

Table S1. Bond lengths [Å] and angles [°] for **1**.

O(1)-C(2)	1.371(2)
O(1)-C(5)	1.375(2)
C(2)-N(3)	1.329(2)
C(2)-S(2)	1.6548(19)
N(3)-N(4)	1.388(2)
N(3)-H(3N)	0.88(2)
N(4)-C(5)	1.284(2)
C(5)-C(6)	1.491(2)
C(6)-C(11)	1.513(2)
C(6)-H(6A)	0.9900
C(6)-H(6B)	0.9900
C(11)-C(16)	1.384(2)
C(11)-C(12)	1.401(2)
C(12)-O(12)	1.372(2)
C(12)-C(13)	1.390(2)
O(12)-C(121)	1.434(2)
C(121)-H(12A)	0.9800
C(121)-H(12B)	0.9800
C(121)-H(12C)	0.9800
C(13)-C(14)	1.385(3)
C(13)-H(13)	0.9500
C(14)-C(15)	1.382(3)
C(14)-H(14)	0.9500
C(15)-C(16)	1.391(3)
C(15)-H(15)	0.9500
C(16)-H(16)	0.9500
C(2)-O(1)-C(5)	106.54(13)
N(3)-C(2)-O(1)	104.68(15)
N(3)-C(2)-S(2)	132.00(14)
O(1)-C(2)-S(2)	123.32(13)
C(2)-N(3)-N(4)	112.71(14)
C(2)-N(3)-H(3N)	127.6(13)
N(4)-N(3)-H(3N)	119.2(13)

C(5)-N(4)-N(3)	103.51(14)
N(4)-C(5)-O(1)	112.57(15)
N(4)-C(5)-C(6)	128.46(16)
O(1)-C(5)-C(6)	118.95(14)
C(5)-C(6)-C(11)	112.27(14)
C(5)-C(6)-H(6A)	109.2
C(11)-C(6)-H(6A)	109.2
C(5)-C(6)-H(6B)	109.2
C(11)-C(6)-H(6B)	109.2
H(6A)-C(6)-H(6B)	107.9
C(16)-C(11)-C(12)	119.10(16)
C(16)-C(11)-C(6)	121.31(15)
C(12)-C(11)-C(6)	119.59(16)
O(12)-C(12)-C(13)	124.62(16)
O(12)-C(12)-C(11)	115.09(15)
C(13)-C(12)-C(11)	120.29(17)
C(12)-O(12)-C(121)	116.95(14)
O(12)-C(121)-H(12A)	109.5
O(12)-C(121)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(121)-H(12B)	109.5
O(12)-C(121)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(121)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(121)-H(12C)	109.5
C(14)-C(13)-C(12)	119.46(17)
C(14)-C(13)-H(13)	120.3
C(12)-C(13)-H(13)	120.3
C(15)-C(14)-C(13)	120.96(17)
C(15)-C(14)-H(14)	119.5
C(13)-C(14)-H(14)	119.5
C(14)-C(15)-C(16)	119.30(18)
C(14)-C(15)-H(15)	120.3
C(16)-C(15)-H(15)	120.3
C(11)-C(16)-C(15)	120.86(17)
C(11)-C(16)-H(16)	119.6
C(15)-C(16)-H(16)	119.6

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for **2**.

O(1)-C(2)	1.3652(17)
O(1)-C(5)	1.3760(17)
C(2)-N(3)	1.3262(19)
C(2)-S(2)	1.6568(15)
N(3)-N(4)	1.3854(17)
N(3)-HN3	0.85(2)
N(4)-C(5)	1.2821(19)
C(5)-C(6)	1.484(2)
C(6)-C(11)	1.520(2)
C(6)-H(6A)	0.9900
C(6)-H(6B)	0.9900
C(11)-C(16)	1.391(2)
C(11)-C(12)	1.3956(19)
C(12)-C(13)	1.392(2)
C(12)-H(112)	0.9500
C(13)-O(13)	1.3723(17)
C(13)-C(14)	1.392(2)
O(13)-C(131)	1.4287(18)
C(131)-H(13A)	0.9800
C(131)-H(13B)	0.9800
C(131)-H(13C)	0.9800
C(14)-C(15)	1.382(2)
C(14)-H(14)	0.9500
C(15)-C(16)	1.389(2)
C(15)-H(15)	0.9500
C(16)-H(16)	0.9500
C(2)-O(1)-C(5)	105.96(11)
N(3)-C(2)-O(1)	105.17(12)
N(3)-C(2)-S(2)	131.51(12)
O(1)-C(2)-S(2)	123.32(11)
C(2)-N(3)-N(4)	112.66(12)
C(2)-N(3)-HN3	125.5(13)
N(4)-N(3)-HN3	121.9(13)

C(5)-N(4)-N(3)	103.17(12)
N(4)-C(5)-O(1)	113.04(13)
N(4)-C(5)-C(6)	128.43(13)
O(1)-C(5)-C(6)	118.52(12)
C(5)-C(6)-C(11)	113.60(12)
C(5)-C(6)-H(6A)	108.8
C(11)-C(6)-H(6A)	108.8
C(5)-C(6)-H(6B)	108.8
C(11)-C(6)-H(6B)	108.8
H(6A)-C(6)-H(6B)	107.7
C(16)-C(11)-C(12)	119.97(13)
C(16)-C(11)-C(6)	121.06(13)
C(12)-C(11)-C(6)	118.96(13)
C(13)-C(12)-C(11)	119.79(13)
C(13)-C(12)-H(112)	120.1
C(11)-C(12)-H(112)	120.1
O(13)-C(13)-C(12)	123.94(13)
O(13)-C(13)-C(14)	115.86(12)
C(12)-C(13)-C(14)	120.19(13)
C(13)-O(13)-C(131)	117.03(11)
O(13)-C(131)-H(13A)	109.5
O(13)-C(131)-H(13B)	109.5
H(13A)-C(131)-H(13B)	109.5
O(13)-C(131)-H(13C)	109.5
H(13A)-C(131)-H(13C)	109.5
H(13B)-C(131)-H(13C)	109.5
C(15)-C(14)-C(13)	119.56(13)
C(15)-C(14)-H(14)	120.2
C(13)-C(14)-H(14)	120.2
C(14)-C(15)-C(16)	120.86(14)
C(14)-C(15)-H(15)	119.6
C(16)-C(15)-H(15)	119.6
C(15)-C(16)-C(11)	119.61(13)
C(15)-C(16)-H(16)	120.2
C(11)-C(16)-H(16)	120.2

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for **3**.

O(1)-C(2)	1.3639(11)
O(1)-C(5)	1.3769(11)
C(2)-N(3)	1.3278(12)
C(2)-S(2)	1.6632(10)
N(3)-N(4)	1.3886(12)
N(3)-H(3N)	0.892(15)
N(4)-C(5)	1.2855(12)
C(5)-C(6)	1.4818(13)
C(6)-C(11)	1.5172(13)
C(6)-H(6A)	0.9900
C(6)-H(6B)	0.9900
C(11)-C(16)	1.3934(12)
C(11)-C(12)	1.3959(12)
C(12)-C(13)	1.3883(13)
C(12)-H(12)	0.9500
C(13)-C(14)	1.3953(12)
C(13)-H(13)	0.9500
C(14)-O(14)	1.3659(11)
C(14)-C(15)	1.3937(12)
O(14)-C(141)	1.4294(12)
C(141)-H(14A)	0.9800
C(141)-H(14B)	0.9800
C(141)-H(14C)	0.9800
C(15)-C(16)	1.3913(12)
C(15)-H(15)	0.9500
C(16)-H(16)	0.9500
C(2)-O(1)-C(5)	106.04(7)
N(3)-C(2)-O(1)	105.34(8)
N(3)-C(2)-S(2)	131.12(8)
O(1)-C(2)-S(2)	123.54(7)
C(2)-N(3)-N(4)	112.45(8)
C(2)-N(3)-H(3N)	125.0(9)
N(4)-N(3)-H(3N)	122.0(9)

C(5)-N(4)-N(3)	103.20(8)
N(4)-C(5)-O(1)	112.92(8)
N(4)-C(5)-C(6)	128.42(9)
O(1)-C(5)-C(6)	118.66(8)
C(5)-C(6)-C(11)	112.85(8)
C(5)-C(6)-H(6A)	109.0
C(11)-C(6)-H(6A)	109.0
C(5)-C(6)-H(6B)	109.0
C(11)-C(6)-H(6B)	109.0
H(6A)-C(6)-H(6B)	107.8
C(16)-C(11)-C(12)	118.55(8)
C(16)-C(11)-C(6)	120.24(8)
C(12)-C(11)-C(6)	121.15(8)
C(13)-C(12)-C(11)	120.86(8)
C(13)-C(12)-H(12)	119.6
C(11)-C(12)-H(12)	119.6
C(12)-C(13)-C(14)	119.93(8)
C(12)-C(13)-H(13)	120.0
C(14)-C(13)-H(13)	120.0
O(14)-C(14)-C(15)	124.28(8)
O(14)-C(14)-C(13)	115.80(8)
C(15)-C(14)-C(13)	119.92(8)
C(14)-O(14)-C(141)	116.40(7)
O(14)-C(141)-H(14A)	109.5
O(14)-C(141)-H(14B)	109.5
H(14A)-C(141)-H(14B)	109.5
O(14)-C(141)-H(14C)	109.5
H(14A)-C(141)-H(14C)	109.5
H(14B)-C(141)-H(14C)	109.5
C(16)-C(15)-C(14)	119.47(8)
C(16)-C(15)-H(15)	120.3
C(14)-C(15)-H(15)	120.3
C(15)-C(16)-C(11)	121.27(8)
C(15)-C(16)-H(16)	119.4
C(11)-C(16)-H(16)	119.4

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for **3**.

O(1)-C(2)	1.3641(12)
O(1)-C(5)	1.3772(12)
C(2)-N(3)	1.3285(12)
C(2)-S(2)	1.6612(10)
N(3)-N(4)	1.3951(12)
N(3)-H(3N)	0.863(15)
N(4)-C(5)	1.2868(13)
C(5)-C(6)	1.4792(14)
C(6)-C(7)	1.5242(14)
C(6)-H(6A)	0.9900
C(6)-H(6B)	0.9900
C(7)-C(11)	1.5160(14)
C(7)-H(7A)	0.9900
C(7)-H(7B)	0.9900
C(11)-C(16)	1.3933(13)
C(11)-C(12)	1.4087(13)
C(12)-O(12)	1.3726(12)
C(12)-C(13)	1.3932(14)
O(12)-C(121)	1.4337(13)
C(121)-H(12A)	0.9800
C(121)-H(12B)	0.9800
C(121)-H(12C)	0.9800
C(13)-C(14)	1.4017(14)
C(13)-H(13)	0.9500
C(14)-C(15)	1.3822(15)
C(14)-H(14)	0.9500
C(15)-C(16)	1.3983(14)
C(15)-H(15)	0.9500
C(16)-H(16)	0.9500
C(2)-O(1)-C(5)	106.40(7)
N(3)-C(2)-O(1)	105.13(8)
N(3)-C(2)-S(2)	132.58(8)
O(1)-C(2)-S(2)	122.27(7)

C(2)-N(3)-N(4)	112.58(8)
C(2)-N(3)-H(3N)	126.3(10)
N(4)-N(3)-H(3N)	120.9(10)
C(5)-N(4)-N(3)	103.01(8)
N(4)-C(5)-O(1)	112.88(9)
N(4)-C(5)-C(6)	132.02(9)
O(1)-C(5)-C(6)	115.09(8)
C(5)-C(6)-C(7)	115.23(8)
C(5)-C(6)-H(6A)	108.5
C(7)-C(6)-H(6A)	108.5
C(5)-C(6)-H(6B)	108.5
C(7)-C(6)-H(6B)	108.5
H(6A)-C(6)-H(6B)	107.5
C(11)-C(7)-C(6)	111.93(8)
C(11)-C(7)-H(7A)	109.2
C(6)-C(7)-H(7A)	109.2
C(11)-C(7)-H(7B)	109.2
C(6)-C(7)-H(7B)	109.2
H(7A)-C(7)-H(7B)	107.9
C(16)-C(11)-C(12)	117.82(9)
C(16)-C(11)-C(7)	122.79(9)
C(12)-C(11)-C(7)	119.36(9)
O(12)-C(12)-C(13)	123.79(9)
O(12)-C(12)-C(11)	115.02(9)
C(13)-C(12)-C(11)	121.18(9)
C(12)-O(12)-C(121)	117.54(8)
O(12)-C(121)-H(12A)	109.5
O(12)-C(121)-H(12B)	109.5
H(12A)-C(121)-H(12B)	109.5
O(12)-C(121)-H(12C)	109.5
H(12A)-C(121)-H(12C)	109.5
H(12B)-C(121)-H(12C)	109.5
C(12)-C(13)-C(14)	119.49(9)
C(12)-C(13)-H(13)	120.3
C(14)-C(13)-H(13)	120.3
C(15)-C(14)-C(13)	120.22(10)

C(15)-C(14)-H(14)	119.9
C(13)-C(14)-H(14)	119.9
C(14)-C(15)-C(16)	119.71(9)
C(14)-C(15)-H(15)	120.1
C(16)-C(15)-H(15)	120.1
C(11)-C(16)-C(15)	121.57(9)
C(11)-C(16)-H(16)	119.2
C(15)-C(16)-H(16)	119.2

Table 3. Bond lengths [Å] and angles [°] for **5**.

O(1A)-C(2A)	1.376(3)
O(1A)-C(5A)	1.382(3)
C(2A)-N(3A)	1.335(3)
C(2A)-S(2A)	1.648(3)
N(3A)-N(4A)	1.398(3)
N(3A)-H(3NA)	0.85(3)
N(4A)-C(5A)	1.287(3)
C(5A)-C(6A)	1.471(4)
C(6A)-C(7A)	1.531(3)
C(6A)-H(6A)	0.9900
C(6A)-H(6B)	0.9900
C(7A)-C(11A)	1.525(4)
C(7A)-H(7A)	0.9900
C(7A)-H(7B)	0.9900
C(11A)-C(12A)	1.394(4)
C(11A)-C(16A)	1.396(4)
C(12A)-C(13A)	1.394(4)
C(12A)-H(12A)	0.9500
C(13A)-C(14A)	1.386(3)
C(13A)-H(13A)	0.9500
C(14A)-O(14A)	1.380(3)
C(14A)-C(15A)	1.399(4)
O(14A)-C(141)	1.446(3)
C(141)-H(14A)	0.9800
C(141)-H(14B)	0.9800
C(141)-H(14C)	0.9800
C(15A)-C(16A)	1.380(4)
C(15A)-H(15A)	0.9500
C(16A)-H(16A)	0.9500
O(1B)-C(2B)	1.382(3)
O(1B)-C(5B)	1.384(3)
C(2B)-N(3B)	1.340(3)
C(2B)-S(2B)	1.645(3)
N(3B)-N(4B)	1.390(3)

N(3B)-H(3B)	0.82(3)
N(4B)-C(5B)	1.290(3)
C(5B)-C(6B)	1.468(4)
C(6B)-C(7B)	1.538(4)
C(6B)-H(6C)	0.9900
C(6B)-H(6D)	0.9900
C(7B)-C(11B)	1.520(4)
C(7B)-H(7C)	0.9900
C(7B)-H(7D)	0.9900
C(11B)-C(12B)	1.397(4)
C(11B)-C(16B)	1.397(3)
C(12B)-C(13B)	1.392(4)
C(12B)-H(12B)	0.9500
C(13B)-C(14B)	1.390(4)
C(13B)-H(13B)	0.9500
C(14B)-O(14B)	1.376(3)
C(14B)-C(15B)	1.398(4)
O(14B)-C(142)	1.436(3)
C(142)-H(14D)	0.9800
C(142)-H(14E)	0.9800
C(142)-H(14F)	0.9800
C(15B)-C(16B)	1.369(4)
C(15B)-H(15B)	0.9500
C(16B)-H(16B)	0.9500
C(2A)-O(1A)-C(5A)	106.14(19)
N(3A)-C(2A)-O(1A)	104.8(2)
N(3A)-C(2A)-S(2A)	131.5(2)
O(1A)-C(2A)-S(2A)	123.73(19)
C(2A)-N(3A)-N(4A)	112.9(2)
C(2A)-N(3A)-H(3NA)	127.4(18)
N(4A)-N(3A)-H(3NA)	119.1(19)
C(5A)-N(4A)-N(3A)	102.9(2)
N(4A)-C(5A)-O(1A)	113.3(2)
N(4A)-C(5A)-C(6A)	128.7(2)
O(1A)-C(5A)-C(6A)	118.0(2)

C(5A)-C(6A)-C(7A)	111.4(2)
C(5A)-C(6A)-H(6A)	109.3
C(7A)-C(6A)-H(6A)	109.3
C(5A)-C(6A)-H(6B)	109.3
C(7A)-C(6A)-H(6B)	109.3
H(6A)-C(6A)-H(6B)	108.0
C(11A)-C(7A)-C(6A)	115.2(2)
C(11A)-C(7A)-H(7A)	108.5
C(6A)-C(7A)-H(7A)	108.5
C(11A)-C(7A)-H(7B)	108.5
C(6A)-C(7A)-H(7B)	108.5
H(7A)-C(7A)-H(7B)	107.5
C(12A)-C(11A)-C(16A)	117.3(2)
C(12A)-C(11A)-C(7A)	123.8(2)
C(16A)-C(11A)-C(7A)	118.8(2)
C(11A)-C(12A)-C(13A)	121.5(2)
C(11A)-C(12A)-H(12A)	119.2
C(13A)-C(12A)-H(12A)	119.2
C(14A)-C(13A)-C(12A)	119.7(2)
C(14A)-C(13A)-H(13A)	120.2
C(12A)-C(13A)-H(13A)	120.2
O(14A)-C(14A)-C(13A)	116.1(2)
O(14A)-C(14A)-C(15A)	123.9(2)
C(13A)-C(14A)-C(15A)	119.9(2)
C(14A)-O(14A)-C(141)	118.6(2)
O(14A)-C(141)-H(14A)	109.5
O(14A)-C(141)-H(14B)	109.5
H(14A)-C(141)-H(14B)	109.5
O(14A)-C(141)-H(14C)	109.5
H(14A)-C(141)-H(14C)	109.5
H(14B)-C(141)-H(14C)	109.5
C(16A)-C(15A)-C(14A)	119.2(2)
C(16A)-C(15A)-H(15A)	120.4
C(14A)-C(15A)-H(15A)	120.4
C(15A)-C(16A)-C(11A)	122.3(2)
C(15A)-C(16A)-H(16A)	118.8

C(11A)-C(16A)-H(16A)	118.8
C(2B)-O(1B)-C(5B)	106.32(19)
N(3B)-C(2B)-O(1B)	104.2(2)
N(3B)-C(2B)-S(2B)	131.8(2)
O(1B)-C(2B)-S(2B)	124.07(19)
C(2B)-N(3B)-N(4B)	113.3(2)
C(2B)-N(3B)-H(3B)	127(2)
N(4B)-N(3B)-H(3B)	120(2)
C(5B)-N(4B)-N(3B)	103.1(2)
N(4B)-C(5B)-O(1B)	113.0(2)
N(4B)-C(5B)-C(6B)	129.2(2)
O(1B)-C(5B)-C(6B)	117.7(2)
C(5B)-C(6B)-C(7B)	111.8(2)
C(5B)-C(6B)-H(6C)	109.3
C(7B)-C(6B)-H(6C)	109.3
C(5B)-C(6B)-H(6D)	109.3
C(7B)-C(6B)-H(6D)	109.3
H(6C)-C(6B)-H(6D)	107.9
C(11B)-C(7B)-C(6B)	114.6(2)
C(11B)-C(7B)-H(7C)	108.6
C(6B)-C(7B)-H(7C)	108.6
C(11B)-C(7B)-H(7D)	108.6
C(6B)-C(7B)-H(7D)	108.6
H(7C)-C(7B)-H(7D)	107.6
C(12B)-C(11B)-C(16B)	117.3(2)
C(12B)-C(11B)-C(7B)	124.1(2)
C(16B)-C(11B)-C(7B)	118.5(2)
C(13B)-C(12B)-C(11B)	121.5(2)
C(13B)-C(12B)-H(12B)	119.2
C(11B)-C(12B)-H(12B)	119.2
C(14B)-C(13B)-C(12B)	119.9(2)
C(14B)-C(13B)-H(13B)	120.1
C(12B)-C(13B)-H(13B)	120.1
O(14B)-C(14B)-C(13B)	116.2(2)
O(14B)-C(14B)-C(15B)	124.8(2)
C(13B)-C(14B)-C(15B)	119.0(2)

C(14B)-O(14B)-C(142)	118.1(2)
O(14B)-C(142)-H(14D)	109.5
O(14B)-C(142)-H(14E)	109.5
H(14D)-C(142)-H(14E)	109.5
O(14B)-C(142)-H(14F)	109.5
H(14D)-C(142)-H(14F)	109.5
H(14E)-C(142)-H(14F)	109.5
C(16B)-C(15B)-C(14B)	120.5(2)
C(16B)-C(15B)-H(15B)	119.8
C(14B)-C(15B)-H(15B)	119.8
C(15B)-C(16B)-C(11B)	121.8(2)
C(15B)-C(16B)-H(16B)	119.1
C(11B)-C(16B)-H(16B)	119.1
