

# BIOCHEMISTRY

including biophysical chemistry & molecular biology

Supporting information for *Biochemistry*, **1983**, 22(5), 1264 – 1271, DOI: [10.1021/bi00274a043](https://doi.org/10.1021/bi00274a043)

# Wieland

# PP. 1264-1271

## Terms & Conditions

Electronic Supporting Information files are available without a subscription to ACS Web Editions. The American Chemical Society holds a copyright ownership interest in any copyrightable Supporting Information. Files available from the ACS website may be downloaded for personal use only. Users are not otherwise permitted to reproduce, republish, redistribute, or sell any Supporting Information from the ACS website, either in whole or in part, in either machine-readable form or any other form without permission from the American Chemical Society. For permission to reproduce, republish and redistribute this material, requesters must process their own requests via the RightsLink permission system. Information about how to use the RightsLink permission system can be found at <http://pubs.acs.org/page/copyright/permissions.html>.



**ACS Publications**  
MOST TRUSTED. MOST CITED. MOST READ.

Copyright © 1983 American Chemical Society

Table S1. Positional Parameters (Sulfone 5)

R-0271-14

	X/A	Y/B	Z/C				
S(1)	0.0911( 1)	0.8605( 1)	0.7860( 1)	C(39)	-0.1385( 6)	0.9964( 5)	0.6451( 5)
O(1)	0.0951( 2)	0.7833( 2)	0.7732( 2)	C(17)	-0.3224( 6)	0.4830( 4)	0.6199( 3)
O(2)	0.1585( 2)	0.8935( 3)	0.8215( 2)	C(20)	-0.1269( 4)	0.7097( 4)	0.4076( 3)
N(1)	0.0047( 3)	0.9259( 2)	0.8829( 2)	C(36)	-0.0868( 6)	1.2151( 4)	0.5063( 5)
C(1)	0.0007( 3)	0.8791( 3)	0.8294( 2)	C(37)	-0.1155( 8)	1.2947( 5)	0.5051( 8)
C(2)	-0.0775( 3)	0.8509( 3)	0.8228( 2)	C(6)	-0.2289( 5)	0.9049( 4)	0.9585( 4)
C(3)	-0.1245( 3)	0.8810( 3)	0.8773( 2)	C(7)	-0.1741( 4)	0.9526( 4)	0.9923( 3)
C(4)	-0.0695( 3)	0.9268( 3)	0.9115( 2)	O(03)	-0.2057( 3)	0.9833( 3)	1.0480( 3)
C(29)	0.0793( 3)	0.9042( 3)	0.7082( 2)	C(039)*	-0.1369(11)	0.9880(10)	0.6187( 9)
C(10)	-0.1055( 3)	0.7975( 3)	0.7716( 2)	OW1**	-0.1092( 3)	0.5096( 3)	0.5299( 3)
C(11)	-0.1860( 3)	0.8193( 3)	0.7334( 2)	OW2	-0.2106( 8)	1.0904( 7)	0.7760( 6)
C(40)	-0.1841( 3)	0.8983( 3)	0.7105( 3)	OW3	0.3454(55)	0.7750(52)	0.7904(48)
C(12)	-0.2711( 3)	0.7538( 3)	0.6529( 3)	OW4	-0.0607(53)	0.9554(46)	0.4095(44)
O(15)	-0.2246( 3)	0.9440( 2)	0.7427( 2)	OE1	0.4461( 4)	1.0186( 4)	0.6040( 5)
O(4)	-0.3338( 2)	0.7882( 3)	0.6681( 2)	C1E1	0.4757( 9)	1.0795(11)	0.6379( 8)
N(2)	-0.1976( 2)	0.7673( 2)	0.6786( 2)	C2E1	0.5076(22)	1.0666(20)	0.6975(12)
C(13)	-0.2755( 3)	0.6906( 3)	0.6028( 2)	OE2	-0.4765(27)	0.3586(22)	0.6818(21)
N(3)	-0.2027( 2)	0.6956( 2)	0.5579( 2)	C1E2	-0.5601(42)	0.3449(33)	0.7083(31)
C(18)	-0.1935( 3)	0.7503( 3)	0.5160( 2)	C2E2	-0.6246(22)	0.3884(18)	0.6939(16)
O(7)	-0.2474( 2)	0.7973( 2)	0.5082( 2)	OE3	-0.2236(15)	0.9000(13)	0.4034(11)
C(19)	-0.1163( 3)	0.7516( 3)	0.4736( 2)	C1E3	-0.1675(51)	0.9540(45)	0.4050(41)
N(4)	-0.0421( 2)	0.7190( 2)	0.5038( 2)	C2E3	-0.1063(48)	0.9835(38)	0.4592(39)
C(22)	0.0007( 4)	0.6685( 4)	0.4571( 3)	OE4	0.1828( 7)	0.6676( 5)	0.8372( 8)
C(21)	-0.0373( 4)	0.6880( 5)	0.3893( 3)	C1E4	0.2613(29)	0.6663(24)	0.8444(21)
C(23)	-0.0105( 3)	0.7468( 3)	0.5593( 2)	C2E4	0.3061(54)	0.7350(65)	0.8326(58)
O(9)	-0.0458( 2)	0.7966( 2)	0.5893( 2)				
C(24)	0.0723( 3)	0.7154( 3)	0.5848( 2)				
C(25)	0.0633( 4)	0.6398( 3)	0.6163( 3)				
C(26)	-0.0018( 3)	0.6365( 3)	0.6705( 3)				
O(10)	-0.0758( 2)	0.6492( 2)	0.6582( 2)				
N(5)	0.1081( 2)	0.7668( 2)	0.6318( 2)				
C(27)	0.1343( 3)	0.8320( 3)	0.6079( 3)				
O(11)	0.1431( 3)	0.8431( 2)	0.5498( 2)				
C(28)	0.1529( 3)	0.8909( 3)	0.6610( 2)				
N(6)	0.1664( 3)	0.9583( 2)	0.6246( 2)				
N(9)	-0.1367( 3)	0.9162( 2)	0.6583( 2)				
C(5)	-0.0935( 4)	0.9638( 3)	0.9712( 3)				
C(8)	-0.2059( 3)	0.8711( 4)	0.9003( 3)				
C(14)	-0.2801( 3)	0.6162( 3)	0.6368( 2)				
C(16)	-0.3209( 3)	0.5600( 3)	0.5904( 3)				
O(5)	-0.2784( 2)	0.5538( 2)	0.5285( 2)				
O(8)	0.0006( 3)	0.7515( 3)	0.3623( 2)				
C(30)	0.2369( 3)	0.9966( 3)	0.6283( 3)				
C(31)	0.2360( 4)	1.0705( 3)	0.5941( 3)				
N(7)	0.1567( 3)	1.0874( 2)	0.5609( 2)				
C(32)	0.0917( 4)	1.1120( 3)	0.5955( 3)				
O(13)	0.0959( 3)	1.1233( 2)	0.6560( 2)				
C(33)	0.0123( 4)	1.1220( 3)	0.5569( 3)				
C(34)	-0.0082( 5)	1.2049( 3)	0.5466( 3)				
C(35)	0.0689( 6)	1.2389( 4)	0.5117( 5)				
C(15)	-0.3263( 6)	0.6203( 4)	0.7035( 3)				
O(14)	-0.0025( 3)	0.9747( 2)	0.5871( 2)				
N(10)	0.0261( 4)	0.6216( 3)	0.7301( 2)				
C(38)	-0.0585( 4)	1.0166( 3)	0.6029( 3)				
O(12)	0.2983( 3)	0.9775( 3)	0.6576( 3)				
O(6)	-0.3714( 4)	0.4359( 2)	0.5791( 2)				
C(9)	-0.1635( 5)	1.0451( 5)	1.0754( 5)				
N(8)	-0.0576( 3)	1.0884( 3)	0.5916( 2)				

\* C(39) occurs statistically at two positions, C(39)

and C(039), with occupancies of 0.7 and 0.3 respectively.

\*\* W=water, E=ethanol, occupancies: W2 - 0.52, W3 - 0.43

W4 - 0.27, E2 - 0.5, E3 - 0.5, E4 - 0.5 .

Table S2. Bond lengths (Å) (Sulfone 5)

O(1)	-S(1)	1.440( 5)	O(2)	-S(1)	1.435( 5)
C(1)	-S(1)	1.734( 6)	C(29)	-S(1)	1.768( 6)
C(1)	-N(1)	1.378( 8)	C(4)	-N(1)	1.328( 7)
C(2)	-C(1)	1.369( 8)	C(3)	-C(2)	1.444( 8)
C(10)	-C(2)	1.492( 8)	C(4)	-C(3)	1.402( 8)
C(8)	-C(3)	1.403( 9)	C(5)	-C(4)	1.432( 9)
C(28)	-C(29)	1.539( 8)	C(11)	-C(10)	1.560( 8)
C(40)	-C(11)	1.523( 8)	N(2)	-C(11)	1.470( 7)
O(15)	-C(40)	1.245( 8)	N(9)	-C(40)	1.339( 8)
O(4)	-C(12)	1.230( 7)	N(2)	-C(12)	1.316( 7)
C(13)	-C(12)	1.539( 9)	N(3)	-C(13)	1.485( 7)
C(14)	-C(13)	1.529( 9)	C(18)	-N(3)	1.318( 8)
O(7)	-C(18)	1.235( 8)	C(19)	-C(18)	1.509( 8)
N(4)	-C(19)	1.469( 8)	C(20)	-C(19)	1.541(10)
C(22)	-N(4)	1.490( 9)	C(25)	-N(4)	1.329( 7)
C(21)	-C(22)	1.537(10)	O(8)	-C(21)	1.424(11)
C(20)	-C(21)	1.543(10)	O(9)	-C(23)	1.236( 7)
C(24)	-C(23)	1.543( 8)	C(25)	-C(24)	1.532( 9)
N(5)	-C(24)	1.457( 7)	C(26)	-C(25)	1.515( 9)
O(10)	-C(26)	1.239( 8)	N(10)	-C(26)	1.308( 9)
C(27)	-N(5)	1.358( 8)	O(11)	-C(27)	1.194( 7)
C(28)	-C(27)	1.550( 8)	N(6)	-C(28)	1.454( 8)
C(30)	-N(6)	1.339( 8)	C(39)	-N(9)	1.496(12)
C(039)	-N(9)	1.540(19)	C(7)	-C(5)	1.383(10)
C(6)	-C(8)	1.377(12)	C(16)	-C(14)	1.538( 9)
C(15)	-C(14)	1.537(10)	O(5)	-C(16)	1.427( 7)
C(17)	-C(16)	1.534(10)	C(31)	-C(30)	1.522(10)
O(12)	-C(30)	1.203( 8)	N(7)	-C(31)	1.476( 9)
C(32)	-N(7)	1.337( 9)	O(13)	-C(32)	1.237( 8)
C(33)	-C(32)	1.508(10)	C(34)	-C(33)	1.573( 9)
N(8)	-C(33)	1.462( 9)	C(35)	-C(34)	1.557(13)
C(36)	-C(34)	1.516(13)	C(38)	-O(14)	1.228( 8)
N(8)	-C(38)	1.337( 8)	C(39)	-C(38)	1.588(13)
C(039)	-C(38)	1.406(20)	C(17)	-O(6)	1.431(10)
O(03)	-C(9)	1.434(12)	C(039)	-C(39)	0.555(21)
C(37)	-C(36)	1.534(13)	C(7)	-C(6)	1.416(11)
O(03)	-C(7)	1.354(10)			

Table S3. Bond angles (Sulfone 5)

O(2)	-S(1)	-O(1)	118.1( 3)	C(1)	-S(1)	-O(1)	108.7( 3)
C(1)	-S(1)	-O(2)	107.6( 3)	C(29)	-S(1)	-O(1)	107.1( 3)
C(29)	-S(1)	-O(2)	109.3( 3)	C(29)	-S(1)	-C(1)	105.4( 3)
C(4)	-N(1)	-C(1)	107.7( 5)	N(1)	-C(1)	-S(1)	118.5( 4)
C(2)	-C(1)	-S(1)	130.6( 5)	C(2)	-C(1)	-N(1)	110.8( 5)
C(3)	-C(2)	-C(1)	105.3( 5)	C(10)	-C(2)	-C(1)	126.5( 5)
C(10)	-C(2)	-C(3)	128.2( 5)	C(4)	-C(3)	-C(2)	105.7( 5)
C(8)	-C(3)	-C(2)	133.7( 6)	C(8)	-C(3)	-C(4)	120.5( 6)
C(3)	-C(4)	-N(1)	110.4( 5)	C(5)	-C(4)	-N(1)	127.9( 5)
C(5)	-C(4)	-C(3)	121.6( 5)	C(28)	-C(29)	-S(1)	113.0( 4)
C(11)	-C(10)	-C(2)	115.0( 5)	C(40)	-C(11)	-C(10)	112.1( 5)
N(2)	-C(11)	-C(10)	108.0( 4)	N(2)	-C(11)	-C(40)	113.2( 5)
O(15)	-C(40)	-C(11)	118.3( 5)	N(9)	-C(40)	-C(11)	118.9( 5)
N(9)	-C(40)	-O(15)	122.8( 6)	N(2)	-C(12)	-O(4)	123.1( 6)
C(13)	-C(12)	-O(4)	120.8( 5)	C(13)	-C(12)	-N(2)	116.1( 5)
C(12)	-N(2)	-C(11)	122.1( 5)	N(3)	-C(13)	-C(12)	108.4( 5)
C(14)	-C(13)	-C(12)	112.5( 5)	C(14)	-C(13)	-N(3)	111.4( 5)
C(18)	-N(3)	-C(13)	121.6( 5)	O(7)	-C(18)	-N(3)	122.3( 6)
C(19)	-C(18)	-N(3)	117.7( 5)	C(19)	-C(18)	-O(7)	119.8( 6)
N(4)	-C(19)	-C(18)	115.6( 5)	C(20)	-C(19)	-C(18)	112.7( 5)
C(20)	-C(19)	-N(4)	104.0( 5)	C(22)	-N(4)	-C(19)	111.7( 5)
C(23)	-N(4)	-C(19)	120.2( 5)	C(23)	-N(4)	-C(22)	126.2( 5)
C(21)	-C(22)	-N(4)	103.3( 6)	O(8)	-C(21)	-C(22)	110.9( 6)
C(20)	-C(21)	-C(22)	102.7( 6)	C(20)	-C(21)	-O(8)	106.3( 7)
O(9)	-C(23)	-N(4)	121.2( 5)	C(24)	-C(23)	-N(4)	117.9( 5)
C(24)	-C(23)	-O(9)	120.9( 5)	C(25)	-C(24)	-C(23)	113.2( 5)
N(5)	-C(24)	-C(23)	108.4( 4)	N(5)	-C(24)	-C(25)	110.8( 5)
C(26)	-C(25)	-C(24)	113.6( 5)	O(10)	-C(26)	-C(25)	121.0( 6)
N(10)	-C(26)	-C(25)	115.4( 6)	N(10)	-C(26)	-O(10)	123.6( 6)
C(27)	-N(5)	-C(24)	117.6( 5)	O(11)	-C(27)	-N(5)	122.4( 5)
C(28)	-C(27)	-N(5)	115.5( 5)	C(28)	-C(27)	-O(11)	122.2( 5)
C(27)	-C(28)	-C(29)	112.8( 5)	N(6)	-C(28)	-C(29)	107.0( 5)
N(6)	-C(28)	-C(27)	106.0( 5)	C(30)	-N(6)	-C(28)	123.0( 5)
C(39)	-N(9)	-C(40)	111.7( 6)	C(039)	-N(9)	-C(40)	127.9( 8)
C(039)	-N(9)	-C(39)	21.0( 8)	C(7)	-C(5)	-C(4)	116.2( 6)
C(6)	-C(8)	-C(3)	118.2( 6)	C(16)	-C(14)	-C(13)	110.4( 5)
C(15)	-C(14)	-C(13)	111.7( 6)	C(15)	-C(14)	-C(16)	110.8( 6)
O(5)	-C(16)	-C(14)	112.2( 5)	C(17)	-C(16)	-C(14)	113.0( 5)
C(17)	-C(16)	-O(5)	105.7( 5)	C(31)	-C(30)	-N(6)	115.7( 5)
O(12)	-C(30)	-N(6)	125.0( 6)	O(12)	-C(30)	-C(31)	119.3( 6)
N(7)	-C(31)	-C(30)	113.7( 5)	C(32)	-N(7)	-C(31)	120.9( 6)
O(13)	-C(32)	-N(7)	121.8( 6)	C(33)	-C(32)	-N(7)	115.9( 6)
C(33)	-C(32)	-O(13)	122.3( 6)	C(34)	-C(33)	-C(32)	111.3( 5)
N(8)	-C(33)	-C(32)	110.9( 5)	N(8)	-C(33)	-C(34)	108.0( 6)
C(35)	-C(34)	-C(33)	106.2( 6)	C(36)	-C(34)	-C(33)	111.4( 6)
C(36)	-C(34)	-C(35)	112.2( 7)	N(8)	-C(38)	-O(14)	124.4( 6)
C(39)	-C(38)	-O(14)	126.0( 6)	C(39)	-C(38)	-N(8)	109.3( 6)
C(039)	-C(38)	-O(14)	119.0( 9)	C(039)	-C(38)	-N(8)	114.7( 9)
C(039)	-C(38)	-C(39)	20.2( 8)	C(38)	-N(8)	-C(33)	120.3( 5)
C(38)	-C(39)	-N(9)	108.1( 7)	C(039)	-C(39)	-N(9)	84.0(22)
O(03)	-C(7)	-C(5)	123.1( 7)	O(03)	-C(7)	-C(6)	114.8( 7)
C(7)	-O(03)	-C(9)	118.0( 7)	C(38)	-C(039)	-N(9)	115.8(13)
C(39)	-C(039)	-N(9)	75.0(22)	C(39)	-C(039)	-C(38)	98.8(25)

k-1071.H2

Table S4. Dihedral angles (Sulfone 5)

O1 --S --C1 --C2	-39.36	C24 --N5 --C27 --O11	-14.11
O1 --S --C29 --C28	-61.93	C24 --N5 --C27 --C28	166.58
C1 --S --C29 --C28	-177.55	C25 --C24 --N5 --C27	167.98
S --C29 --C28 --N6	-142.81	C26 --C25 --C24 --N5	68.82
S --C29 --C28 --C27	101.08	N5 --C27 --C28 --C29	-54.31
S --C1 --C2 --C10	-3.41	N5 --C27 --C28 --N6	-171.01
C1 --C2 --C10 --C11	-129.70	O11 --C27 --C28 --C29	126.38
N1 --C1 --C2 --C10	-178.92	O11 --C27 --C28 --N6	9.68
N1 --C1 --S --C29	-109.62	C27 --C28 --C29 --S	101.08
C2 --C10 --C11 --C40	45.96	C27 --C28 --N6 --C30	-121.28
C2 --C10 --C11 --N2	171.38	C28 --N6 --C30 --O12	5.65
C10 --C11 --N2 --C12	154.79	C28 --N6 --C30 --C31	-172.34
C10 --C11 --C40 --O15	-102.29	N6 --C30 --C31 --N7	-1.12
C10 --C11 --C40 --N9	75.22	N6 --C28 --C29 --S	-142.81
C11 --N2 --C12 --O4	7.23	O12 --C30 --C31 --N7	-179.23
C11 --N2 --C12 --C13	-171.74	C30 --C31 --N7 --C32	80.24
N2 --C12 --C13 --N3	-42.81	C31 --N7 --C32 --O13	1.94
N2 --C12 --C13 --C14	80.87	C31 --N7 --C32 --C33	-175.57
O4 --C12 --C13 --C14	-98.13	N7 --C32 --C33 --C34	-108.36
O4 --C12 --C13 --N3	138.20	N7 --C32 --C33 --N8	131.37
C12 --C13 --C14 --C15	31.97	O13 --C32 --C33 --C34	74.14
C12 --C13 --C14 --C16	155.67	O13 --C32 --C33 --N8	-46.13
C12 --C13 --N3 --C18	-66.28	C32 --C33 --C34 --C35	56.19
C13 --C14 --C16 --O5	56.91	C32 --C33 --C24 --C36	-178.42
C13 --C14 --C16 --C17	176.37	C32 --C33 --N8 --C38	-62.10
C13 --N3 --C18 --O7	-5.34	C33 --C34 --C36 --C37	170.90
C13 --N3 --C18 --C19	178.48	C33 --N8 --C38 --O14	1.51
C14 --C16 --C17 --O6	171.60	C33 --N8 --C38 --C39	176.45
C14 --C13 --N3 --C18	169.43	C33 --N8 --C38 --C039	-162.52
C15 --C14 --C16 --O5	-178.83	C34 --C33 --N8 --C38	175.67
C15 --C14 --C16 --C17	-59.37	C35 --C34 --C36 --C37	-70.14
C15 --C14 --C13 --N3	153.95	C35 --C34 --C33 --N8	178.19
O5 --C16 --C17 --O6	-65.26	C36 --C34 --C33 --N8	-59.39
C16 --C14 --C13 --N3	-82.35	N8 --C38 --C39 --N9	-178.62
N3 --C18 --C19 --C20	88.47	N8 --C38 --C039 --N9	-156.27
N3 --C18 --C19 --N4	-31.00	O14 --C38 --C39 --N9	-3.79
C18 --C19 --C20 --C21	-155.09	O14 --C38 --C039 --N9	38.75
C18 --C19 --N4 --C23	-61.80	C38 --C39 --N9 --C40	159.12
C18 --C19 --N4 --C22	132.80	C38 --C039 --N9 --C40	136.42
O7 --C18 --C19 --C20	-87.82	C39 --N9 --C40 --O15	0.59
O7 --C18 --C19 --N4	152.72	C039 --N9 --C40 --O15	-14.88
C19 --C20 --C21 --O8	-78.06	C39 --N9 --C40 --C11	-176.80
C19 --C20 --C21 --C22	38.54	C039 --N9 --C40 --C11	167.73
C19 --N4 --C22 --C21	15.40	N9 --C40 --C11 --N2	-47.34
C19 --N4 --C23 --O9	5.65	O15 --C40 --C11 --N2	135.15
C19 --N4 --C23 --C24	-173.90	C40 --C11 --N2 --C12	-80.41
C20 --C19 --N4 --C22	8.66	C9 --O03 --C7 --C6	-164.57
C20 --C19 --N4 --C23	174.06	C9 --O03 --C7 --C8	-163.37
C20 --C21 --C22 --N4	-32.87	O2 --S --C1 --N1	6.93
C21 --C22 --N4 --C23	-148.92	O2 --S --C29 --C28	67.10
O8 --C21 --C22 --N4	80.41	O2 --S --C1 --C2	-168.29
C22 --N4 --C23 --O9	168.76		
C22 --N4 --C23 --C24	-10.78		
N4 --C23 --C24 --C25	-74.17		
N4 --C23 --C24 --N5	162.37		
O9 --C23 --C24 --C25	106.28		
O9 --C23 --C24 --N5	-17.18		
C23 --C24 --C25 --C26	-53.31		
C23 --C24 --N5 --C27	-67.13		
C24 --C25 --C26 --O10	62.06		
C24 --C25 --C26 --N10	-116.06		

Table S5. Positional parameters (S-sulfoxide 4)

K-1271-M1

	X/A	Y/B	Z/C				
S	0.1013( 1)	0.8602( 1)	0.7899( 1)	C(20)	-0.1327( 3)	0.7086( 3)	0.4088( 2)
O(1)	0.1058( 2)	0.7906( 2)	0.7734( 1)	C(36)	-0.0767( 5)	1.2167( 4)	0.4991( 4)
N(1)	0.0068( 2)	0.9233( 2)	0.8832( 1)	C(37)	-0.1142( 7)	1.2962( 5)	0.5027( 7)
C(1)	0.0037( 3)	0.8791( 2)	0.8286( 2)	C(6)	-0.2379( 3)	0.9153( 3)	0.9454( 3)
C(2)	-0.0764( 3)	0.8530( 2)	0.8187( 2)	C(7)	-0.1824( 3)	0.9589( 3)	0.9830( 2)
C(3)	-0.1260( 3)	0.8836( 2)	0.8713( 2)	O(03)	-0.2175( 3)	0.9927( 2)	1.0363( 2)
C(4)	-0.0717( 3)	0.9269( 2)	0.9086( 2)	OW1*	-0.1089( 3)	0.5072( 3)	0.5281( 2)
C(29)	0.0844( 3)	0.9054( 2)	0.7125( 2)	OH1	0.4518( 3)	1.0200( 3)	0.6041( 2)
C(10)	-0.1046( 3)	0.8004( 2)	0.7659( 2)	CH1	0.4879( 8)	1.0616( 8)	0.6359( 6)
C(11)	-0.1868( 3)	0.8223( 2)	0.7304( 2)	OH2	0.1849( 3)	0.6810( 3)	0.8577( 3)
C(40)	-0.1875( 2)	0.9030( 2)	0.7094( 2)	CH2	0.2693( 7)	0.6949(10)	0.8794( 8)
C(12)	-0.2764( 2)	0.7553( 2)	0.6533( 2)	OH3	-0.2067( 4)	1.0886( 4)	0.7843( 4)
O(15)	-0.2308( 2)	0.9464( 2)	0.7400( 2)	CH3	-0.2753( 7)	1.1193( 9)	0.8104( 9)
O(4)	-0.3397( 2)	0.7665( 2)	0.6704( 2)	CH4	-0.5350( 4)	0.4746( 5)	0.5866( 4)
N(2)	-0.2006( 2)	0.7706( 2)	0.6761( 2)	CH4	-0.5642( 7)	0.5461( 6)	0.5617( 5)
C(13)	-0.2799( 3)	0.6905( 2)	0.6030( 2)	OH5	-0.3882( 5)	0.9356( 6)	0.8019( 4)
N(3)	-0.2069( 2)	0.6957( 2)	0.5576( 1)	CH5	-0.4363( 9)	0.9369(13)	0.7494( 8)
C(18)	-0.2007( 3)	0.7516( 2)	0.5148( 2)	OH6	-0.4119(26)	0.3295(22)	0.6732(20)
O(7)	-0.2565( 2)	0.7974( 2)	0.5065( 2)	CH6	-0.3669(27)	0.3225(25)	0.7333(23)
C(19)	-0.1226( 3)	0.7537( 2)	0.4722( 2)				
N(4)	-0.0464( 2)	0.7221( 2)	0.5025( 1)				
C(22)	-0.0027( 3)	0.6716( 3)	0.4578( 2)				
C(21)	-0.0428( 3)	0.6882( 3)	0.3901( 2)				
C(23)	-0.0144( 2)	0.7509( 2)	0.5585( 2)				
O(9)	-0.0518( 2)	0.8007( 1)	0.5880( 1)				
C(24)	0.0685( 3)	0.7193( 2)	0.5840( 2)				
C(25)	0.0585( 3)	0.6417( 2)	0.6138( 2)				
C(26)	-0.0050( 3)	0.6392( 2)	0.6686( 2)				
O(10)	-0.0797( 2)	0.6496( 2)	0.6574( 2)				
N(5)	0.1051( 2)	0.7704( 2)	0.6319( 1)				
C(27)	0.1335( 3)	0.8343( 2)	0.6103( 2)				
O(11)	0.1408( 2)	0.8479( 2)	0.5512( 1)				
C(28)	0.1561( 3)	0.8928( 2)	0.6619( 2)				
N(6)	0.1724( 2)	0.9610( 2)	0.6286( 2)				
N(9)	-0.1363( 2)	0.9228( 2)	0.6601( 2)				
C(8)	-0.0998( 3)	0.9663( 3)	0.9657( 2)				
C(5)	-0.2107( 3)	0.8770( 3)	0.8911( 2)				
C(14)	-0.2832( 3)	0.6159( 2)	0.6381( 2)				
C(16)	-0.3202( 3)	0.5582( 2)	0.5904( 2)				
O(5)	-0.2780( 2)	0.5529( 1)	0.5287( 1)				
O(8)	-0.0057( 2)	0.7511( 2)	0.3598( 2)				
C(30)	0.2429( 3)	0.9979( 3)	0.6321( 2)				
C(31)	0.2431( 3)	1.0732( 3)	0.5984( 3)				
N(7)	0.1656( 3)	1.0909( 2)	0.5643( 2)				
C(32)	0.0984( 3)	1.1157( 2)	0.5975( 2)				
O(13)	0.1003( 2)	1.1279( 2)	0.6573( 1)				
C(33)	0.0188( 3)	1.1255( 2)	0.5568( 2)				
C(34)	0.0014( 4)	1.2089( 2)	0.5440( 3)				
C(35)	0.0793( 5)	1.2441( 3)	0.5127( 4)				
C(15)	-0.3348( 5)	0.6193( 3)	0.7012( 3)				
O(14)	0.0018( 2)	0.9796( 2)	0.5935( 2)				
N(10)	0.0239( 3)	0.6245( 3)	0.7284( 2)				
C(38)	-0.0561( 3)	1.0226( 2)	0.6067( 2)				
O(12)	0.3060( 2)	0.9773( 2)	0.6626( 2)				
O(6)	-0.3652( 3)	0.4302( 2)	0.5800( 2)				
C(9)	-0.1681( 4)	1.0474( 4)	1.0685( 3)				
N(8)	-0.0524( 3)	1.0944( 2)	0.5923( 2)				
C(39)	-0.1342( 3)	1.0010( 3)	0.6423( 3)				
C(17)	-0.3180( 5)	0.4805( 3)	0.6197( 3)				

\*W=water, M=methanol, occupancy of H6 is 0.25.

Table S6. Bond lengths (Å) (S-sulfoxide 4)

O(1) -S	1.492( 4)	C(1) -S	1.770( 5)
C(29) -S	1.792( 5)	C(1) -N(1)	1.370( 6)
C(4) -N(1)	1.351( 7)	C(2) -C(1)	1.374( 7)
C(3) -C(2)	1.437( 7)	C(10) -C(2)	1.505( 7)
C(4) -C(3)	1.392( 7)	C(5) -C(3)	1.410( 7)
C(8) -C(4)	1.433( 7)	C(28) -C(29)	1.549( 7)
C(11) -C(10)	1.543( 7)	C(40) -C(11)	1.534( 7)
N(2) -C(11)	1.465( 6)	O(15) -C(40)	1.217( 6)
N(9) -C(40)	1.338( 6)	O(4) -C(12)	1.206( 6)
N(2) -C(12)	1.319( 6)	C(13) -C(12)	1.561( 7)
N(3) -C(13)	1.483( 6)	C(14) -C(13)	1.536( 7)
C(18) -N(3)	1.342( 6)	O(7) -C(18)	1.229( 6)
C(19) -C(18)	1.511( 7)	N(4) -C(19)	1.474( 6)
C(20) -C(19)	1.534( 7)	C(22) -N(4)	1.467( 7)
C(23) -N(4)	1.348( 6)	C(21) -C(22)	1.542( 8)
O(8) -C(21)	1.429( 8)	C(20) -C(21)	1.525( 8)
O(9) -C(23)	1.239( 6)	C(24) -C(23)	1.527( 7)
C(25) -C(24)	1.548( 7)	N(5) -C(24)	1.465( 6)
C(26) -C(25)	1.500( 7)	O(10) -C(26)	1.223( 6)
N(10) -C(26)	1.322( 7)	C(27) -N(5)	1.325( 6)
O(11) -C(27)	1.229( 6)	C(28) -C(27)	1.536( 7)
N(6) -C(28)	1.439( 6)	C(30) -N(6)	1.309( 7)
C(39) -N(9)	1.472( 7)	C(7) -C(8)	1.366( 9)
C(6) -C(5)	1.373( 8)	C(16) -C(14)	1.544( 7)
C(15) -C(14)	1.519( 9)	O(5) -C(16)	1.421( 6)
C(17) -C(16)	1.537( 8)	C(31) -C(30)	1.535( 8)
O(12) -C(30)	1.235( 7)	N(7) -C(31)	1.447( 8)
C(32) -N(7)	1.341( 7)	O(13) -C(32)	1.231( 6)
C(33) -C(32)	1.520( 8)	C(34) -C(33)	1.568( 7)
N(8) -C(33)	1.455( 7)	C(35) -C(34)	1.533(11)
C(36) -C(34)	1.544(11)	C(38) -O(14)	1.237( 6)
N(8) -C(38)	1.343( 7)	C(39) -C(38)	1.488( 8)
C(17) -O(6)	1.430( 8)	O(03) -C(9)	1.426( 9)
C(37) -C(36)	1.569(13)	C(7) -C(6)	1.410( 8)
O(03) -C(7)	1.361( 7)		

Table S7. Bond angles (S-sulfoxide 4)

C(1) -S -O(1)	109.3( 2)	C(29) -S -O(1)	105.0( 2)
C(29) -S -C(1)	99.6( 2)	C(4) -N(1) -C(1)	107.6( 4)
N(1) -C(1) -S	116.1( 4)	C(2) -C(1) -S	132.8( 4)
C(2) -C(1) -N(1)	110.8( 4)	C(3) -C(2) -C(1)	105.4( 4)
C(10) -C(2) -C(1)	126.9( 5)	C(10) -C(2) -C(3)	127.6( 5)
C(4) -C(3) -C(2)	106.5( 4)	C(5) -C(3) -C(2)	134.5( 5)
C(5) -C(3) -C(4)	119.0( 5)	C(3) -C(4) -N(1)	109.7( 4)
C(8) -C(4) -N(1)	128.2( 5)	C(8) -C(4) -C(3)	122.0( 5)
C(28) -C(29) -S	113.6( 3)	C(11) -C(10) -C(2)	114.7( 4)
C(40) -C(11) -C(10)	112.6( 4)	N(2) -C(11) -C(10)	108.6( 4)
N(2) -C(11) -C(40)	114.1( 4)	O(15) -C(40) -C(11)	119.1( 4)
N(9) -C(40) -C(11)	117.5( 4)	N(9) -C(40) -O(15)	123.3( 4)
N(2) -C(12) -O(4)	124.1( 5)	C(13) -C(12) -O(4)	121.0( 4)
C(13) -C(12) -N(2)	114.9( 4)	C(12) -N(2) -C(11)	122.4( 4)
N(3) -C(13) -C(12)	109.1( 4)	C(14) -C(13) -C(12)	111.3( 4)
C(14) -C(13) -N(2)	111.7( 4)	C(18) -N(3) -C(13)	120.4( 4)
O(7) -C(18) -N(3)	123.4( 5)	C(19) -C(18) -N(3)	116.6( 4)
C(19) -C(18) -O(7)	119.8( 4)	N(4) -C(19) -C(18)	115.2( 4)
C(20) -C(19) -C(18)	112.2( 4)	C(20) -C(19) -N(4)	103.0( 4)
C(22) -N(4) -C(19)	112.2( 4)	C(23) -N(4) -C(19)	120.5( 4)
C(23) -N(4) -C(22)	125.8( 4)	C(21) -C(22) -N(4)	103.3( 4)
O(8) -C(21) -C(22)	111.7( 5)	C(20) -C(21) -C(22)	102.4( 4)
C(20) -C(21) -O(8)	107.2( 5)	O(9) -C(23) -N(4)	120.7( 4)
C(24) -C(23) -N(4)	117.6( 4)	C(24) -C(23) -O(9)	121.7( 4)
C(25) -C(24) -C(23)	112.8( 4)	N(5) -C(24) -C(23)	109.0( 4)
N(5) -C(24) -C(25)	111.4( 4)	C(26) -C(25) -C(24)	112.6( 4)
O(10) -C(26) -C(25)	120.7( 5)	N(10) -C(26) -C(25)	116.7( 5)
N(10) -C(26) -O(10)	122.6( 5)	C(27) -N(5) -C(24)	118.5( 4)
O(11) -C(27) -N(5)	122.1( 4)	C(28) -C(27) -N(5)	117.8( 4)
C(28) -C(27) -O(11)	120.1( 4)	C(27) -C(28) -C(29)	112.4( 4)
N(6) -C(28) -C(29)	108.2( 4)	N(6) -C(28) -C(27)	108.9( 4)
C(30) -N(6) -C(28)	125.0( 4)	C(39) -N(9) -C(40)	117.2( 4)
C(7) -C(8) -C(4)	117.2( 5)	C(6) -C(5) -C(3)	118.9( 5)
C(16) -C(14) -C(13)	109.1( 4)	C(15) -C(14) -C(13)	111.7( 5)
C(15) -C(14) -C(16)	110.4( 5)	O(5) -C(16) -C(14)	114.6( 4)
C(17) -C(16) -C(14)	112.3( 4)	C(17) -C(16) -O(5)	105.3( 4)
C(31) -C(30) -N(6)	116.0( 5)	O(12) -C(30) -N(6)	124.3( 6)
O(12) -C(30) -C(31)	119.6( 5)	N(7) -C(31) -C(30)	114.2( 5)
C(32) -N(7) -C(31)	120.9( 5)	O(13) -C(32) -N(7)	122.3( 5)
C(33) -C(32) -N(7)	115.4( 4)	C(33) -C(32) -O(13)	122.2( 5)
C(34) -C(33) -C(32)	110.5( 4)	N(8) -C(33) -C(32)	109.4( 4)
N(8) -C(33) -C(34)	108.9( 5)	C(35) -C(34) -C(33)	109.4( 5)
C(36) -C(34) -C(33)	109.2( 5)	C(36) -C(34) -C(35)	111.5( 6)
N(8) -C(38) -C(39)	122.6( 5)	C(39) -C(38) -O(14)	123.8( 5)
C(39) -C(38) -N(8)	113.6( 5)	C(38) -N(8) -C(33)	121.4( 5)
C(38) -C(39) -N(9)	113.2( 5)	O(6) -C(17) -C(16)	111.4( 5)
C(21) -C(20) -C(19)	103.9( 4)	C(37) -C(36) -C(34)	111.3( 7)
C(7) -C(6) -C(5)	121.6( 5)	C(6) -C(7) -C(8)	121.1( 5)
O(03) -C(7) -C(8)	123.5( 5)	O(03) -C(7) -C(6)	115.3( 5)
C(7) -O(03) -C(9)	116.9( 5)		

Table S8. Dihedral angles (S-sulfone 4)

O1 --S --C1 --C2	-37.51	C24 --N5 --C27 --O11	-10.12
O1 --S --C29 --C28	-60.83	C24 --N5 --C27 --C20	168.69
C1 --S --C29 --C28	-173.91	C25 --C24 --N5 --C27	166.34
S --C29 --C28 --N6	-138.83	C26 --C25 --C24 --N5	66.34
S --C29 --C28 --C27	100.83	N5 --C27 --C28 --C29	-50.90
S --C1 --C2 --C10	-3.51	N5 --C27 --C28 --N6	-170.82
C1 --C2 --C10 --C11	-134.81	O11 --C27 --C28 --C29	127.94
N1 --C1 --C2 --C10	-177.08	O11 --C27 --C28 --N6	8.01
N1 --C1 --S --C29	-114.53	C27 --C28 --C29 --S	100.83
C2 --C10 --C11 --C40	46.74	C27 --C28 --N6 --C30	-121.83
C2 --C10 --C11 --N2	173.71	C28 --N6 --C30 --O12	3.02
C10 --C11 --N2 --C12	152.89	C28 --N6 --C30 --C31	-173.91
C10 --C11 --C40 --O15	-105.97	N6 --C30 --C31 --N7	-3.02
C10 --C11 --C40 --N9	70.41	N6 --C28 --C29 --S	-138.83
C11 --N2 --C12 --O4	6.72	O12 --C30 --C31 --N7	179.89
C11 --N2 --C12 --C13	-171.03	C30 --C31 --N7 --C32	80.19
N2 --C12 --C13 --N3	-40.93	C31 --N7 --C32 --O13	3.59
N2 --C12 --C13 --C14	83.15	C31 --N7 --C32 --C33	-174.71
O4 --C12 --C13 --C14	-94.68	N7 --C32 --C33 --C34	-106.11
O4 --C12 --C13 --N3	141.24	N7 --C32 --C33 --N8	134.06
C12 --C13 --C14 --C15	36.02	O13 --C32 --C33 --C34	75.59
C12 --C13 --C14 --C16	158.38	O13 --C32 --C33 --N8	-44.24
C12 --C13 --N3 --C18	-66.61	C32 --C33 --C34 --C35	54.39
C13 --C14 --C16 --O5	54.58	C32 --C33 --C24 --C36	-175.12
C13 --C14 --C16 --C17	174.75	C32 --C33 --N8 --C38	-62.63
C13 --N3 --C18 --O7	-6.26	C33 --C34 --C36 --C37	161.95
C13 --N3 --C18 --C19	177.93	C33 --N8 --C38 --O14	3.29
C14 --C16 --C17 --O6	170.08	C33 --N8 --C38 --C39	-179.16
C14 --C13 --N3 --C18	169.25	C34 --C33 --N8 --C38	176.53
C15 --C14 --C16 --O5	177.74	C35 --C34 --C36 --C37	-77.04
C15 --C14 --C16 --C17	-62.09	C35 --C34 --C33 --N8	174.52
C15 --C14 --C13 --N3	158.63	C36 --C34 --C33 --N8	-63.23
O5 --C16 --C17 --O6	-64.49	N8 --C38 --C39 --N9	-177.84
C16 --C14 --C13 --N3	-79.01	O14 --C38 --C39 --N9	-0.33
N3 --C18 --C19 --C20	96.99	C38 --C39 --N9 --C40	158.39
N3 --C18 --C19 --N4	-30.52	C39 --N9 --C40 --O15	-0.88
C18 --C19 --C20 --C21	-154.92	C39 --N9 --C40 --C11	-177.10
C18 --C19 --N4 --C23	-61.12	N9 --C40 --C11 --O2	-53.22
C18 --C19 --N4 --C22	132.33	O15 --C40 --C11 --N2	130.40
O7 --C18 --C19 --C20	-88.99	C40 --C11 --N2 --C12	-81.02
O7 --C18 --C19 --N4	153.51	C9 --O03 --C7 --C6	-168.86
C19 --C20 --C21 --O8	-78.45	C9 --O03 --C7 --C8	10.68
C19 --C20 --C21 --C22	39.22		
C19 --N4 --C22 --C21	14.44		
C19 --N4 --C23 --O9	5.42		
C19 --N4 --C23 --C24	-175.20		
C20 --C19 --N4 --C22	9.77		
C20 --C19 --N4 --C23	176.32		
C20 --C21 --C22 --N4	-32.70		
C21 --C22 --N4 --C23	-151.25		
N8 --C21 --C22 --N4	81.75		
C22 --N4 --C23 --O9	170.01		
C22 --N4 --C23 --C24	-10.61		
N4 --C23 --C24 --C25	-72.37		
N4 --C23 --C24 --N5	163.26		
O9 --C23 --C24 --C25	107.01		
O9 --C23 --C24 --N5	-17.37		
C23 --C24 --C25 --C26	-56.71		
C23 --C24 --N5 --C27	-68.45		
C24 --C25 --C26 --O10	67.08		
C24 --C25 --C26 --N10	-113.93		

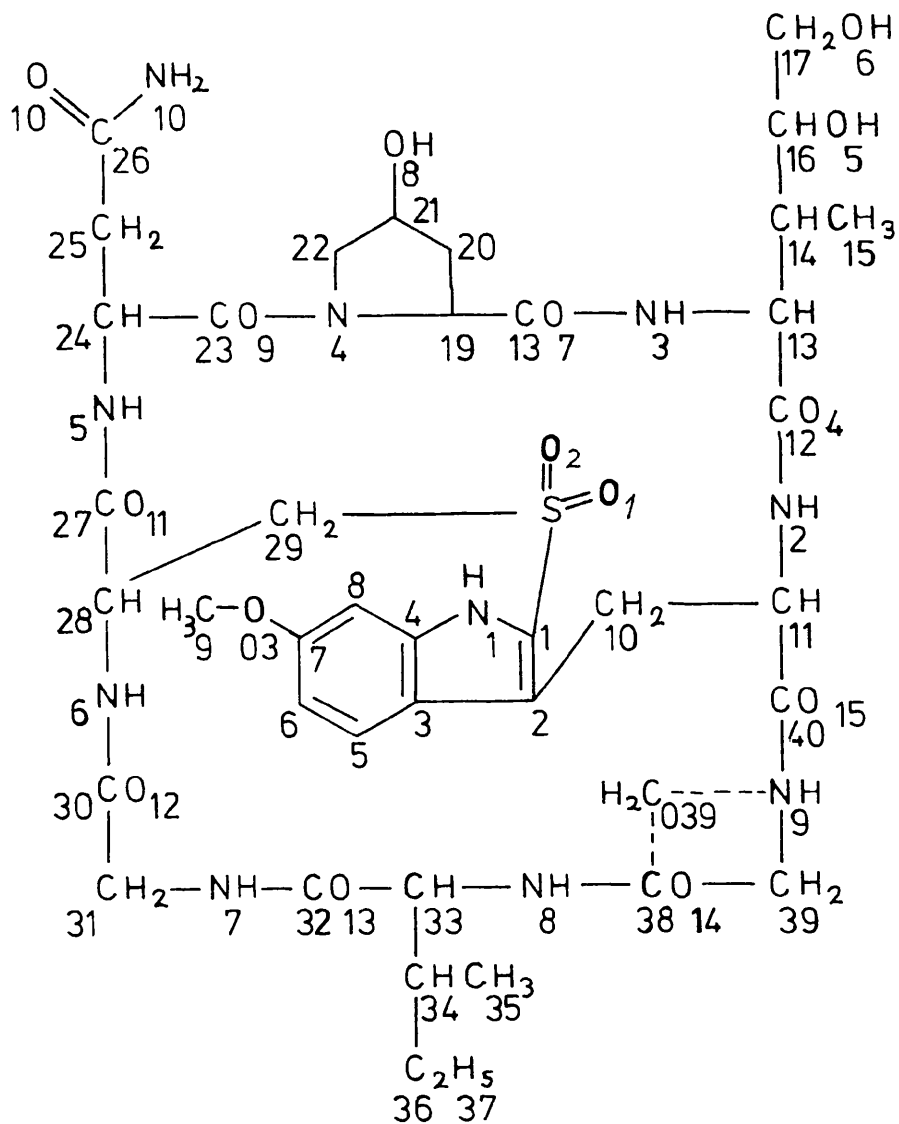


Figure S1. Numbering scheme for the crystallographic structure of molecules 4 and 5.