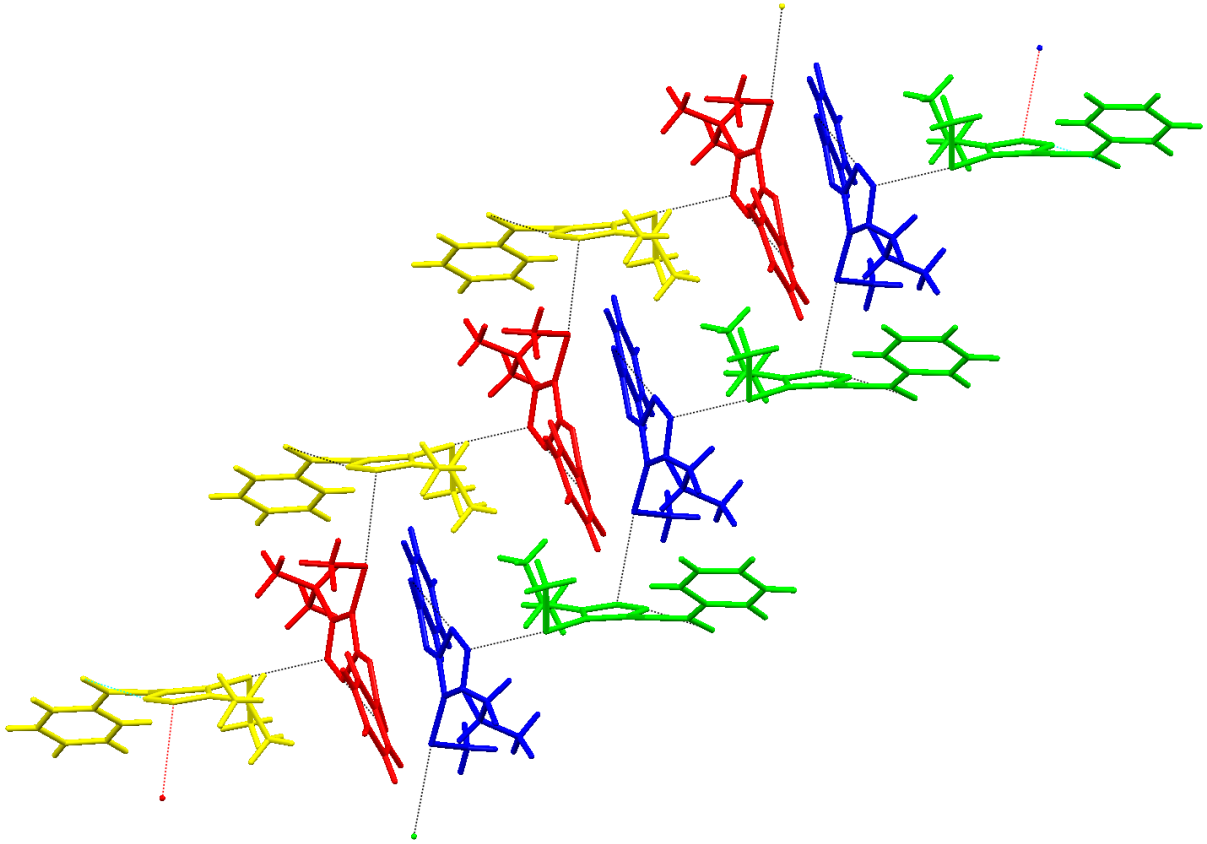
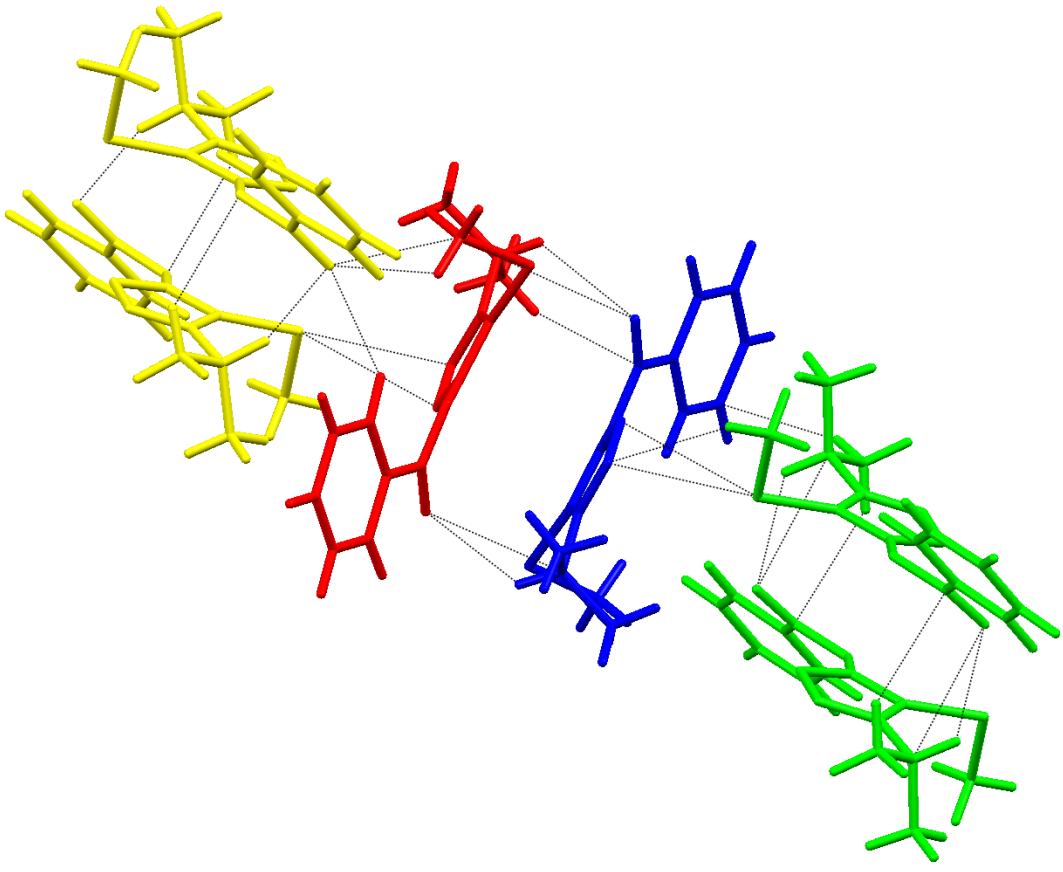


Fig. S1. The general view of compound **1** with the independent molecules superimposed: the green with blue molecule (**A**), the green with red (**B**)

and with orange species (**C**). Solid lines correspond to the green molecule, dashed lines - to the blue, red, and orange, respectively.



A



B

Fig. S2. Fragments of crystal packing showing the infinite zigzag chains formed by the C-S…π interactions (**A**) and the centrosymmetric dimer formed by C-H…O contacts (**B**).

Table S1. The bond lengths in the independent molecules in the crystalline **1** and those for the isolated molecule (according to the M052X/6-311++G** calculation).

Bond[a)]	Green	Blue	Red	Orange	Isolated
O(1)-C(5)	1.3796(8)	1.3801(7)	1.3809(8)	1.3821(8)	1.378
O(1)-N(2)	1.3849(8)	1.3874(8)	1.3876(8)	1.3882(8)	1.348
N(2)-N(3)	1.3024(8)	1.3031(8)	1.3031(8)	1.3024(8)	1.282
N(3)-C(4)	1.3548(8)	1.3531(8)	1.3533(8)	1.3571(8)	1.350
N(3)-C(15)	1.4940(8)	1.4956(8)	1.4950(9)	1.5011(9)	1.484
C(4)-C(5)	1.4080(8)	1.4079(8)	1.4075(8)	1.4120(9)	1.412
C(4)-S(18)	1.7286(6)	1.7280(6)	1.7284(6)	1.7294(6)	1.737
C(5)-N(6)	1.3072(8)	1.3058(8)	1.3055(8)	1.3020(9)	1.291
N(6)-C(7)	1.3722(8)	1.3731(8)	1.3714(8)	1.3765(8)	1.382
C(7)-O(8)	1.2323(8)	1.2327(8)	1.2332(8)	1.2326(8)	1.217
C(7)-C(9)	1.5023(9)	1.5033(9)	1.5003(9)	1.4993(9)	1.499
C(9)-C(10)	1.3950(9)	1.3961(9)	1.3972(9)	1.3965(10)	1.393
C(9)-C(14)	1.3973(9)	1.3968(9)	1.3989(9)	1.3977(10)	1.393
C(10)-C(11)	1.3942(10)	1.3957(10)	1.3948(10)	1.3949(11)	1.389
C(11)-C(12)	1.3924(12)	1.3934(12)	1.3929(11)	1.3918(13)	1.390
C(12)-C(13)	1.3945(12)	1.3938(13)	1.3944(11)	1.3912(14)	1.391
C(13)-C(14)	1.3897(10)	1.3925(10)	1.3918(10)	1.3920(12)	1.387
C(15)-C(16)	1.5174(10)	1.5173(10)	1.5166(10)	1.5200(11)	1.519
C(15)-C(17)	1.5255(11)	1.5245(10)	1.5248(12)	1.5250(11)	1.523
S(18)-C(19)	1.8104(8)	1.8117(8)	1.8133(8)	1.8129(8)	1.825

[a)] the atoms of the blue, red, and orange molecules in **1** are labeled with A, B, and C, respectively.

Table S2. The atomic charges for the independent species in the crystal of **1** and those for the isolated molecule.

Atom	Green	Blue	Red	Orange	Isolated
S(18)	0.00	-0.03	-0.03	0.00	0.15
O(1)	-0.59	-0.58	-0.59	-0.60	-0.66
O(8)	-0.89	-0.88	-0.88	-0.85	-1.17
N(2)	0.03	0.05	0.02	0.02	0.13
N(3)	-0.57	-0.58	-0.61	-0.58	-0.72
N(6)	-0.81	-0.81	-0.81	-0.80	-1.23

C(4)	0.16	0.16	0.17	0.17	0.24
C(5)	0.74	0.76	0.79	0.79	1.13
C(7)	1.08	1.06	1.04	1.08	1.42
C(9)	-0.03	-0.06	-0.04	-0.10	-0.04
C(10)	-0.10	-0.12	-0.13	-0.06	-0.03
C(11)	0.01	-0.02	-0.03	-0.01	-0.03
C(12)	-0.02	-0.04	-0.06	0.01	-0.03
C(13)	-0.10	-0.04	-0.07	-0.11	-0.03
C(14)	-0.07	-0.11	-0.08	-0.03	-0.02
C(15)	0.19	0.19	0.17	0.19	0.32
C(16)	-0.10	-0.08	-0.13	-0.10	0.01
C(17)	-0.01	-0.11	-0.10	-0.11	0.00
C(19)	-0.29	-0.35	-0.22	-0.25	-0.10
H(10)	0.13	0.10	0.12	0.13	0.07
H(11)	0.08	0.09	0.12	0.08	0.03
H(12)	0.13	0.09	0.11	0.08	0.03
H(13)	0.07	0.03	0.05	0.11	0.03
H(14)	0.08	0.10	0.10	0.04	0.08
H(15)	0.06	0.07	0.07	0.05	0.06
H(16C)	0.074	0.12	0.11	0.07	0.05
H(16B)	0.11	0.10	0.10	0.09	0.04
H(16A)	0.10	0.09	0.11	0.11	0.03
H(17C)	0.08	0.08	0.09	0.11	0.04
H(17A)	0.06	0.08	0.08	0.12	0.03
H(17B)	0.05	0.11	0.08	0.13	0.03
H(19A)	0.14	0.12	0.11	0.17	0.04
H(19B)	0.15	0.19	0.11	0.12	0.05
H(19C)	0.11	0.13	0.12	0.15	0.10

Table S3. The topological parameters of $\rho(\mathbf{r})$ distribution in BCPs of interionic interactions in **1**. The colors indicate the independent molecules the corresponding atoms belong to.

Interaction	$R^{a)}$, Å	$\rho(r)$, eÅ^{-3}	$\nabla^2\rho(r)$, eÅ^{-5}	$-v(r)$, a.u.	$h_e(r)$, a.u.	E_{int}, kcal/mol
S(18)…O(1A)	3.176	0.064	0.76	0.005104	0.001408	1.6

S(18)...H(12A)	3.22	0.025	0.28	0.001477	0.000712	0.5
S(18)...H(17F)	3.14	0.026	0.31	0.001613	0.000807	0.5
S(18A)...O(1)	3.204	0.061	0.71	0.004705	0.001328	1.5
S(18A)...H(12)	3.12	0.032	0.36	0.002012	0.000875	0.6
S(18A)...H(17C)	3.09	0.029	0.35	0.001845	0.000890	0.6
S(18B)...O(1C)	3.291	0.054	0.62	0.003991	0.001233	1.3
S(18B)...H(12C)	3.25	0.027	0.29	0.001548	0.000704	0.5
S(18B)...H(17L)	3.16	0.024	0.29	0.001472	0.000754	0.5
S(18C)...O(1B)	3.226	0.056	0.66	0.004211	0.001302	1.3
S(18C)...H(12B)	3.26	0.021	0.25	0.001249	0.000662	0.4
S(18C)...H(17I)	3.19	0.023	0.27	0.001976	0.000721	0.6
H(19A)...O(8B)	2.63	0.058	0.71	0.004528	0.001438	1.4
H(19A)...H(17K)	2.80	0.021	0.22	0.001122	0.000562	0.4
H(19C)...H(14B)	2.25	0.036	0.42	0.002384	0.000996	0.7
H(19C)...H(13A)	2.58	0.031	0.34	0.001898	0.000807	0.6
H(19D)...O(8)	2.72	0.053	0.66	0.004059	0.001371	1.3
H(19F)...H(13)	2.45	0.037	0.41	0.002397	0.000912	0.8
H(19F)...H(14)	2.58	0.032	0.38	0.002062	0.000936	0.6
H(19I)...O(8C)	2.46	0.062	0.82	0.005138	0.001665	1.6
H(19I)...H(13C)	2.33	0.042	0.51	0.002983	0.001135	0.9
H(19G)...H(19G)	2.45	0.037	0.44	0.002487	0.001031	0.8
H(19G)...O(1C)	2.77	0.028	0.40	0.00193	0.001063	0.6
H(19H)...H(17H)	2.38	0.028	0.39	0.001953	0.001031	0.6
H(19K)...H(17B)	2.81	0.032	0.34	0.001927	0.000785	0.6
H(19L)...H(14A)	2.35	0.028	0.33	0.001739	0.000835	0.5
H(19L)...H(13B)	2.83	0.023	0.24	0.001276	0.000624	0.4
H(19J)...O(8A)	2.74	0.054	0.67	0.004176	0.001384	1.3
O(1)...C(5)	3.407	0.041	0.42	0.002609	0.000886	0.8
O(8)...H(15)	2.38	0.080	1.01	0.007012	0.001715	2.2
O(1A)...C(4B)	3.370	0.041	0.42	0.002599	0.000881	0.8
O(8A)...H(15B)	2.48	0.070	0.86	0.005811	0.001542	1.8
O(1B)...C(5A)	3.421	0.041	0.41	0.002562	0.000842	0.8
O(8B)...H(15A)	2.39	0.079	0.99	0.006875	0.001693	2.2
O(8C)...H(10B)	2.42	0.054	0.83	0.004683	0.001941	1.5

O(8C)...H(15C)	2.46	0.059	0.79	0.004837	0.001679	1.5
N(6)...H(12A)	2.79	0.028	0.4	0.002008	0.001085	0.6
N(2A)...H(12C)	2.92	0.023	0.3	0.001505	0.000819	0.5
N(6A)...H(12)	2.70	0.031	0.48	0.002375	0.001283	0.7
N(2B)...H(11)	3.22	0.016	0.18	0.00087	0.000522	0.3
N(6B)...H(12C)	2.78	0.027	0.38	0.001895	0.001027	0.6
N(2C)...C(4C)	3.414	0.038	0.4	0.002388	0.000869	0.8
N(6C)...H(15K)	2.63	0.052	0.62	0.003891	0.001263	1.2
N(16C)...H(12B)	2.79	0.026	0.38	0.001852	0.001022	0.6
C(6)...H(17D)	2.92	0.038	0.41	0.002427	0.000910	0.8
C(10)...H(15A)	3.30	0.025	0.24	0.001325	0.005620	0.4
C(9A)...H(17A)	2.88	0.040	0.43	0.002598	0.000957	0.8
C(10A)...H(15)	3.21	0.027	0.26	0.001502	0.000608	0.5
C(11A)...H(16A)	2.77	0.032	0.42	0.002245	0.001062	0.7
C(9B)...H(17J)	2.91	0.043	0.43	0.002719	0.000868	0.9
C(10C)...H(15B)	3.28	0.025	0.24	0.001352	0.000567	0.4
C(10C)...H(16G)	2.76	0.033	0.43	0.002303	0.001074	0.7
C(13C)...H(16L)	2.90	0.030	0.36	0.00194	0.000881	0.6
H(10)...H(14B)	2.19	0.036	0.48	0.002606	0.001176	0.8
H(10)...H(13A)	2.59	0.033	0.34	0.001977	0.000767	0.6
H(11)...H(16I)	2.69	0.023	0.24	0.001274	0.000618	0.4
H(13)...H(13)	2.50	0.034	0.38	0.002166	0.000901	0.7
H(13)...H(10A)	2.60	0.034	0.35	0.002058	0.000778	0.7
H(16A)...H(16B)	2.54	0.045	0.49	0.003038	0.001037	1.0
H(11A)...H(16C)	2.65	0.025	0.27	0.001428	0.000666	0.4
H(13A)...H(13B)	2.46	0.034	0.4	0.00226	0.000959	0.7
H(14A)...H(10C)	2.27	0.032	0.39	0.002151	0.000971	0.7
H(10B)...H(13C)	2.60	0.030	0.30	0.001724	0.000687	0.5
H(11B)...H(14C)	2.65	0.026	0.30	0.001564	0.000773	0.5
H(12B)...H(10C)	2.64	0.039	0.39	0.002393	0.000812	0.8
H(16H)...H(16D)	2.51	0.047	0.51	0.003219	0.001061	1.0
H(11C)...H(16E)	2.56	0.030	0.31	0.001742	0.000728	0.5
H(13C)...H(14C)	2.22	0.037	0.51	0.002742	0.001271	0.8
H(14C)...H(14C)	2.54	0.041	0.44	0.002691	0.000948	0.8

H(16K)...H(12B)	2.45	0.026	0.30	0.001576	0.000750	0.5
H(16K)...H(11B)	2.73	0.028	0.31	0.001682	0.000771	0.5

a) the deviation in the bond length determination for the bonds including the non-hydrogen atoms in all cases is not more than 0.001 Å.

Table S4. Monopole Populations, Radial Parameters and Net Atomic Charges.

Atom	Pval	Kappa	P00	Kappa'	Net charge
S(18)	6.058	1.033	0.000	0.984	-0.05830
S(18A)	6.094	1.033	0.000	0.984	-0.09390
S(18B)	6.091	1.033	0.000	0.984	-0.09150
S(18C)	6.052	1.033	0.000	0.984	-0.05190
O(1)	6.066	1.007	0.000	1.016	-0.06610
O(8)	6.101	1.004	0.000	0.985	-0.10050
O(1A)	6.048	1.007	0.000	1.016	-0.04830
O(8A)	6.089	1.004	0.000	0.985	-0.08880
O(1B)	6.061	1.007	0.000	1.016	-0.06060
O(8B)	6.105	1.004	0.000	0.985	-0.10520
O(1C)	6.085	1.007	0.000	1.016	-0.08530
O(8C)	6.062	1.004	0.000	0.985	-0.06220
N(2)	5.077	1.001	0.000	1.006	-0.07720
N(3)	5.077	1.008	0.000	0.947	-0.07740
N(6)	5.067	1.003	0.000	0.990	-0.06660
N(2A)	5.057	1.001	0.000	1.006	-0.05660
N(3A)	5.088	1.008	0.000	0.947	-0.08770
N(6A)	5.072	1.003	0.000	0.990	-0.07180
N(2B)	5.095	1.001	0.000	1.006	-0.09460
N(3B)	5.102	1.008	0.000	0.947	-0.10200
N(6B)	5.069	1.003	0.000	0.990	-0.06870
N(2C)	5.074	1.001	0.000	1.006	-0.07410
N(3C)	5.101	1.008	0.000	0.947	-0.10120
N(6C)	5.069	1.003	0.000	0.990	-0.06900
C(4)	4.106	1.023	0.000	0.988	-0.10620
C(5)	4.103	1.012	0.000	0.959	-0.10290
C(7)	4.071	1.010	0.000	0.962	-0.07140
C(9)	4.043	1.016	0.000	0.977	-0.04340
C(10)	4.080	1.015	0.000	0.990	-0.07970
C(11)	4.013	1.015	0.000	0.990	-0.01350
C(12)	4.012	1.015	0.000	0.990	-0.01190
C(13)	4.090	1.015	0.000	0.990	-0.09030
C(14)	4.058	1.015	0.000	0.990	-0.05820
C(15)	4.007	1.013	0.000	0.976	-0.00730
C(16)	4.033	1.018	0.000	0.969	-0.03270
C(17)	3.972	1.018	0.000	0.969	+0.02800
C(19)	4.050	1.012	0.000	1.016	-0.05040
C(4A)	4.107	1.023	0.000	0.988	-0.10720
C(5A)	4.083	1.012	0.000	0.959	-0.08260
C(7A)	4.097	1.010	0.000	0.962	-0.09740
C(9A)	4.060	1.016	0.000	0.977	-0.06040
C(10A)	4.105	1.015	0.000	0.990	-0.10490
C(11A)	4.029	1.015	0.000	0.990	-0.02890
C(12A)	4.033	1.015	0.000	0.990	-0.03310
C(13A)	4.055	1.015	0.000	0.990	-0.05520
C(14A)	4.072	1.015	0.000	0.990	-0.07160
C(15A)	4.022	1.013	0.000	0.976	-0.02200
C(16A)	4.039	1.018	0.000	0.969	-0.03860
C(17A)	4.000	1.018	0.000	0.969	+0.00020
C(19A)	4.092	1.012	0.000	1.016	-0.09230
C(4B)	4.103	1.023	0.000	0.988	-0.10250
C(5B)	4.051	1.012	0.000	0.959	-0.05050
C(7B)	4.095	1.010	0.000	0.962	-0.09540
C(9B)	4.048	1.016	0.000	0.977	-0.04790
C(10B)	4.092	1.015	0.000	0.990	-0.09240
C(11B)	4.035	1.015	0.000	0.990	-0.03510
C(12B)	4.049	1.015	0.000	0.990	-0.04900
C(13B)	4.086	1.015	0.000	0.990	-0.08610
C(14B)	4.066	1.015	0.000	0.990	-0.06650
C(15B)	4.029	1.013	0.000	0.976	-0.02850
C(16B)	4.035	1.018	0.000	0.969	-0.03530
C(17B)	3.998	1.018	0.000	0.969	+0.00230
C(19B)	4.088	1.012	0.000	1.016	-0.08820

C(4C)	4.076	1.023	0.000	0.988	-0.07580
C(5C)	4.077	1.012	0.000	0.959	-0.07740
C(7C)	4.089	1.010	0.000	0.962	-0.08880
C(9C)	4.074	1.016	0.000	0.977	-0.07400
C(10C)	4.067	1.015	0.000	0.990	-0.06690
C(11C)	4.005	1.015	0.000	0.990	-0.00460
C(12C)	3.974	1.015	0.000	0.990	+0.02550
C(13C)	4.076	1.015	0.000	0.990	-0.07620
C(14C)	4.066	1.015	0.000	0.990	-0.06610
C(15C)	4.009	1.013	0.000	0.976	-0.00930
C(16C)	4.030	1.018	0.000	0.969	-0.03020
C(17C)	4.011	1.018	0.000	0.969	-0.01060
C(19C)	4.022	1.012	0.000	1.016	-0.02240
H(10)	0.898	1.200	0.000	1.200	+0.10240
H(11)	0.919	1.200	0.000	1.200	+0.08070
H(12)	0.891	1.200	0.000	1.200	+0.10890
H(13)	0.926	1.200	0.000	1.200	+0.07380
H(14)	0.931	1.200	0.000	1.200	+0.06930
H(15)	0.922	1.200	0.000	1.200	+0.07790
H(16C)	0.920	1.200	0.000	1.200	+0.08040
H(16B)	0.914	1.200	0.000	1.200	+0.08570
H(16A)	0.920	1.200	0.000	1.200	+0.07950
H(17C)	0.941	1.200	0.000	1.200	+0.05900
H(17A)	0.940	1.200	0.000	1.200	+0.06020
H(17B)	0.945	1.200	0.000	1.200	+0.05480
H(19A)	0.926	1.200	0.000	1.200	+0.07440
H(19B)	0.920	1.200	0.000	1.200	+0.08000
H(19C)	0.948	1.200	0.000	1.200	+0.05220
H(10A)	0.914	1.200	0.000	1.200	+0.08580
H(11A)	0.929	1.200	0.000	1.200	+0.07080
H(12A)	0.911	1.200	0.000	1.200	+0.08860
H(13A)	0.968	1.200	0.000	1.200	+0.03190
H(14A)	0.924	1.200	0.000	1.200	+0.07620
H(15A)	0.917	1.200	0.000	1.200	+0.08320
H(16F)	0.904	1.200	0.000	1.200	+0.09640
H(16E)	0.888	1.200	0.000	1.200	+0.11160
H(16D)	0.920	1.200	0.000	1.200	+0.07970
H(17E)	0.952	1.200	0.000	1.200	+0.04820
H(17F)	0.951	1.200	0.000	1.200	+0.04890
H(17D)	0.913	1.200	0.000	1.200	+0.08670
H(19E)	0.928	1.200	0.000	1.200	+0.07160
H(19D)	0.898	1.200	0.000	1.200	+0.10150
H(19F)	0.939	1.200	0.000	1.200	+0.06150
H(10B)	0.908	1.200	0.000	1.200	+0.09180
H(11B)	0.901	1.200	0.000	1.200	+0.09880
H(12B)	0.901	1.200	0.000	1.200	+0.09890
H(13B)	0.944	1.200	0.000	1.200	+0.05650
H(14B)	0.920	1.200	0.000	1.200	+0.07970
H(15B)	0.914	1.200	0.000	1.200	+0.08550
H(16I)	0.903	1.200	0.000	1.200	+0.09670
H(16H)	0.921	1.200	0.000	1.200	+0.07880
H(16G)	0.926	1.200	0.000	1.200	+0.07370
H(17G)	0.935	1.200	0.000	1.200	+0.06540
H(17H)	0.935	1.200	0.000	1.200	+0.06520
H(17I)	0.953	1.200	0.000	1.200	+0.04750
H(19I)	0.924	1.200	0.000	1.200	+0.07640
H(19G)	0.931	1.200	0.000	1.200	+0.06880
H(19H)	0.931	1.200	0.000	1.200	+0.06910
H(10C)	0.890	1.200	0.000	1.200	+0.11010
H(11C)	0.928	1.200	0.000	1.200	+0.07200
H(12C)	0.925	1.200	0.000	1.200	+0.07530
H(13C)	0.917	1.200	0.000	1.200	+0.08250
H(14C)	0.955	1.200	0.000	1.200	+0.04500
H(15C)	0.914	1.200	0.000	1.200	+0.08550
H(16L)	0.936	1.200	0.000	1.200	+0.06360
H(16K)	0.922	1.200	0.000	1.200	+0.07790
H(16J)	0.924	1.200	0.000	1.200	+0.07640
H(17L)	0.915	1.200	0.000	1.200	+0.08490
H(17J)	0.905	1.200	0.000	1.200	+0.09520
H(17K)	0.902	1.200	0.000	1.200	+0.09820
H(19K)	0.892	1.200	0.000	1.200	+0.10790
H(19L)	0.946	1.200	0.000	1.200	+0.05430
H(19J)	0.918	1.200	0.000	1.200	+0.08170

Table S5. Dipole Population Parameters.

Atom	D11+	D11-	D10	Kappa'
S(18)	0.025(14)	-0.029(14)	-0.076(14)	0.984
S(18A)	-0.030(14)	0.000(14)	-0.059(14)	0.984
S(18B)	-0.029(14)	-0.015(14)	-0.065(14)	0.984
S(18C)	-0.025(14)	-0.055(14)	-0.065(14)	0.984
O(1)	-0.022(7)	-0.029(7)	-0.029(7)	1.016
O(8)	0.028(8)	-0.017(8)	-0.069(8)	0.985
O(1A)	0.008(7)	-0.059(7)	-0.039(7)	1.016
O(8A)	0.048(8)	-0.027(8)	-0.052(8)	0.985
O(1B)	-0.004(7)	-0.048(7)	-0.048(7)	1.016
O(8B)	-0.062(8)	0.016(8)	-0.100(8)	0.985
O(1C)	-0.013(7)	-0.052(7)	-0.027(7)	1.016
O(8C)	-0.034(8)	-0.022(8)	-0.058(8)	0.985
N(2)	0.012(8)	-0.134(9)	-0.085(9)	1.006
N(3)	0.002(9)	0.027(10)	-0.001(10)	0.947
N(6)	0.017(9)	-0.092(9)	-0.059(10)	0.990
N(2A)	0.005(8)	-0.125(9)	-0.060(9)	1.006
N(3A)	-0.012(9)	0.026(10)	-0.014(10)	0.947
N(6A)	0.028(9)	-0.094(9)	-0.085(10)	0.990
N(2B)	0.001(8)	-0.129(9)	-0.090(9)	1.006
N(3B)	-0.004(9)	0.045(10)	-0.021(10)	0.947
N(6B)	-0.012(9)	-0.089(9)	-0.096(10)	0.990
N(2C)	0.017(9)	-0.104(9)	-0.125(9)	1.006
N(3C)	-0.016(9)	0.022(11)	-0.021(10)	0.947
N(6C)	-0.005(9)	-0.097(10)	-0.079(10)	0.990
C(4)	0.018(12)	-0.009(12)	0.004(12)	0.988
C(5)	0.011(12)	-0.082(13)	0.026(14)	0.959
C(7)	-0.039(12)	0.010(13)	0.121(13)	0.962
C(9)	0.007(12)	0.024(13)	0.013(14)	0.977
C(10)	-0.047(12)	-0.021(14)	-0.040(14)	0.990
C(11)	-0.039(13)	-0.045(15)	-0.045(14)	0.990
C(12)	-0.028(13)	0.059(15)	-0.033(14)	0.990
C(13)	0.022(13)	-0.062(15)	-0.110(14)	0.990
C(14)	0.013(12)	-0.001(14)	-0.090(14)	0.990
C(15)	-0.001(13)	-0.098(12)	0.077(13)	0.976
C(16)	0.022(13)	0.042(14)	0.056(14)	0.969
C(17)	0.014(13)	0.034(14)	0.003(14)	0.969
C(19)	-0.109(13)	-0.105(13)	0.018(13)	1.016
C(4A)	0.006(11)	0.029(12)	-0.037(12)	0.988
C(5A)	0.011(12)	-0.057(13)	0.038(13)	0.959
C(7A)	-0.036(12)	0.032(13)	0.108(13)	0.962
C(9A)	-0.006(12)	0.019(13)	0.059(14)	0.977
C(10A)	-0.018(13)	0.009(14)	-0.024(14)	0.990
C(11A)	-0.030(13)	-0.006(14)	-0.022(14)	0.990
C(12A)	-0.009(13)	0.009(15)	-0.045(14)	0.990
C(13A)	-0.001(13)	-0.062(15)	-0.082(14)	0.990
C(14A)	-0.016(12)	0.021(14)	-0.100(14)	0.990
C(15A)	-0.034(13)	-0.102(12)	0.066(13)	0.976
C(16A)	-0.033(14)	-0.029(13)	0.048(14)	0.969
C(17A)	0.009(13)	0.043(14)	-0.016(13)	0.969
C(19A)	0.084(12)	-0.036(12)	-0.043(13)	1.016
C(4B)	-0.042(11)	0.013(12)	-0.033(13)	0.988
C(5B)	0.009(12)	-0.066(13)	0.063(13)	0.959
C(7B)	0.030(12)	0.016(13)	0.123(13)	0.962
C(9B)	0.007(12)	0.022(13)	0.025(14)	0.977
C(10B)	0.001(12)	0.016(14)	-0.048(14)	0.990
C(11B)	0.002(13)	-0.035(14)	-0.060(14)	0.990
C(12B)	-0.008(13)	0.021(15)	-0.079(14)	0.990
C(13B)	0.011(13)	0.006(14)	-0.056(14)	0.990
C(14B)	-0.013(12)	0.006(14)	-0.025(14)	0.990
C(15B)	-0.005(13)	-0.097(13)	0.038(13)	0.976
C(16B)	-0.053(14)	0.057(14)	-0.015(14)	0.969
C(17B)	0.025(14)	-0.011(14)	-0.041(14)	0.969
C(19B)	0.008(11)	0.036(13)	0.033(12)	1.016
C(4C)	-0.010(11)	0.031(13)	-0.055(13)	0.988
C(5C)	0.028(12)	-0.043(13)	0.044(14)	0.959
C(7C)	0.013(12)	-0.002(13)	0.114(13)	0.962
C(9C)	0.000(12)	0.021(14)	0.017(14)	0.977
C(10C)	0.018(12)	-0.013(14)	-0.044(14)	0.990
C(11C)	0.013(13)	-0.020(15)	-0.053(15)	0.990
C(12C)	0.009(13)	0.015(16)	-0.068(15)	0.990
C(13C)	-0.009(13)	-0.009(15)	-0.070(15)	0.990
C(14C)	-0.002(13)	0.009(14)	-0.050(14)	0.990
C(15C)	-0.011(13)	-0.091(13)	0.051(13)	0.976
C(16C)	0.025(13)	0.073(14)	0.005(14)	0.969

C(17C)	-0.005(13)	0.048(14)	0.011(14)	0.969
C(19C)	0.022(12)	0.106(13)	0.006(13)	1.016
H(10)	0.000	0.000	0.147(15)	1.200
H(11)	0.000	0.000	0.153(14)	1.200
H(12)	0.000	0.000	0.156(15)	1.200
H(13)	0.000	0.000	0.144(15)	1.200
H(14)	0.000	0.000	0.165(15)	1.200
H(15)	0.000	0.000	0.111(14)	1.200
H(16C)	0.000	0.000	0.109(15)	1.200
H(16B)	0.000	0.000	0.138(14)	1.200
H(16A)	0.000	0.000	0.159(15)	1.200
H(17C)	0.000	0.000	0.153(15)	1.200
H(17A)	0.000	0.000	0.146(15)	1.200
H(17B)	0.000	0.000	0.131(16)	1.200
H(19A)	0.000	0.000	0.146(17)	1.200
H(19B)	0.000	0.000	0.190(16)	1.200
H(19C)	0.000	0.000	0.218(19)	1.200
H(10A)	0.000	0.000	0.137(14)	1.200
H(11A)	0.000	0.000	0.165(14)	1.200
H(12A)	0.000	0.000	0.154(15)	1.200
H(13A)	0.000	0.000	0.163(16)	1.200
H(14A)	0.000	0.000	0.159(14)	1.200
H(15A)	0.000	0.000	0.118(14)	1.200
H(16F)	0.000	0.000	0.146(14)	1.200
H(16E)	0.000	0.000	0.105(15)	1.200
H(16D)	0.000	0.000	0.147(15)	1.200
H(17E)	0.000	0.000	0.158(16)	1.200
H(17F)	0.000	0.000	0.142(15)	1.200
H(17D)	0.000	0.000	0.146(15)	1.200
H(19E)	0.000	0.000	0.175(16)	1.200
H(19D)	0.000	0.000	0.165(16)	1.200
H(19F)	0.000	0.000	0.182(16)	1.200
H(10B)	0.000	0.000	0.156(14)	1.200
H(11B)	0.000	0.000	0.152(14)	1.200
H(12B)	0.000	0.000	0.159(14)	1.200
H(13B)	0.000	0.000	0.146(16)	1.200
H(14B)	0.000	0.000	0.141(14)	1.200
H(15B)	0.000	0.000	0.117(14)	1.200
H(16I)	0.000	0.000	0.117(15)	1.200
H(16H)	0.000	0.000	0.123(15)	1.200
H(16G)	0.000	0.000	0.170(15)	1.200
H(17G)	0.000	0.000	0.175(16)	1.200
H(17H)	0.000	0.000	0.141(16)	1.200
H(17I)	0.000	0.000	0.160(16)	1.200
H(19I)	0.000	0.000	0.145(15)	1.200
H(19G)	0.000	0.000	0.154(16)	1.200
H(19H)	0.000	0.000	0.184(16)	1.200
H(10C)	0.000	0.000	0.154(15)	1.200
H(11C)	0.000	0.000	0.167(15)	1.200
H(12C)	0.000	0.000	0.200(16)	1.200
H(13C)	0.000	0.000	0.165(15)	1.200
H(14C)	0.000	0.000	0.146(15)	1.200
H(15C)	0.000	0.000	0.092(14)	1.200
H(16L)	0.000	0.000	0.130(15)	1.200
H(16K)	0.000	0.000	0.123(15)	1.200
H(16J)	0.000	0.000	0.166(16)	1.200
H(17L)	0.000	0.000	0.136(15)	1.200
H(17J)	0.000	0.000	0.153(15)	1.200
H(17K)	0.000	0.000	0.124(15)	1.200
H(19K)	0.000	0.000	0.188(15)	1.200
H(19L)	0.000	0.000	0.208(17)	1.200
H(19J)	0.000	0.000	0.157(17)	1.200

Table S6. Quadrupole Population Parameters.

Atom	Q20	Q21+	Q21-	Q22+	Q22-	Kappa'
S(18)	-0.104(14)	0.012(13)	0.002(13)	0.128(14)	-0.005(13)	0.984
S(18A)	-0.155(14)	0.010(14)	0.021(13)	0.125(13)	-0.017(13)	0.984
S(18B)	-0.156(15)	-0.004(14)	-0.013(13)	0.098(14)	0.038(13)	0.984
S(18C)	-0.111(14)	-0.030(14)	-0.018(13)	0.107(14)	0.037(14)	0.984
O(1)	0.020(9)	0.026(8)	0.108(8)	0.021(8)	-0.007(8)	1.016
O(8)	-0.027(9)	-0.020(10)	-0.002(9)	-0.100(9)	0.027(9)	0.985
O(1A)	-0.022(9)	0.015(8)	0.046(8)	0.027(8)	0.011(8)	1.016

O(8A)	-0.009(9)	0.012(10)	-0.004(9)	-0.113(9)	0.022(9)	0.985
O(1B)	-0.003(9)	-0.014(8)	0.050(8)	0.015(8)	0.002(8)	1.016
O(8B)	-0.039(9)	-0.013(10)	-0.023(9)	-0.112(9)	-0.032(9)	0.985
O(1C)	-0.015(9)	-0.044(8)	0.052(9)	0.013(9)	-0.006(8)	1.016
O(8C)	-0.017(9)	-0.005(10)	-0.011(10)	-0.117(10)	-0.018(10)	0.985
N(2)	0.016(10)	-0.017(10)	0.088(10)	0.001(10)	-0.010(9)	1.006
N(3)	0.045(11)	-0.022(10)	0.003(11)	-0.103(10)	0.018(10)	0.947
N(6)	-0.002(11)	0.010(10)	0.012(10)	-0.076(10)	-0.006(10)	0.990
N(2A)	0.016(10)	-0.013(10)	0.079(10)	0.000(9)	0.009(9)	1.006
N(3A)	0.011(11)	-0.009(10)	0.019(11)	-0.122(10)	0.008(10)	0.947
N(6A)	0.000(11)	0.016(10)	0.032(10)	-0.077(10)	-0.019(10)	0.990
N(2B)	0.025(11)	0.007(10)	0.086(10)	-0.006(10)	0.002(9)	1.006
N(3B)	0.019(11)	0.002(10)	-0.003(11)	-0.119(10)	-0.005(10)	0.947
N(6B)	0.004(11)	0.012(10)	0.014(11)	-0.077(10)	0.014(10)	0.990
N(2C)	0.022(10)	0.035(10)	0.116(10)	0.006(10)	-0.012(10)	1.006
N(3C)	0.053(11)	0.024(10)	-0.003(11)	-0.126(10)	0.000(10)	0.947
N(6C)	0.010(11)	0.016(11)	0.033(11)	-0.068(10)	0.016(10)	0.990
C(4)	0.023(13)	-0.044(12)	0.076(13)	-0.112(12)	-0.020(12)	0.988
C(5)	0.225(14)	0.040(13)	0.130(13)	-0.114(12)	0.027(12)	0.959
C(7)	0.235(14)	-0.022(13)	-0.003(14)	-0.197(13)	-0.017(12)	0.962
C(9)	0.091(14)	0.010(13)	-0.024(14)	-0.150(12)	-0.003(12)	0.977
C(10)	0.092(14)	0.005(12)	0.008(14)	-0.163(13)	0.041(13)	0.990
C(11)	0.049(14)	0.003(13)	0.019(14)	-0.172(14)	-0.020(14)	0.990
C(12)	0.100(15)	-0.017(13)	-0.045(15)	-0.143(14)	-0.014(15)	0.990
C(13)	0.031(15)	-0.023(13)	0.032(15)	-0.175(14)	-0.036(14)	0.990
C(14)	0.069(14)	0.011(12)	0.013(14)	-0.157(13)	-0.027(13)	0.990
C(15)	0.033(13)	0.000(13)	0.049(12)	0.107(13)	-0.037(13)	0.976
C(16)	-0.014(14)	0.021(13)	0.012(13)	-0.003(13)	0.014(13)	0.969
C(17)	0.050(14)	-0.006(13)	0.037(13)	0.012(13)	0.004(13)	0.969
C(19)	0.031(13)	0.011(12)	-0.039(12)	-0.027(13)	0.020(13)	1.016
C(4A)	0.002(13)	-0.026(12)	0.074(13)	-0.108(12)	-0.012(12)	0.988
C(5A)	0.246(14)	0.047(13)	0.072(13)	-0.109(12)	0.032(12)	0.959
C(7A)	0.237(14)	-0.003(13)	-0.011(14)	-0.207(12)	-0.019(12)	0.962
C(9A)	0.109(14)	-0.022(13)	0.002(14)	-0.167(12)	-0.013(12)	0.977
C(10A)	0.067(14)	-0.017(12)	-0.024(14)	-0.199(13)	-0.002(13)	0.990
C(11A)	0.042(14)	0.025(13)	-0.003(15)	-0.158(14)	-0.019(14)	0.990
C(12A)	0.072(15)	0.004(13)	-0.016(15)	-0.174(14)	0.019(15)	0.990
C(13A)	0.035(15)	0.015(13)	-0.001(15)	-0.178(14)	-0.003(14)	0.990
C(14A)	0.077(14)	0.012(12)	-0.010(14)	-0.167(13)	-0.003(13)	0.990
C(15A)	0.036(13)	0.020(13)	0.070(12)	0.113(13)	-0.007(13)	0.976
C(16A)	-0.003(14)	-0.017(13)	0.025(13)	0.016(13)	0.003(13)	0.969
C(17A)	0.011(14)	-0.002(13)	0.010(13)	0.029(13)	-0.018(13)	0.969
C(19A)	0.021(13)	0.003(12)	-0.024(12)	-0.011(12)	-0.030(12)	1.016
C(4B)	-0.010(13)	0.033(12)	0.104(13)	-0.114(12)	0.005(12)	0.988
C(5B)	0.216(14)	-0.014(13)	0.086(14)	-0.114(12)	-0.001(12)	0.959
C(7B)	0.271(14)	-0.017(13)	0.021(14)	-0.184(12)	0.049(12)	0.962
C(9B)	0.099(14)	-0.015(13)	-0.020(14)	-0.146(12)	-0.007(12)	0.977
C(10B)	0.062(14)	0.003(12)	0.014(13)	-0.182(13)	-0.043(13)	0.990
C(11B)	0.085(14)	0.013(13)	0.002(14)	-0.141(14)	-0.027(14)	0.990
C(12B)	0.069(14)	0.021(13)	0.020(14)	-0.158(14)	-0.001(14)	0.990
C(13B)	0.061(14)	-0.004(13)	0.032(14)	-0.189(14)	0.007(14)	0.990
C(14B)	0.074(14)	-0.020(12)	-0.021(13)	-0.170(13)	0.005(13)	0.990
C(15B)	0.041(14)	-0.016(13)	0.079(13)	0.100(13)	0.029(13)	0.976
C(16B)	-0.033(14)	0.025(13)	0.004(13)	-0.017(14)	-0.011(14)	0.969
C(17B)	-0.009(14)	-0.004(13)	-0.024(13)	-0.014(14)	0.042(14)	0.969
C(19B)	0.006(13)	-0.031(11)	-0.002(12)	-0.010(12)	-0.027(12)	1.016
C(4C)	-0.015(13)	0.032(12)	0.066(13)	-0.102(12)	0.027(12)	0.988
C(5C)	0.261(14)	-0.026(13)	0.021(14)	-0.103(12)	-0.022(12)	0.959
C(7C)	0.242(14)	0.008(13)	0.002(14)	-0.203(13)	0.018(13)	0.962
C(9C)	0.125(14)	0.001(13)	-0.010(14)	-0.141(13)	-0.007(13)	0.977
C(10C)	0.072(14)	-0.030(13)	-0.026(14)	-0.173(13)	0.002(14)	0.990
C(11C)	0.059(15)	0.003(13)	0.008(15)	-0.152(14)	-0.015(15)	0.990
C(12C)	0.067(15)	-0.017(13)	0.014(16)	-0.182(15)	-0.002(16)	0.990
C(13C)	0.039(15)	0.014(13)	-0.024(16)	-0.172(15)	0.027(15)	0.990
C(14C)	0.076(15)	-0.003(13)	-0.001(15)	-0.170(13)	0.008(14)	0.990
C(15C)	0.045(14)	0.001(13)	0.053(13)	0.140(13)	0.032(13)	0.976
C(16C)	-0.007(14)	-0.019(13)	-0.022(13)	-0.055(14)	0.032(13)	0.969
C(17C)	0.042(14)	0.003(13)	0.025(13)	0.000(13)	-0.002(13)	0.969
C(19C)	0.025(13)	0.052(12)	-0.013(12)	0.002(13)	0.034(13)	1.016
H(10)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(11)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(12)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(13)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(14)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(15)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16C)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16B)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16A)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17C)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200

H(17A)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17B)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19A)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19B)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19C)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(10A)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(11A)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(12A)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(13A)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(14A)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(15A)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16F)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16E)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16D)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17E)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17F)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17D)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19E)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19D)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19F)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(10B)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(11B)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(12B)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(13B)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(14B)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(15B)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16I)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16H)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16G)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17G)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17H)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17I)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19I)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19G)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19H)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(10C)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(11C)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(12C)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(13C)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(14C)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(15C)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16L)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16K)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(16J)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17L)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17J)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(17K)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19K)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19L)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200
H(19J)	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	1.200

Table S7. Octupole Population Parameters.

Atom	O30	O31+	O31-	O32+	O32-	O33+	O33-	Kappa'
S(18)	0.137(15)	-0.024(14)	-0.066(14)	0.061(14)	0.042(14)	0.031(14)	-0.100(14)	0.984
S(18A)	0.140(15)	-0.006(14)	-0.070(14)	0.065(14)	0.003(14)	0.014(14)	-0.077(14)	0.984
S(18B)	0.148(15)	-0.006(14)	-0.055(14)	0.050(14)	-0.004(14)	-0.004(14)	-0.081(14)	0.984
S(18C)	0.134(15)	0.031(14)	-0.051(14)	0.073(14)	-0.015(14)	-0.015(14)	-0.077(14)	0.984
O(1)	0.073(11)	0.004(11)	-0.038(11)	0.025(11)	-0.005(11)	0.008(11)	-0.036(11)	1.016
O(8)	0.009(13)	-0.028(13)	0.015(12)	0.039(13)	-0.029(13)	0.017(12)	-0.006(12)	0.985
O(1A)	0.083(11)	-0.006(11)	-0.026(12)	0.046(11)	0.002(11)	-0.007(11)	-0.036(11)	1.016
O(8A)	-0.003(13)	-0.034(13)	-0.005(13)	0.018(13)	-0.022(13)	0.033(12)	-0.009(12)	0.985
O(1B)	0.086(12)	-0.003(11)	-0.037(12)	0.046(11)	-0.004(11)	0.002(11)	-0.038(11)	1.016
O(8B)	0.015(13)	0.025(13)	0.006(12)	0.039(13)	0.032(13)	-0.031(12)	0.010(12)	0.985
O(1C)	0.072(12)	-0.005(11)	-0.031(12)	0.050(11)	0.005(11)	0.012(11)	-0.039(11)	1.016
O(8C)	-0.018(13)	0.036(13)	0.009(13)	0.040(13)	0.006(13)	0.001(13)	-0.024(13)	0.985
N(2)	0.128(14)	-0.002(13)	-0.048(14)	0.065(13)	-0.009(13)	0.016(12)	-0.081(12)	1.006
N(3)	0.204(14)	0.017(14)	0.036(16)	0.165(13)	-0.016(14)	-0.005(13)	0.019(13)	0.947
N(6)	0.088(14)	0.000(14)	0.008(15)	0.043(13)	0.011(14)	0.012(13)	-0.014(13)	0.990
N(2A)	0.121(14)	0.015(13)	-0.059(14)	0.052(13)	-0.014(13)	-0.002(12)	-0.078(12)	1.006
N(3A)	0.215(14)	0.012(14)	0.012(16)	0.170(13)	0.006(14)	-0.001(13)	0.032(13)	0.947
N(6A)	0.096(14)	0.011(14)	0.018(15)	0.027(13)	0.015(14)	0.010(13)	-0.029(12)	0.990

N(2B)	0.125(14)	-0.006(13)	-0.061(14)	0.063(13)	0.018(13)	0.001(12)	-0.076(12)	1.006
N(3B)	0.197(15)	-0.001(14)	0.042(16)	0.182(14)	-0.011(14)	0.010(13)	0.007(13)	0.947
N(6B)	0.096(14)	0.020(14)	-0.005(15)	0.042(13)	-0.013(14)	-0.010(12)	-0.021(12)	0.990
N(2C)	0.131(14)	0.011(13)	-0.003(14)	0.091(13)	0.013(13)	-0.010(13)	-0.057(13)	1.006
N(3C)	0.228(15)	0.001(14)	0.012(16)	0.164(14)	0.025(14)	0.015(14)	0.042(13)	0.947
N(6C)	0.069(14)	0.012(14)	0.025(15)	0.053(13)	-0.001(14)	-0.002(13)	-0.021(12)	0.990
C(4)	0.183(17)	-0.018(16)	-0.048(18)	0.141(16)	0.014(16)	0.027(16)	0.006(15)	0.988
C(5)	0.321(18)	0.001(17)	0.037(20)	0.229(17)	-0.024(17)	0.009(16)	-0.024(15)	0.959
C(7)	0.325(18)	-0.009(18)	0.028(21)	0.210(17)	0.007(18)	0.021(16)	0.000(16)	0.962
C(9)	0.217(17)	0.034(17)	-0.026(21)	0.192(17)	0.007(18)	0.002(16)	0.035(16)	0.977
C(10)	0.175(17)	0.025(16)	-0.003(19)	0.141(16)	-0.010(18)	-0.003(17)	0.012(17)	0.990
C(11)	0.221(18)	0.006(16)	-0.047(20)	0.163(17)	0.014(19)	0.004(19)	-0.021(18)	0.990
C(12)	0.192(18)	-0.015(16)	0.063(20)	0.119(17)	0.021(19)	0.008(19)	-0.020(18)	0.990
C(13)	0.214(18)	-0.014(17)	-0.013(20)	0.165(17)	0.021(19)	-0.028(19)	0.021(18)	0.990
C(14)	0.215(17)	-0.025(16)	0.046(19)	0.151(16)	0.012(18)	-0.012(18)	-0.010(17)	0.990
C(15)	0.215(17)	0.041(17)	-0.020(16)	-0.004(17)	0.015(17)	0.001(18)	-0.217(17)	0.976
C(16)	0.138(18)	0.053(17)	0.010(17)	-0.003(17)	-0.040(17)	-0.012(17)	-0.174(16)	0.969
C(17)	0.175(18)	0.023(17)	0.019(17)	-0.056(17)	0.089(17)	-0.018(17)	-0.164(16)	0.969
C(19)	0.088(17)	-0.058(16)	0.042(16)	-0.044(17)	0.137(16)	0.032(17)	-0.130(17)	1.016
C(4A)	0.176(17)	0.000(16)	-0.082(18)	0.131(16)	0.011(16)	0.002(15)	-0.027(15)	0.988
C(5A)	0.312(18)	0.034(17)	0.060(20)	0.233(16)	-0.001(18)	-0.001(15)	-0.031(15)	0.959
C(7A)	0.320(17)	0.007(18)	0.012(21)	0.227(17)	-0.003(18)	0.028(16)	0.007(16)	0.962
C(9A)	0.222(17)	-0.002(17)	-0.008(21)	0.202(17)	0.007(18)	0.004(16)	0.033(16)	0.977
C(10A)	0.176(17)	-0.001(16)	0.017(19)	0.154(16)	0.020(18)	-0.009(18)	0.001(17)	0.990
C(11A)	0.182(18)	0.015(17)	-0.036(20)	0.168(17)	0.009(19)	-0.011(19)	-0.043(18)	0.990
C(12A)	0.199(18)	0.008(16)	0.032(21)	0.118(17)	0.019(19)	0.023(19)	-0.028(19)	0.990
C(13A)	0.194(18)	0.006(17)	-0.041(20)	0.150(17)	0.000(19)	-0.003(19)	0.005(18)	0.990
C(14A)	0.170(17)	0.013(16)	0.085(19)	0.158(16)	0.011(18)	0.029(18)	0.009(17)	0.990
C(15A)	0.232(17)	0.037(17)	-0.038(16)	-0.039(17)	0.009(17)	-0.020(18)	-0.209(16)	0.976
C(16A)	0.169(18)	-0.010(17)	0.027(17)	-0.042(17)	0.027(17)	-0.040(16)	-0.184(16)	0.969
C(17A)	0.124(17)	0.066(16)	-0.028(16)	-0.070(17)	-0.036(17)	-0.021(17)	-0.121(17)	0.969
C(19A)	0.059(17)	0.087(16)	-0.033(16)	-0.034(16)	-0.078(16)	0.043(15)	-0.128(15)	1.016
C(4B)	0.171(17)	0.004(16)	-0.081(19)	0.153(16)	0.002(16)	0.017(16)	-0.055(15)	0.988
C(5B)	0.322(18)	-0.001(17)	0.058(21)	0.247(17)	0.033(18)	-0.026(15)	-0.007(15)	0.959
C(7B)	0.325(17)	0.004(17)	0.003(21)	0.220(17)	-0.017(18)	0.000(16)	0.006(16)	0.962
C(9B)	0.230(17)	0.001(17)	-0.056(21)	0.194(16)	0.031(18)	0.015(16)	0.016(16)	0.977
C(10B)	0.156(17)	-0.007(16)	-0.073(18)	0.147(16)	0.016(17)	-0.016(17)	-0.009(17)	0.990
C(11B)	0.173(18)	0.015(16)	-0.074(19)	0.138(17)	-0.010(19)	-0.010(19)	-0.021(18)	0.990
C(12B)	0.214(18)	0.024(16)	0.032(20)	0.128(17)	0.002(19)	0.010(19)	0.007(18)	0.990
C(13B)	0.214(18)	0.014(17)	-0.006(19)	0.149(17)	-0.018(18)	0.038(19)	-0.016(18)	0.990
C(14B)	0.198(17)	-0.008(16)	0.070(19	0.144(1	-0.028(1	-0.003(1	0.025(17)	0.990
C(15B)	0.239(17)	-0.068(17)	-0.004(17)	0.005(18)	-0.025(18)	0.014(18)	-0.210(17)	0.976
C(16B)	0.113(18)	0.010(17)	-0.004(17)	-0.068(18)	0.083(17)	0.033(17)	-0.162(17)	0.969
C(17B)	0.152(18)	-0.023(17)	0.045(17)	0.005(17)	-0.096(18)	-0.019(18)	-0.148(17)	0.969
C(19B)	0.135(16)	0.035(15)	0.020(16)	-0.054(15)	-0.047(15)	-0.012(15)	-0.115(15)	1.016
C(4C)	0.166(17)	-0.009(16)	-0.102(19)	0.140(17)	-0.009(16)	-0.012(16)	-0.017(15)	0.988
C(5C)	0.276(18)	0.010(18)	0.034(21)	0.217(17)	0.022(18)	-0.016(16)	-0.005(16)	0.959
C(7C)	0.367(18)	-0.024(18)	-0.029(21)	0.246(17)	-0.035(18)	0.007(17)	0.006(16)	0.962
C(9C)	0.192(18)	-0.001(17)	-0.028(22)	0.171(17)	0.027(18)	0.008(17)	0.016(16)	0.977
C(10C)	0.210(18)	-0.032(16)	-0.012(20)	0.172(17)	0.002(18)	0.013(18)	-0.015(17)	0.990
C(11C)	0.200(19)	-0.019(17)	0.043(21)	0.161(18)	-0.003(20)	0.026(20)	-0.042(19)	0.990
C(12C)	0.219(19)	-0.007(17)	0.007(22)	0.153(18)	0.006(20)	0.007(20)	0.039(20)	0.990
C(13C)	0.164(19)	-0.003(17)	-0.020(22)	0.127(18)	-0.010(20)	0.003(20)	0.009(19)	0.990
C(14C)	0.211(18)	0.034(17)	0.042(20)	0.151(17)	-0.001(18)	-0.014(18)	0.004(17)	0.990
C(15C)	0.231(17)	0.015(17)	-0.017(17)	-0.048(18)	0.015(18)	-0.003(19)	-0.199(17)	0.976
C(16C)	0.150(18)	-0.005(17)	0.035(17)	-0.017(18)	-0.071(18)	0.009(17)	-0.144(17)	0.969
C(17C)	0.108(18)	-0.012(17)	0.055(17)	-0.045(17)	-0.072(17)	0.030(17)	-0.160(16)	0.969
C(19C)	0.104(17)	-0.038(15)	0.014(16)	-0.052(16)	0.114(16)	-0.041(17)	-0.112(17)	1.016

```
loop_
_atom_local_axes_atom_label
_atom_local_axes_atom0
_atom_local_axes_ax1
_atom_local_axes_atom1
_atom_local_axes_atom2
_atom_local_axes_ax2
S(18)      C(4)       Z          S(18)      C(19)      Y
S(18A)     C(4A)      Z          S(18A)     C(19A)     Y
S(18B)     C(4B)      Z          S(18B)     C(19B)     Y
S(18C)     C(4C)      Z          S(18C)     C(19C)     Y
O(1)       C(5)       Z          O(1)       N(2)       Y
O(8)       C(7)       Z          O(8)       N(6)       Y
O(1A)      C(5A)      Z          O(1A)      N(2A)      Y
O(8A)      C(7A)      Z          O(8A)      N(6A)      Y
O(1B)      C(5B)      Z          O(1B)      N(2B)      Y
O(8B)      C(7B)      Z          O(8B)      N(6B)      Y
O(1C)      C(5C)      Z          O(1C)      N(2C)      Y
O(8C)      C(7C)      Z          O(8C)      N(6C)      Y
N(2)       N(3)       Z          N(2)       O(1)       Y
N(3)       N(2)       Z          N(3)       C(4)       Y
N(6)       C(5)       Z          N(6)       C(7)       Y
N(2A)      N(3A)      Z          N(2A)      O(1A)      Y
N(3A)      N(2A)      Z          N(3A)      C(4A)      Y
N(6A)      C(5A)      Z          N(6A)      C(7A)      Y
N(2B)      N(3B)      Z          N(2B)      O(1B)      Y
N(3B)      N(2B)      Z          N(3B)      C(4B)      Y
N(6B)      C(5B)      Z          N(6B)      C(7B)      Y
N(2C)      N(3C)      Z          N(2C)      O(1C)      Y
N(3C)      N(2C)      Z          N(3C)      C(4C)      Y
N(6C)      C(5C)      Z          N(6C)      C(7C)      Y
C(4)       N(3)       Z          C(4)       C(5)       Y
C(5)       N(6)       Z          C(5)       O(1)       Y
C(7)       O(8)       Z          C(7)       N(6)       Y
C(9)       C(10)      Z          C(9)       C(14)      Y
C(10)      H(10)      Z          C(10)      C(11)      Y
C(11)      H(11)      Z          C(11)      C(12)      Y
C(12)      H(12)      Z          C(12)      C(11)      Y
C(13)      H(13)      Z          C(13)      C(14)      Y
C(14)      H(14)      Z          C(14)      C(13)      Y
C(15)      H(15)      Z          C(15)      N(3)       Y
C(16)      H(16B)     Z          C(16)      H(16C)     Y
C(17)      H(17B)     Z          C(17)      H(17C)     Y
C(19)      H(19B)     Z          C(19)      H(19C)     Y
C(4A)      N(3A)      Z          C(4A)      C(5A)      Y
C(5A)      N(6A)      Z          C(5A)      O(1A)      Y
C(7A)      O(8A)      Z          C(7A)      N(6A)      Y
C(9A)      C(10A)     Z          C(9A)      C(14A)     Y
C(10A)     H(10A)     Z          C(10A)     C(11A)     Y
C(11A)     H(11A)     Z          C(11A)     C(12A)     Y
C(12A)     H(12A)     Z          C(12A)     C(11A)     Y
C(13A)     H(13A)     Z          C(13A)     C(14A)     Y
C(14A)     H(14A)     Z          C(14A)     C(13A)     Y
C(15A)     H(15A)     Z          C(15A)     N(3A)      Y
C(16A)     H(16F)     Z          C(16A)     H(16D)     Y
C(17A)     H(17D)     Z          C(17A)     H(17F)     Y
C(19A)     H(19F)     Z          C(19A)     H(19E)     Y
C(4B)      N(3B)      Z          C(4B)      C(5B)      Y
C(5B)      N(6B)      Z          C(5B)      O(1B)      Y
C(7B)      O(8B)      Z          C(7B)      N(6B)      Y
C(9B)      C(10B)     Z          C(9B)      C(14B)     Y
C(10B)     H(10B)     Z          C(10B)     C(11B)     Y
C(11B)     H(11B)     Z          C(11B)     C(12B)     Y
C(12B)     H(12B)     Z          C(12B)     C(11B)     Y
C(13B)     H(13B)     Z          C(13B)     C(14B)     Y
C(14B)     H(14B)     Z          C(14B)     C(13B)     Y
C(15B)     H(15B)     Z          C(15B)     N(3B)      Y
C(16B)     H(16G)     Z          C(16B)     H(16H)     Y
C(17B)     H(17G)     Z          C(17B)     H(17H)     Y
C(19B)     H(19I)     Z          C(19B)     H(19G)     Y
C(4C)      N(3C)      Z          C(4C)      C(5C)      Y
C(5C)      N(6C)      Z          C(5C)      O(1C)      Y
C(7C)      O(8C)      Z          C(7C)      N(6C)      Y
C(9C)      C(10C)     Z          C(9C)      C(14C)     Y
C(10C)     H(10C)     Z          C(10C)     C(11C)     Y
C(11C)     H(11C)     Z          C(11C)     C(12C)     Y
C(12C)     H(12C)     Z          C(12C)     C(13C)     Y
C(13C)     H(13C)     Z          C(13C)     C(14C)     Y
C(14C)     H(14C)     Z          C(14C)     C(13C)     Y
```

C(15C)	H(15C)	Z	C(15C)	N(3C)	Y
C(16C)	H(16L)	Z	C(16C)	H(16K)	Y
C(17C)	H(17K)	Z	C(17C)	H(17L)	Y
C(19C)	H(19K)	Z	C(19C)	H(19J)	Y
H(10)	C(10)	Z	H(10)	C(9)	Y
H(11)	C(11)	Z	H(11)	C(12)	Y
H(12)	C(12)	Z	H(12)	C(13)	Y
H(13)	C(13)	Z	H(13)	C(14)	Y
H(14)	C(14)	Z	H(14)	C(9)	Y
H(15)	C(15)	Z	H(15)	N(3)	Y
H(16C)	C(16)	Z	H(16C)	H(16A)	Y
H(16B)	C(16)	Z	H(16B)	H(16A)	Y
H(16A)	C(16)	Z	H(16A)	H(16C)	Y
H(17C)	C(17)	Z	H(17C)	H(17A)	Y
H(17A)	C(17)	Z	H(17A)	H(17B)	Y
H(17B)	C(17)	Z	H(17B)	H(17A)	Y
H(19A)	C(19)	Z	H(19A)	H(19C)	Y
H(19B)	C(19)	Z	H(19B)	H(19A)	Y
H(19C)	C(19)	Z	H(19C)	H(19A)	Y
H(10A)	C(10A)	Z	H(10A)	C(9A)	Y
H(11A)	C(11A)	Z	H(11A)	C(12A)	Y
H(12A)	C(12A)	Z	H(12A)	C(13A)	Y
H(13A)	C(13A)	Z	H(13A)	C(14A)	Y
H(14A)	C(14A)	Z	H(14A)	C(9A)	Y
H(15A)	C(15A)	Z	H(15A)	N(3A)	Y
H(16F)	C(16A)	Z	H(16F)	H(16E)	Y
H(16E)	C(16A)	Z	H(16E)	H(16D)	Y
H(16D)	C(16A)	Z	H(16D)	H(16E)	Y
H(17E)	C(17A)	Z	H(17E)	H(17D)	Y
H(17F)	C(17A)	Z	H(17F)	H(17E)	Y
H(17D)	C(17A)	Z	H(17D)	H(17E)	Y
H(19E)	C(19A)	Z	H(19E)	H(19F)	Y
H(19D)	C(19A)	Z	H(19D)	H(19E)	Y
H(19F)	C(19A)	Z	H(19F)	H(19E)	Y
H(10B)	C(10B)	Z	H(10B)	C(11B)	Y
H(11B)	C(11B)	Z	H(11B)	C(12B)	Y
H(12B)	C(12B)	Z	H(12B)	C(13B)	Y
H(13B)	C(13B)	Z	H(13B)	C(12B)	Y
H(14B)	C(14B)	Z	H(14B)	C(9B)	Y
H(15B)	C(15B)	Z	H(15B)	N(3B)	Y
H(16I)	C(16B)	Z	H(16I)	H(16G)	Y
H(16H)	C(16B)	Z	H(16H)	H(16G)	Y
H(16G)	C(16B)	Z	H(16G)	H(16I)	Y
H(17G)	C(17B)	Z	H(17G)	H(17H)	Y
H(17H)	C(17B)	Z	H(17H)	H(17G)	Y
H(17I)	C(17B)	Z	H(17I)	H(17G)	Y
H(19I)	C(19B)	Z	H(19I)	H(19G)	Y
H(19G)	C(19B)	Z	H(19G)	H(19I)	Y
H(19H)	C(19B)	Z	H(19H)	H(19G)	Y
H(10C)	C(10C)	Z	H(10C)	C(11C)	Y
H(11C)	C(11C)	Z	H(11C)	C(10C)	Y
H(12C)	C(12C)	Z	H(12C)	C(13C)	Y
H(13C)	C(13C)	Z	H(13C)	C(14C)	Y
H(14C)	C(14C)	Z	H(14C)	C(9C)	Y
H(15C)	C(15C)	Z	H(15C)	N(3C)	Y
H(16L)	C(16C)	Z	H(16L)	H(16J)	Y
H(16K)	C(16C)	Z	H(16K)	H(16J)	Y
H(16J)	C(16C)	Z	H(16J)	H(16L)	Y
H(17L)	C(17C)	Z	H(17L)	H(17J)	Y
H(17J)	C(17C)	Z	H(17J)	H(17K)	Y
H(17K)	C(17C)	Z	H(17K)	H(17J)	Y
H(19K)	C(19C)	Z	H(19K)	H(19J)	Y
H(19L)	C(19C)	Z	H(19L)	H(19J)	Y
H(19J)	C(19C)	Z	H(19J)	H(19K)	Y

```
loop_
_atom_site_aniso_label
_atom_site_aniso_U_11
_atom_site_aniso_U_22
_atom_site_aniso_U_33
_atom_site_aniso_U_12
_atom_site_aniso_U_13
_atom_site_aniso_U_23
S(18) 0.009838 0.017449 0.01705 -0.001275 -0.001598 0.005474
S(18A) 0.010476 0.016574 0.01484 0.0014 0.002447 0.005229
S(18B) 0.011557 0.016703 0.015957 0.0018 0.003058 0.005225
S(18C) 0.01042 0.021423 0.015075 -0.000939 -0.001224 0.005261
O(1) 0.012177 0.01472 0.013791 -0.000766 -0.001848 0.002603
O(8) 0.020741 0.020292 0.01554 -0.005873 -0.002866 0.004093
O(1A) 0.012391 0.014293 0.013343 0.000826 0.002379 0.0033
O(8A) 0.021579 0.021415 0.015452 0.007069 0.004785 0.004761
O(1B) 0.013174 0.015625 0.014144 0.000377 0.002944 0.004065
O(8B) 0.020355 0.022295 0.01341 0.007197 0.003255 0.004711
O(1C) 0.013589 0.016684 0.01406 0.00014 -0.002089 0.00325
O(8C) 0.024359 0.020701 0.014602 -0.004329 -0.004774 0.002688
N(2) 0.013905 0.014981 0.015233 0.000579 -0.001122 0.004739
N(3) 0.011073 0.011725 0.013998 -0.000464 0.000252 0.003658
N(6) 0.013553 0.01183 0.017306 -0.002215 -0.002276 0.002844
N(2A) 0.013177 0.014416 0.014897 -0.000098 0.001987 0.005203
N(3A) 0.011074 0.011409 0.013025 0.000519 0.000486 0.003857
N(6A) 0.013654 0.012054 0.016442 0.002488 0.003473 0.003718
N(2B) 0.015042 0.016001 0.01667 -0.000083 0.002618 0.006781
N(3B) 0.012062 0.012348 0.014955 0.000689 0.000445 0.004891
N(6B) 0.013779 0.012089 0.014924 0.002073 0.002895 0.002824
N(2C) 0.013709 0.017421 0.015948 0.00186 -0.001082 0.005339
N(3C) 0.011316 0.014118 0.013854 0.001005 0.000917 0.003443
N(6C) 0.014687 0.014313 0.015063 -0.00163 -0.002711 0.003091
C(4) 0.010272 0.011886 0.014916 -0.000997 -0.001364 0.003488
C(5) 0.010428 0.011214 0.014086 -0.00071 -0.000068 0.002071
C(7) 0.011859 0.013042 0.014162 -0.001533 -0.000088 0.001893
C(9) 0.01172 0.011848 0.015166 -0.001399 0.000574 0.00166
C(10) 0.018777 0.015914 0.015117 -0.003132 0.00005 0.00264
C(11) 0.023472 0.019703 0.018648 -0.001992 0.002423 0.006336
C(12) 0.019903 0.017012 0.02718 -0.001952 0.003114 0.008686
C(13) 0.018524 0.015678 0.028163 -0.005368 -0.002867 0.006747
C(14) 0.016562 0.013964 0.019959 -0.00394 -0.003149 0.002679
C(15) 0.014081 0.012436 0.020807 -0.001196 0.000524 0.004826
C(16) 0.023079 0.016868 0.029433 0.000151 0.000533 0.011634
C(17) 0.023957 0.014779 0.021205 -0.001181 0.000431 -0.000618
C(19) 0.018551 0.038166 0.023631 -0.000484 0.001403 0.01702
C(4A) 0.010082 0.012021 0.013118 0.001005 0.001793 0.003583
C(5A) 0.010475 0.011434 0.012774 0.000625 0.000974 0.002689
C(7A) 0.011817 0.013535 0.014031 0.002048 0.001321 0.002337
C(9A) 0.012062 0.012183 0.015251 0.00166 0.000251 0.002044
C(10A) 0.018781 0.016749 0.015651 0.004083 0.000585 0.003916
C(11A) 0.023718 0.020658 0.019985 0.003607 -0.001254 0.007555
C(12A) 0.020169 0.016799 0.02739 0.00265 -0.003073 0.007976
C(13A) 0.018957 0.014287 0.028079 0.005202 0.001524 0.005177
C(14A) 0.016764 0.013951 0.020416 0.004016 0.002962 0.002472
C(15A) 0.014104 0.012311 0.018623 0.001243 0.000387 0.004687
C(16A) 0.022304 0.016389 0.026596 0.001276 0.001131 0.010997
C(17A) 0.024711 0.014939 0.019581 0.001016 -0.000383 -0.00043
C(19A) 0.01988 0.030719 0.018572 0.00125 -0.000198 0.011999
C(4B) 0.010574 0.012789 0.01359 0.000968 0.001631 0.003948
C(5B) 0.010624 0.012541 0.012265 0.000657 0.00081 0.002612
C(7B) 0.011875 0.013953 0.011987 0.001731 0.000767 0.001914
C(9B) 0.011949 0.012989 0.012624 0.001546 0.000548 0.001512
C(10B) 0.018179 0.016728 0.012888 0.003124 0.001754 0.002858
```

```
C(11B) 0.022705 0.021676 0.016337 0.004582 0.001311 0.006893
C(12B) 0.020303 0.020031 0.022513 0.005035 0.001274 0.00869
C(13B) 0.01995 0.017252 0.021368 0.006374 0.003049 0.004175
C(14B) 0.016344 0.015299 0.015447 0.00419 0.00205 0.001576
C(15B) 0.014952 0.013475 0.022968 0.0023 0.000993 0.007208
C(16B) 0.021746 0.019559 0.033267 0.000845 -0.000227 0.015335
C(17B) 0.02767 0.01519 0.023282 0.002808 0.000954 0.000615
C(19B) 0.021731 0.022456 0.015952 0.002774 0.000873 0.006735
C(4C) 0.010748 0.01454 0.013184 0.000018 -0.000701 0.002877
C(5C) 0.011979 0.014238 0.012441 0.000271 -0.000565 0.002517
C(7C) 0.013208 0.01465 0.013449 -0.000727 -0.001291 0.001584
C(9C) 0.012918 0.013664 0.016352 -0.000132 -0.000043 0.002211
C(10C) 0.019326 0.019221 0.017097 -0.002115 0.000126 0.005009
C(11C) 0.026982 0.022533 0.02237 -0.00031 0.003691 0.009092
C(12C) 0.024473 0.01756 0.032159 0.000705 0.007318 0.009536
C(13C) 0.020513 0.016111 0.035004 -0.003208 0.001233 0.006555
C(14C) 0.017104 0.015483 0.024478 -0.002866 -0.00222 0.002904
C(15C) 0.013922 0.015697 0.020794 -0.000087 0.003015 0.005739
C(16C) 0.022967 0.02002 0.029392 0.002982 0.002973 0.011742
C(17C) 0.022928 0.017606 0.022754 -0.001826 0.003012 -0.000819
C(19C) 0.019253 0.038326 0.01732 -0.003645 0.00019 0.010552
```

```
data_FFT
_refine_diff_density_max      0.310
_refine_diff_density_min     -0.688
_refine_diff_density_rms      0.089
```

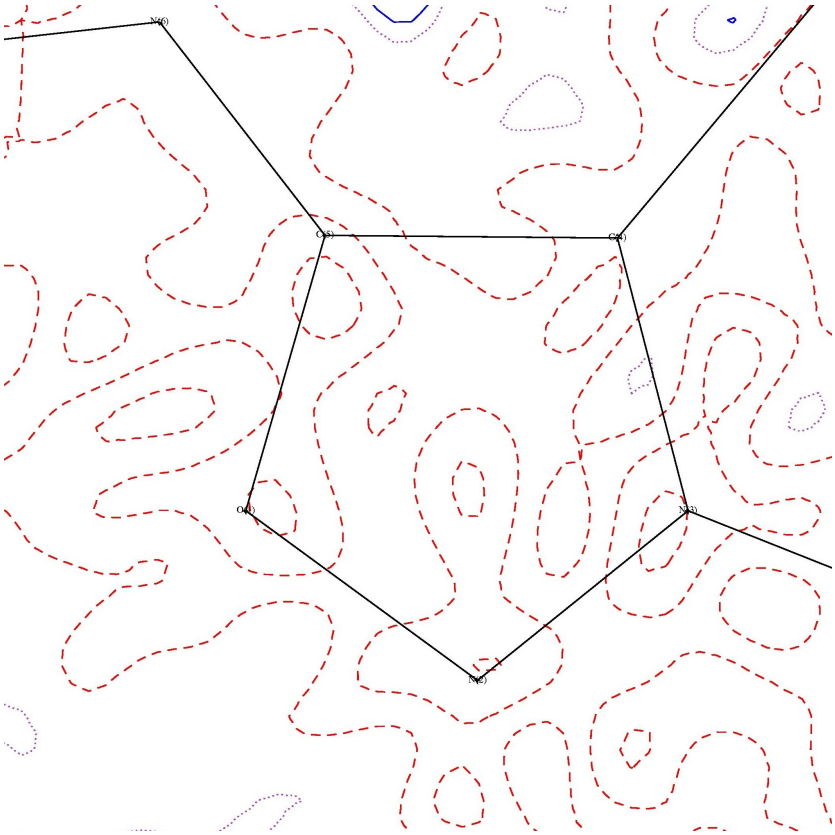


Fig. 3. The residual electron density map in the plane of the central heterocycle of the green molecule, which contains the S(18) atom.

Contours are drawn with 0.1 eÅ^{-3} interval, the negative ones (red) are dashed, the zero contour is drawn by a purple dot line.