Supplementary Material

Synthesis and antimitotic properties of *ortho*-substituted polymethoxydiarylazolopyrimidines

Natalia B. Chernyshova,[a] Dmitry V. Tsyganov,[a] Victor N. Khrustalev,[b,c] Mikhail M. Raihstat,[a] Leonid D. Konyushkin,[a] Roman V. Semenov,[a] Marina N. Semenova,[d] and Victor V. Semenov*[a]

[a]N. D. Zelinsky Institute of Organic Chemistry RAS, 47 Leninsky Prospect, 119991 Moscow, Russian Federation

[b]A. N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds, 28 Vavilov Street, 119991 Moscow, Russian Federation

[c]Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), Moscow, Russian Federation

[d]N. K. Koltzov Institute of Developmental Biology RAS, 26 Vavilov Street, 119334 Moscow, Russian Federation

E-mail: vs@zelinsky.ru

Dedicated to Professor Oleg A. Rakitin on the occasion of his 65th birthday

Table of Contents

Crystal data for structure **9** S2

Table S1. Crystal data and structure refinement for ***9***.

Identification code	**9**	
Empirical formula	C21 H20 N4 O4	
Formula weight	392.41	
Temperature	120(2) K	
Wavelength	0.71073 Å	
Crystal system	Triclinic	
Space group	P-1	
Unit cell dimensions	a = 11.0658(7) Å	□ = 94.490(1)°.
	b = 12.6659(8) Å	□ = 101.040(1)°.
	c = 13.8403(9) Å	□ = 90.963(1)°.
Volume	1897.1(2) $Å^3$	
Z	4	
Density (calculated)	1.374 Mg/m^3	
Absorption coefficient	0.097 mm^{-1}	
F(000)	824	
Crystal size	0.18 x 0.15 x 0.12 mm^3	
Theta range for data collection	1.876 to 30.000°.	
Index ranges	-15<=h<=15, -17<=k<=17, -19<=l<=19	
Reflections collected	25375	
Independent reflections	11062 [R(int) = 0.0397]	
Completeness to theta = 25.242°	100.0 %	
Absorption correction	Semi-empirical from equivalents	
Max. and min. transmission	0.980 and 0.975	
Refinement method	Full-matrix least-squares on F^2	
Data / restraints / parameters	11062 / 2 / 535	
Goodness-of-fit on F^2	1.010	
Final R indices [for 7812 rflns with I>2σ(I)]	R1 = 0.0489, wR2 = 0.1216	
R indices (all data)	R1 = 0.0747, wR2 = 0.1318	
Extinction coefficient	n/a	
Largest diff. peak and hole	0.406 and -0.457 $e.Å^{-3}$	

Table S2. Atomic coordinates (x 10^4) and equivalent isotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for ***Sem5***. U(eq) is defined as one third of the trace of the orthogonalized U^{ij} tensor.

Atom	x	y	z	U(eq)
O(1)	11021(1)	2112(1)	-411(1)	31(1)
O(2)	6745(1)	4783(1)	832(1)	25(1)
O(3)	7588(1)	5945(1)	2566(1)	26(1)
O(4)	8154(1)	5039(1)	4263(1)	25(1)
N(1)	5715(1)	1544(1)	3696(1)	22(1)
C(2)	5247(1)	724(1)	4061(1)	24(1)
N(3)	5578(1)	-256(1)	3763(1)	24(1)
C(3A)	6332(1)	-41(1)	3151(1)	19(1)
N(4)	6948(1)	-718(1)	2639(1)	22(1)
C(5)	7631(1)	-281(1)	2088(1)	21(1)
C(6)	7775(1)	831(1)	2004(1)	18(1)
C(7)	7130(1)	1511(1)	2534(1)	17(1)
N(8)	6426(1)	1045(1)	3103(1)	18(1)
C(9)	8633(1)	1205(1)	1394(1)	18(1)
C(10)	8542(1)	772(1)	421(1)	21(1)
C(11)	9342(1)	1095(1)	-157(1)	23(1)
C(12)	10269(1)	1853(1)	226(1)	22(1)
C(13)	10392(1)	2288(1)	1201(1)	22(1)
C(14)	9570(1)	1960(1)	1769(1)	21(1)
C(15)	12132(2)	2711(1)	15(1)	39(1)
C(16)	7173(1)	2681(1)	2545(1)	18(1)
C(17)	6871(1)	3148(1)	1659(1)	18(1)
C(18)	6994(1)	4246(1)	1663(1)	19(1)
C(19)	7411(1)	4866(1)	2550(1)	19(1)
C(20)	7724(1)	4378(1)	3435(1)	19(1)
C(21)	7592(1)	3286(1)	3438(1)	19(1)
C(22)	6328(2)	4166(1)	-83(1)	36(1)
C(23)	6479(2)	6517(1)	2330(1)	30(1)
C(24)	8510(2)	4551(1)	5170(1)	32(1)
O(1A)	-701(1)	8059(1)	5680(1)	27(1)
O(2A)	4622(1)	5617(1)	4027(1)	26(1)
O(3A)	2946(1)	4217(1)	2909(1)	23(1)
O(4A)	1110(1)	4873(1)	1550(1)	29(1)
N(1A)	4057(1)	8427(1)	1215(1)	22(1)
C(2A)	4561(1)	9208(1)	823(1)	24(1)
N(3A)	4254(1)	10211(1)	1076(1)	23(1)

C(3B)	3482(1)	10056(1)	1686(1)	19(1)
N(4A)	2860(1)	10775(1)	2150(1)	22(1)
C(5A)	2153(1)	10387(1)	2713(1)	20(1)
C(6A)	2016(1)	9295(1)	2868(1)	17(1)
C(7A)	2647(1)	8574(1)	2376(1)	16(1)
N(8A)	3356(1)	8982(1)	1782(1)	17(1)
C(9A)	1262(1)	8965(1)	3577(1)	17(1)
C(10A)	1574(1)	9347(1)	4574(1)	19(1)
C(11A)	897(1)	9035(1)	5250(1)	20(1)
C(12A)	-105(1)	8327(1)	4948(1)	19(1)
C(13A)	-444(1)	7949(1)	3958(1)	23(1)
C(14A)	243(1)	8272(1)	3284(1)	21(1)
C(15A)	-1875(2)	7519(1)	5366(1)	34(1)
C(16A)	2694(1)	7422(1)	2493(1)	17(1)
C(17A)	3646(1)	7092(1)	3199(1)	18(1)
C(18A)	3740(1)	6018(1)	3338(1)	19(1)
C(19A)	2894(1)	5279(1)	2757(1)	18(1)
C(20A)	1926(1)	5634(1)	2070(1)	19(1)
C(21A)	1822(1)	6708(1)	1930(1)	20(1)
C(22A)	5358(2)	6371(1)	4735(1)	34(1)
C(23A)	3945(1)	3692(1)	2556(1)	27(1)
C(24A)	-116(2)	5197(2)	1201(2)	41(1)
C(24B)	-106(4)	4940(7)	1730(8)	41(1)

Table S3. Bond lengths [Å] and angles [°] for ***Sem5***.

O(1)-C(12)	1.3765(17)	C(18)-C(19)	1.3988(18)
O(1)-C(15)	1.4344(19)	C(19)-C(20)	1.4030(18)
O(2)-C(18)	1.3665(15)	C(20)-C(21)	1.3891(17)
O(2)-C(22)	1.4271(17)	C(21)-H(21)	0.9500
O(3)-C(19)	1.3745(15)	C(22)-H(22A)	0.9800
O(3)-C(23)	1.4315(17)	C(22)-H(22B)	0.9800
O(4)-C(20)	1.3670(15)	C(22)-H(22C)	0.9800
O(4)-C(24)	1.4331(17)	C(23)-H(23A)	0.9800
N(1)-C(2)	1.3286(17)	C(23)-H(23B)	0.9800
N(1)-N(8)	1.3694(15)	C(23)-H(23C)	0.9800
C(2)-N(3)	1.3562(18)	C(24)-H(24A)	0.9800
C(2)-H(2)	0.9500	C(24)-H(24B)	0.9800
N(3)-C(3A)	1.3363(18)	C(24)-H(24C)	0.9800
C(3A)-N(4)	1.3452(17)	O(1A)-C(12A)	1.3707(16)
C(3A)-N(8)	1.3859(16)	O(1A)-C(15A)	1.4325(18)
N(4)-C(5)	1.3165(18)	O(2A)-C(18A)	1.3625(15)
C(5)-C(6)	1.4305(17)	O(2A)-C(22A)	1.4343(17)
C(5)-H(5)	0.9500	O(3A)-C(19A)	1.3789(14)
C(6)-C(7)	1.3824(18)	O(3A)-C(23A)	1.4437(17)
C(6)-C(9)	1.4815(18)	O(4A)-C(20A)	1.3687(15)
C(7)-N(8)	1.3668(16)	O(4A)-C(24B)	1.417(3)
C(7)-C(16)	1.4802(17)	O(4A)-C(24A)	1.4290(18)
C(9)-C(14)	1.3933(18)	N(1A)-C(2A)	1.3278(18)
C(9)-C(10)	1.3978(18)	N(1A)-N(8A)	1.3698(15)
C(10)-C(11)	1.379(2)	C(2A)-N(3A)	1.3576(18)
C(10)-H(10)	0.9500	C(2A)-H(2A)	0.9500
C(11)-C(12)	1.391(2)	N(3A)-C(3B)	1.3341(17)
C(11)-H(11)	0.9500	C(3B)-N(4A)	1.3473(17)
C(12)-C(13)	1.3970(19)	C(3B)-N(8A)	1.3849(16)
C(13)-C(14)	1.3887(19)	N(4A)-C(5A)	1.3186(17)
C(13)-H(13)	0.9500	C(5A)-C(6A)	1.4265(17)
C(14)-H(14)	0.9500	C(5A)-H(5A)	0.9500
C(15)-H(15A)	0.9800	C(6A)-C(7A)	1.3747(18)
C(15)-H(15B)	0.9800	C(6A)-C(9A)	1.4835(18)
C(15)-H(15C)	0.9800	C(7A)-N(8A)	1.3640(16)
C(16)-C(17)	1.3894(18)	C(7A)-C(16A)	1.4813(17)
C(16)-C(21)	1.3961(17)	C(9A)-C(14A)	1.3934(18)
C(17)-C(18)	1.3940(17)	C(9A)-C(10A)	1.4018(17)
C(17)-H(17)	0.9500	C(10A)-C(11A)	1.3805(18)

C(10A)-H(10A)	0.9500	N(3)-C(3A)-N(4)	128.76(12)
C(11A)-C(12A)	1.3925(18)	N(3)-C(3A)-N(8)	109.47(11)
C(11A)-H(11A)	0.9500	N(4)-C(3A)-N(8)	121.77(12)
C(12A)-C(13A)	1.3935(18)	C(5)-N(4)-C(3A)	115.67(11)
C(13A)-C(14A)	1.3922(19)	N(4)-C(5)-C(6)	125.67(12)
C(13A)-H(13A)	0.9500	N(4)-C(5)-H(5)	117.2
C(14A)-H(14A)	0.9500	C(6)-C(5)-H(5)	117.2
C(15A)-H(15D)	0.9800	C(7)-C(6)-C(5)	117.65(12)
C(15A)-H(15E)	0.9800	C(7)-C(6)-C(9)	123.02(11)
C(15A)-H(15F)	0.9800	C(5)-C(6)-C(9)	119.29(11)
C(16A)-C(17A)	1.3867(18)	N(8)-C(7)-C(6)	115.97(11)
C(16A)-C(21A)	1.3891(17)	N(8)-C(7)-C(16)	118.79(11)
C(17A)-C(18A)	1.3915(17)	C(6)-C(7)-C(16)	125.22(12)
C(17A)-H(17A)	0.9500	C(7)-N(8)-N(1)	127.05(10)
C(18A)-C(19A)	1.4011(18)	C(7)-N(8)-C(3A)	123.27(11)
C(19A)-C(20A)	1.3957(18)	N(1)-N(8)-C(3A)	109.68(11)
C(20A)-C(21A)	1.3922(17)	C(14)-C(9)-C(10)	118.05(12)
C(21A)-H(21A)	0.9500	C(14)-C(9)-C(6)	121.97(11)
C(22A)-H(22D)	0.9800	C(10)-C(9)-C(6)	119.94(12)
C(22A)-H(22E)	0.9800	C(11)-C(10)-C(9)	121.07(12)
C(22A)-H(22F)	0.9800	C(11)-C(10)-H(10)	119.5
C(23A)-H(23D)	0.9800	C(9)-C(10)-H(10)	119.5
C(23A)-H(23E)	0.9800	C(10)-C(11)-C(12)	120.19(12)
C(23A)-H(23F)	0.9800	C(10)-C(11)-H(11)	119.9
C(24A)-H(24D)	0.9800	C(12)-C(11)-H(11)	119.9
C(24A)-H(24E)	0.9800	O(1)-C(12)-C(11)	115.42(12)
C(24A)-H(24F)	0.9800	O(1)-C(12)-C(13)	124.69(13)
C(24B)-H(24G)	0.9800	C(11)-C(12)-C(13)	119.89(13)
C(24B)-H(24H)	0.9800	C(14)-C(13)-C(12)	119.07(13)
C(24B)-H(24I)	0.9800	C(14)-C(13)-H(13)	120.5
C(12)-O(1)-C(15)	116.63(11)	C(12)-C(13)-H(13)	120.5
C(18)-O(2)-C(22)	116.88(10)	C(13)-C(14)-C(9)	121.71(12)
C(19)-O(3)-C(23)	114.62(11)	C(13)-C(14)-H(14)	119.1
C(20)-O(4)-C(24)	116.69(10)	C(9)-C(14)-H(14)	119.1
C(2)-N(1)-N(8)	101.29(11)	O(1)-C(15)-H(15A)	109.5
N(1)-C(2)-N(3)	117.29(13)	O(1)-C(15)-H(15B)	109.5
N(1)-C(2)-H(2)	121.4	H(15A)-C(15)-H(15B)	109.5
N(3)-C(2)-H(2)	121.4	O(1)-C(15)-H(15C)	109.5
C(3A)-N(3)-C(2)	102.27(11)	H(15A)-C(15)-H(15C)	109.5

H(15B)-C(15)-H(15C)	109.5	C(19A)-O(3A)-C(23A)	113.76(10)
C(17)-C(16)-C(21)	121.47(11)	C(20A)-O(4A)-C(24B)	114.8(4)
C(17)-C(16)-C(7)	119.22(11)	C(20A)-O(4A)-C(24A)	116.66(12)
C(21)-C(16)-C(7)	119.18(11)	C(2A)-N(1A)-N(8A)	101.13(11)
C(16)-C(17)-C(18)	119.17(12)	N(1A)-C(2A)-N(3A)	117.32(13)
C(16)-C(17)-H(17)	120.4	N(1A)-C(2A)-H(2A)	121.3
C(18)-C(17)-H(17)	120.4	N(3A)-C(2A)-H(2A)	121.3
O(2)-C(18)-C(17)	123.91(12)	C(3B)-N(3A)-C(2A)	102.29(11)
O(2)-C(18)-C(19)	115.83(11)	N(3A)-C(3B)-N(4A)	128.93(12)
C(17)-C(18)-C(19)	120.25(12)	N(3A)-C(3B)-N(8A)	109.42(11)
O(3)-C(19)-C(18)	121.25(12)	N(4A)-C(3B)-N(8A)	121.63(12)
O(3)-C(19)-C(20)	118.94(12)	C(5A)-N(4A)-C(3B)	115.52(11)
C(18)-C(19)-C(20)	119.71(11)	N(4A)-C(5A)-C(6A)	125.55(12)
O(4)-C(20)-C(21)	123.75(12)	N(4A)-C(5A)-H(5A)	117.2
O(4)-C(20)-C(19)	115.92(11)	C(6A)-C(5A)-H(5A)	117.2
C(21)-C(20)-C(19)	120.33(12)	C(7A)-C(6A)-C(5A)	117.90(12)
C(20)-C(21)-C(16)	119.06(12)	C(7A)-C(6A)-C(9A)	121.62(11)
C(20)-C(21)-H(21)	120.5	C(5A)-C(6A)-C(9A)	120.41(11)
C(16)-C(21)-H(21)	120.5	N(8A)-C(7A)-C(6A)	116.07(11)
O(2)-C(22)-H(22A)	109.5	N(8A)-C(7A)-C(16A)	117.80(11)
O(2)-C(22)-H(22B)	109.5	C(6A)-C(7A)-C(16A)	125.96(12)
H(22A)-C(22)-H(22B)	109.5	C(7A)-N(8A)-N(1A)	126.88(10)
O(2)-C(22)-H(22C)	109.5	C(7A)-N(8A)-C(3B)	123.27(11)
H(22A)-C(22)-H(22C)	109.5	N(1A)-N(8A)-C(3B)	109.85(10)
H(22B)-C(22)-H(22C)	109.5	C(14A)-C(9A)-C(10A)	118.24(12)
O(3)-C(23)-H(23A)	109.5	C(14A)-C(9A)-C(6A)	121.85(11)
O(3)-C(23)-H(23B)	109.5	C(10A)-C(9A)-C(6A)	119.91(11)
H(23A)-C(23)-H(23B)	109.5	C(11A)-C(10A)-C(9A)	120.84(12)
O(3)-C(23)-H(23C)	109.5	C(11A)-C(10A)-H(10A)	119.6
H(23A)-C(23)-H(23C)	109.5	C(9A)-C(10A)-H(10A)	119.6
H(23B)-C(23)-H(23C)	109.5	C(10A)-C(11A)-C(12A)	120.22(12)
O(4)-C(24)-H(24A)	109.5	C(10A)-C(11A)-H(11A)	119.9
O(4)-C(24)-H(24B)	109.5	C(12A)-C(11A)-H(11A)	119.9
H(24A)-C(24)-H(24B)	109.5	O(1A)-C(12A)-C(11A)	115.46(11)
O(4)-C(24)-H(24C)	109.5	O(1A)-C(12A)-C(13A)	124.54(12)
H(24A)-C(24)-H(24C)	109.5	C(11A)-C(12A)-C(13A)	119.99(12)
H(24B)-C(24)-H(24C)	109.5	C(14A)-C(13A)-C(12A)	119.22(12)
C(12A)-O(1A)-C(15A)	116.45(11)	C(14A)-C(13A)-H(13A)	120.4
C(18A)-O(2A)-C(22A)	116.47(10)	C(12A)-C(13A)-H(13A)	120.4

C(13A)-C(14A)-C(9A)	121.47(12)	C(20A)-C(21A)-H(21A)	120.6
C(13A)-C(14A)-H(14A)	119.3	O(2A)-C(22A)-H(22D)	109.5
C(9A)-C(14A)-H(14A)	119.3	O(2A)-C(22A)-H(22E)	109.5
O(1A)-C(15A)-H(15D)	109.5	H(22D)-C(22A)-H(22E)	109.5
O(1A)-C(15A)-H(15E)	109.5	O(2A)-C(22A)-H(22F)	109.5
H(15D)-C(15A)-H(15E)	109.5	H(22D)-C(22A)-H(22F)	109.5
O(1A)-C(15A)-H(15F)	109.5	H(22E)-C(22A)-H(22F)	109.5
H(15D)-C(15A)-H(15F)	109.5	O(3A)-C(23A)-H(23D)	109.5
H(15E)-C(15A)-H(15F)	109.5	O(3A)-C(23A)-H(23E)	109.5
C(17A)-C(16A)-C(21A)	121.61(11)	H(23D)-C(23A)-H(23E)	109.5
C(17A)-C(16A)-C(7A)	116.70(11)	O(3A)-C(23A)-H(23F)	109.5
C(21A)-C(16A)-C(7A)	121.68(11)	H(23D)-C(23A)-H(23F)	109.5
C(16A)-C(17A)-C(18A)	119.22(12)	H(23E)-C(23A)-H(23F)	109.5
C(16A)-C(17A)-H(17A)	120.4	O(4A)-C(24A)-H(24D)	109.5
C(18A)-C(17A)-H(17A)	120.4	O(4A)-C(24A)-H(24E)	109.5
O(2A)-C(18A)-C(17A)	123.77(12)	H(24D)-C(24A)-H(24E)	109.5
O(2A)-C(18A)-C(19A)	116.03(11)	O(4A)-C(24A)-H(24F)	109.5
C(17A)-C(18A)-C(19A)	120.20(12)	H(24D)-C(24A)-H(24F)	109.5
O(3A)-C(19A)-C(20A)	119.40(11)	H(24E)-C(24A)-H(24F)	109.5
O(3A)-C(19A)-C(18A)	120.97(11)	O(4A)-C(24B)-H(24G)	109.5
C(20A)-C(19A)-C(18A)	119.44(11)	O(4A)-C(24B)-H(24H)	109.5
O(4A)-C(20A)-C(21A)	122.95(12)	H(24G)-C(24B)-H(24H)	109.5
O(4A)-C(20A)-C(19A)	116.41(11)	O(4A)-C(24B)-H(24I)	109.5
C(21A)-C(20A)-C(19A)	120.64(12)	H(24G)-C(24B)-H(24I)	109.5
C(16A)-C(21A)-C(20A)	118.83(12)	H(24H)-C(24B)-H(24I)	109.5
C(16A)-C(21A)-H(21A)	120.6		

Table S4. Anisotropic displacement parameters ($Å^2$ x 10^3) for ***Sem5***. The anisotropic displacement factor exponent takes the form: $-2\pi^2[h^2 a^{*2}U^{11} + ... + 2 h k a^* b^* U^{12}]$

Atom	U^{11}	U^{22}	U^{33}	U^{23}	U^{13}	U^{12}
O(1)	33(1)	36(1)	26(1)	3(1)	12(1)	-5(1)
O(2)	37(1)	17(1)	20(1)	4(1)	5(1)	3(1)
O(3)	30(1)	12(1)	34(1)	2(1)	3(1)	-1(1)
O(4)	35(1)	18(1)	20(1)	-3(1)	1(1)	-2(1)
N(1)	24(1)	21(1)	22(1)	1(1)	8(1)	2(1)
C(2)	24(1)	24(1)	24(1)	5(1)	5(1)	-1(1)
N(3)	26(1)	21(1)	25(1)	6(1)	4(1)	-2(1)
C(3A)	21(1)	14(1)	20(1)	2(1)	-1(1)	-2(1)
N(4)	26(1)	15(1)	24(1)	2(1)	2(1)	0(1)
C(5)	25(1)	15(1)	21(1)	-1(1)	1(1)	3(1)
C(6)	20(1)	15(1)	17(1)	1(1)	-1(1)	0(1)
C(7)	18(1)	15(1)	16(1)	1(1)	1(1)	0(1)
N(8)	20(1)	14(1)	19(1)	2(1)	2(1)	1(1)
C(9)	21(1)	15(1)	17(1)	1(1)	2(1)	4(1)
C(10)	22(1)	20(1)	19(1)	-1(1)	0(1)	1(1)
C(11)	28(1)	26(1)	15(1)	0(1)	1(1)	4(1)
C(12)	25(1)	22(1)	21(1)	5(1)	6(1)	4(1)
C(13)	23(1)	19(1)	24(1)	0(1)	3(1)	-1(1)
C(14)	25(1)	18(1)	19(1)	-2(1)	3(1)	1(1)
C(15)	37(1)	43(1)	41(1)	-1(1)	19(1)	-10(1)
C(16)	19(1)	13(1)	21(1)	1(1)	5(1)	1(1)
C(17)	22(1)	14(1)	19(1)	0(1)	4(1)	1(1)
C(18)	21(1)	17(1)	19(1)	4(1)	4(1)	2(1)
C(19)	21(1)	12(1)	26(1)	1(1)	6(1)	0(1)
C(20)	20(1)	16(1)	20(1)	-2(1)	5(1)	1(1)
C(21)	24(1)	17(1)	17(1)	2(1)	4(1)	1(1)
C(22)	62(1)	27(1)	17(1)	3(1)	5(1)	5(1)
C(23)	37(1)	15(1)	40(1)	1(1)	11(1)	5(1)
C(24)	49(1)	27(1)	19(1)	-2(1)	3(1)	-7(1)
O(1A)	30(1)	30(1)	22(1)	0(1)	10(1)	-6(1)
O(2A)	29(1)	18(1)	27(1)	6(1)	-7(1)	0(1)
O(3A)	26(1)	14(1)	31(1)	5(1)	7(1)	2(1)
O(4A)	24(1)	18(1)	41(1)	-4(1)	-5(1)	-2(1)
N(1A)	23(1)	22(1)	22(1)	1(1)	10(1)	2(1)

C(2A)	24(1)	26(1)	24(1)	4(1)	8(1)	-1(1)
N(3A)	25(1)	24(1)	22(1)	5(1)	6(1)	-2(1)
C(3B)	22(1)	16(1)	18(1)	3(1)	1(1)	-1(1)
N(4A)	26(1)	18(1)	21(1)	3(1)	3(1)	0(1)
C(5A)	26(1)	15(1)	19(1)	1(1)	2(1)	2(1)
C(6A)	20(1)	17(1)	16(1)	2(1)	2(1)	2(1)
C(7A)	16(1)	16(1)	15(1)	2(1)	1(1)	0(1)
N(8A)	20(1)	15(1)	18(1)	2(1)	4(1)	1(1)
C(9A)	19(1)	16(1)	16(1)	2(1)	4(1)	4(1)
C(10A)	18(1)	19(1)	19(1)	1(1)	1(1)	1(1)
C(11A)	22(1)	21(1)	15(1)	0(1)	1(1)	1(1)
C(12A)	22(1)	18(1)	19(1)	3(1)	7(1)	2(1)
C(13A)	23(1)	21(1)	24(1)	-3(1)	5(1)	-2(1)
C(14A)	24(1)	22(1)	17(1)	-2(1)	3(1)	1(1)
C(15A)	38(1)	26(1)	40(1)	-9(1)	22(1)	-13(1)
C(16A)	20(1)	14(1)	18(1)	2(1)	7(1)	1(1)
C(17A)	20(1)	16(1)	19(1)	2(1)	4(1)	-1(1)
C(18A)	20(1)	18(1)	19(1)	5(1)	3(1)	2(1)
C(19A)	20(1)	14(1)	21(1)	4(1)	8(1)	1(1)
C(20A)	21(1)	16(1)	21(1)	-1(1)	5(1)	0(1)
C(21A)	21(1)	17(1)	21(1)	2(1)	3(1)	2(1)
C(22A)	40(1)	25(1)	31(1)	8(1)	-13(1)	-6(1)
C(23A)	32(1)	19(1)	30(1)	1(1)	5(1)	6(1)
C(24A)	24(1)	27(1)	64(2)	0(1)	-6(1)	-5(1)
C(24B)	24(1)	27(1)	64(2)	0(1)	-6(1)	-5(1)

Table S5. Hydrogen coordinates (x 10^4) and isotropic displacement parameters (Å^2 x 10^3) for ***Sem5***.

Atom	x	y	z	U(iso)
H(2)	4702	820	4512	28
H(5)	8067	-744	1714	25
H(10)	7920	246	155	25
H(11)	9259	799	-820	28
H(13)	11028	2800	1471	27
H(14)	9648	2259	2430	25
H(15A)	12609	2820	-499	59
H(15B)	12622	2323	530	59
H(15C)	11926	3399	304	59
H(17)	6584	2726	1058	22
H(21)	7784	2955	4039	23
H(22A)	6178	4635	-621	53
H(22B)	5562	3779	-57	53
H(22C)	6957	3662	-198	53
H(23A)	6658	7274	2519	45
H(23B)	5869	6259	2692	45
H(23C)	6152	6411	1619	45
H(24A)	8793	5099	5710	48
H(24B)	9177	4066	5113	48
H(24C)	7802	4155	5308	48
H(2A)	5113	9070	384	29
H(5A)	1697	10876	3043	24
H(10A)	2260	9826	4788	23
H(11A)	1116	9305	5922	24
H(13A)	-1136	7476	3746	27
H(14A)	11	8016	2609	25
H(15D)	-2207	7354	5947	50
H(15E)	-1779	6861	4971	50
H(15F)	-2443	7974	4967	50
H(17A)	4227	7594	3583	22
H(21A)	1167	6948	1457	24
H(22D)	5939	5995	5204	51
H(22E)	4823	6792	5091	51
H(22F)	5816	6840	4392	51
H(23D)	3892	2933	2643	41

H(23E)	4733	3994	2931	41
H(23F)	3887	3792	1854	41
H(24D)	-664	4569	1003	61
H(24E)	-129	5613	631	61
H(24F)	-397	5630	1728	61
H(24G)	-110	4789	2413	61
H(24H)	-647	4424	1276	61
H(24I)	-401	5656	1626	61

Table S6. Torsion angles [°] for ***Sem5***.

N(8)-N(1)-C(2)-N(3)	-0.15(15)	C(10)-C(9)-C(14)-C(13)	0.45(19)
N(1)-C(2)-N(3)-C(3A)	0.12(16)	C(6)-C(9)-C(14)-C(13)	178.29(12)
C(2)-N(3)-C(3A)-N(4)	179.50(13)	N(8)-C(7)-C(16)-C(17)	-124.81(13)
C(2)-N(3)-C(3A)-N(8)	-0.03(14)	C(6)-C(7)-C(16)-C(17)	56.77(18)
N(3)-C(3A)-N(4)-C(5)	-179.97(13)	N(8)-C(7)-C(16)-C(21)	59.23(17)
N(8)-C(3A)-N(4)-C(5)	-0.50(18)	C(6)-C(7)-C(16)-C(21)	-119.20(14)
C(3A)-N(4)-C(5)-C(6)	0.73(19)	C(21)-C(16)-C(17)-C(18)	0.3(2)
N(4)-C(5)-C(6)-C(7)	-1.0(2)	C(7)-C(16)-C(17)-C(18)	-175.62(12)
N(4)-C(5)-C(6)-C(9)	176.69(12)	C(22)-O(2)-C(18)-C(17)	0.5(2)
C(5)-C(6)-C(7)-N(8)	0.97(17)	C(22)-O(2)-C(18)-C(19)	179.50(13)
C(9)-C(6)-C(7)-N(8)	-176.63(11)	C(16)-C(17)-C(18)-O(2)	178.66(12)
C(5)-C(6)-C(7)-C(16)	179.43(12)	C(16)-C(17)-C(18)-C(19)	-0.3(2)
C(9)-C(6)-C(7)-C(16)	1.83(19)	C(23)-O(3)-C(19)-C(18)	69.26(17)
C(6)-C(7)-N(8)-N(1)	179.44(11)	C(23)-O(3)-C(19)-C(20)	-114.44(14)
C(16)-C(7)-N(8)-N(1)	0.88(18)	O(2)-C(18)-C(19)-O(3)	-1.77(19)
C(6)-C(7)-N(8)-C(3A)	-0.83(17)	C(17)-C(18)-C(19)-O(3)	177.26(12)
C(16)-C(7)-N(8)-C(3A)	-179.40(11)	O(2)-C(18)-C(19)-C(20)	-178.04(12)
C(2)-N(1)-N(8)-C(7)	179.88(12)	C(17)-C(18)-C(19)-C(20)	1.0(2)
C(2)-N(1)-N(8)-C(3A)	0.12(13)	C(24)-O(4)-C(20)-C(21)	1.65(19)
N(3)-C(3A)-N(8)-C(7)	-179.83(11)	C(24)-O(4)-C(20)-C(19)	-178.38(13)
N(4)-C(3A)-N(8)-C(7)	0.60(19)	O(3)-C(19)-C(20)-O(4)	2.00(18)
N(3)-C(3A)-N(8)-N(1)	-0.06(14)	C(18)-C(19)-C(20)-O(4)	178.36(12)
N(4)-C(3A)-N(8)-N(1)	-179.63(11)	O(3)-C(19)-C(20)-C(21)	-178.02(12)
C(7)-C(6)-C(9)-C(14)	51.54(18)	C(18)-C(19)-C(20)-C(21)	-1.7(2)
C(5)-C(6)-C(9)-C(14)	-126.02(13)	O(4)-C(20)-C(21)-C(16)	-178.41(12)
C(7)-C(6)-C(9)-C(10)	-130.66(13)	C(19)-C(20)-C(21)-C(16)	1.6(2)
C(5)-C(6)-C(9)-C(10)	51.78(17)	C(17)-C(16)-C(21)-C(20)	-0.9(2)
C(14)-C(9)-C(10)-C(11)	-1.13(19)	C(7)-C(16)-C(21)-C(20)	174.95(12)
C(6)-C(9)-C(10)-C(11)	-179.01(12)	N(8A)-N(1A)-C(2A)-N(3A)	-0.20(16)
C(9)-C(10)-C(11)-C(12)	0.9(2)	N(1A)-C(2A)-N(3A)-C(3B)	0.00(16)
C(15)-O(1)-C(12)-C(11)	-167.07(13)	C(2A)-N(3A)-C(3B)-N(4A)	-178.22(14)
C(15)-O(1)-C(12)-C(13)	12.4(2)	C(2A)-N(3A)-C(3B)-N(8A)	0.21(14)
C(10)-C(11)-C(12)-O(1)	179.52(12)	N(3A)-C(3B)-N(4A)-C(5A)	179.80(13)
C(10)-C(11)-C(12)-C(13)	0.1(2)	N(8A)-C(3B)-N(4A)-C(5A)	1.53(18)
O(1)-C(12)-C(13)-C(14)	179.88(12)	C(3B)-N(4A)-C(5A)-C(6A)	0.66(19)
C(11)-C(12)-C(13)-C(14)	-0.7(2)	N(4A)-C(5A)-C(6A)-C(7A)	-1.6(2)
C(12)-C(13)-C(14)-C(9)	0.5(2)	N(4A)-C(5A)-C(6A)-C(9A)	175.52(12)

C(5A)-C(6A)-C(7A)-N(8A)	0.23(17)	C(6A)-C(9A)-C(14A)-C(13A)	178.58(12)
C(9A)-C(6A)-C(7A)-N(8A)	-176.84(11)	N(8A)-C(7A)-C(16A)-C(17A)	84.13(15)
C(5A)-C(6A)-C(7A)-C(16A)	175.40(12)	C(6A)-C(7A)-C(16A)-C(17A)	-90.97(16)
C(9A)-C(6A)-C(7A)-C(16A)	-1.7(2)	N(8A)-C(7A)-C(16A)-C(21A)	-96.47(15)
C(6A)-C(7A)-N(8A)-N(1A)	-179.47(11)	C(6A)-C(7A)-C(16A)-C(21A)	88.44(17)
C(16A)-C(7A)-N(8A)-N(1A)	4.95(18)	C(21A)-C(16A)-C(17A)-C(18A)	0.88(19)
C(6A)-C(7A)-N(8A)-C(3B)	1.90(18)	C(7A)-C(16A)-C(17A)-C(18A)	-179.71(12)
C(16A)-C(7A)-N(8A)-C(3B)	-173.68(11)	C(22A)-O(2A)-C(18A)-C(17A)	9.9(2)
C(2A)-N(1A)-N(8A)-C(7A)	-178.46(12)	C(22A)-O(2A)-C(18A)-C(19A)	-169.58(13)
C(2A)-N(1A)-N(8A)-C(3B)	0.32(13)	C(16A)-C(17A)-C(18A)-O(2A)	-178.38(12)
N(3A)-C(3B)-N(8A)-C(7A)	178.48(11)	C(16A)-C(17A)-C(18A)-C(19A)	1.09(19)
N(4A)-C(3B)-N(8A)-C(7A)	-2.95(19)	C(23A)-O(3A)-C(19A)-C(20A)	110.77(13)
N(3A)-C(3B)-N(8A)-N(1A)	-0.35(14)	C(23A)-O(3A)-C(19A)-C(18A)	-74.34(15)
N(4A)-C(3B)-N(8A)-N(1A)	178.21(11)	O(2A)-C(18A)-C(19A)-O(3A)	1.90(18)
C(7A)-C(6A)-C(9A)-C(14A)	-62.31(17)	C(17A)-C(18A)-C(19A)-O(3A)	-177.62(12)
C(5A)-C(6A)-C(9A)-C(14A)	120.70(14)	O(2A)-C(18A)-C(19A)-C(20A)	176.78(12)
C(7A)-C(6A)-C(9A)-C(10A)	117.27(14)	C(17A)-C(18A)-C(19A)-C(20A)	-2.73(19)
C(5A)-C(6A)-C(9A)-C(10A)	-59.72(17)	C(24B)-O(4A)-C(20A)-C(21A)	-65.1(5)
C(14A)-C(9A)-C(10A)-C(11A)	0.75(19)	C(24A)-O(4A)-C(20A)-C(21A)	-27.8(2)
C(6A)-C(9A)-C(10A)-C(11A)	-178.85(12)	C(24B)-O(4A)-C(20A)-C(19A)	115.3(5)
C(9A)-C(10A)-C(11A)-C(12A)	0.5(2)	C(24A)-O(4A)-C(20A)-C(19A)	152.69(17)
C(15A)-O(1A)-C(12A)-C(11A)	167.18(12)	O(3A)-C(19A)-C(20A)-O(4A)	-3.03(18)
C(15A)-O(1A)-C(12A)-C(13A)	-12.29(19)	C(18A)-C(19A)-C(20A)-O(4A)	-178.00(12)
C(10A)-C(11A)-C(12A)-O(1A)	179.09(12)	O(3A)-C(19A)-C(20A)-C(21A)	177.41(12)
C(10A)-C(11A)-C(12A)-C(13A)	-1.4(2)	C(18A)-C(19A)-C(20A)-C(21A)	2.44(19)
O(1A)-C(12A)-C(13A)-C(14A)	-179.40(12)	C(17A)-C(16A)-C(21A)-C(20A)	-1.17(19)
C(11A)-C(12A)-C(13A)-C(14A)	1.2(2)	C(7A)-C(16A)-C(21A)-C(20A)	179.45(12)
C(12A)-C(13A)-C(14A)-C(9A)	0.1(2)	O(4A)-C(20A)-C(21A)-C(16A)	179.96(12)
C(10A)-C(9A)-C(14A)-C(13A)	-1.01(19)	C(19A)-C(20A)-C(21A)-C(16A)	-0.5(2)