Full wwPDB NMR Structure Validation Report (i)

Jun 6, 2023 – 05:58 pm BST

PDB ID	:	6SUU
BMRB ID	:	34431
Title	:	NMR structure of KRAS32R G9T conformer G-quadruplex within KRAS promoter region
Authors	:	Marquevielle, J.; Salgado, G.
Deposited on	:	2019-09-16

This is a Full wwPDB NMR Structure Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at *validation@mail.wwpdb.org*
A user guide is available at
https://www.wwpdb.org/validation/2017/NMRValidationReportHelp
with specific help available everywhere you see the (i) symbol.

The types of validation reports are described at
http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types.

The following versions of software and data (see references (1)) were used in the production of this report:

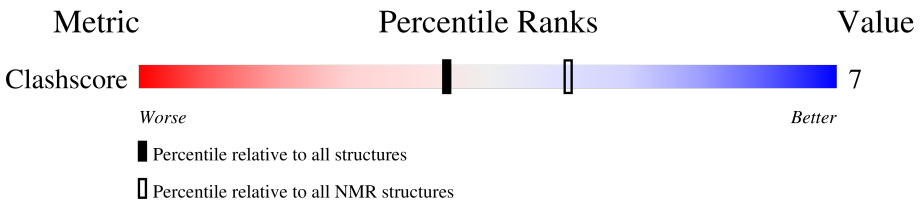
MolProbity	:	4.02b-467
Percentile statistics	:	20191225.v01 (using entries in the PDB archive December 25th 2019)
wwPDB-RCI	:	v_1n_11_5_13_A (Berjanski et al., 2005)
PANAV	:	Wang et al. (2010)
wwPDB-ShiftChecker	:	v1.2
BMRB Restraints Analysis	:	v1.2
Ideal geometry (proteins)	:	Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA)	:	Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP)	:	2.33

1 Overall quality at a glance (i)

The following experimental techniques were used to determine the structure:
SOLUTION NMR

The overall completeness of chemical shifts assignment is 70%.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	NMR archive (#Entries)
Clashscore	158937	12864

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the experimental data. The red, orange, yellow and green segments indicate the fraction of residues that contain outliers for >=3, 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria. A cyan segment indicates the fraction of residues that are not part of the well-defined cores, and a grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions <=5%

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	32	

2 Ensemble composition and analysis (i)

This entry contains 10 models. This entry does not contain polypeptide chains, therefore identification of well-defined residues and clustering analysis are not possible. All residues are included in the validation scores.

3 Entry composition (i)

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 1043 atoms, of which 357 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a DNA chain called KRAS32R G9T.

Mol	Chain	Residues	Atoms						Trace
			Total	C	H	N	O	P	
1	A	32	1041	319	357	149	185	31	0

- Molecule 2 is POTASSIUM ION (three-letter code: K) (formula: K).

Mol	Chain	Residues	Atoms	
			Total	K
2	A	2	2	2

4 Residue-property plots (i)

4.1 Average score per residue in the NMR ensemble

These plots are provided for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic is the same as shown in the summary in section 1 of this report. The second graphic shows the sequence where residues are colour-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. Stretches of 2 or more consecutive residues without any outliers are shown as green connectors. Residues which are classified as ill-defined in the NMR ensemble, are shown in cyan with an underline colour-coded according to the previous scheme. Residues which were present in the experimental sample, but not modelled in the final structure are shown in grey.

• Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A:

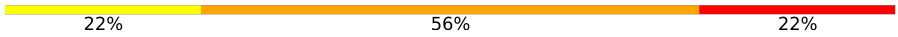
4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

4.2.1 Score per residue for model 1

• Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A:



4.2.2 Score per residue for model 2

• Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A:

4.2.3 Score per residue for model 3

• Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A: 9% 62% 28%

4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A: 9% 50% 41%

4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A: 16% 59% 25%

4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A: 19% 59% 22%

4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A: 12% 53% 34%

4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A: 16% 59% 25%

4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A: 16% 59% 25%

4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: KRAS32R G9T

Chain A: 12% 62% 25%

5 Refinement protocol and experimental data overview (i)

The models were refined using the following method: *molecular dynamics*.

Of the 750 calculated structures, 10 were deposited, based on the following criterion: *structures with the lowest energy*.

The following table shows the software used for structure solution, optimisation and refinement.

Software name	**Classification**	**Version**
Amber	refinement	12
ARIA	structure calculation	

The following table shows chemical shift validation statistics as aggregates over all chemical shift files. Detailed validation can be found in section 7 of this report.

Chemical shift file(s)	working_cs.cif
Number of chemical shift lists	1
Total number of shifts	469
Number of shifts mapped to atoms	469
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Assignment completeness (well-defined parts)	70%

6 Model quality (i)

6.1 Standard geometry (i)

Bond lengths and bond angles in the following residue types are not validated in this section: K

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the (average) root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	#Z>5	RMSZ	#Z>5
1	A	3.50±0.09	119±10/775 (15.3± 1.3%)	4.56±0.08	279±14/1202 (23.2± 1.1%)
All	All	3.51	1186/7750 (15.3%)	4.56	2792/12020 (23.2%)

Chiral center outliers are detected by calculating the chiral volume of a chiral center and verifying if the center is modelled as a planar moiety or with the opposite hand. A planarity outlier is detected by checking planarity of atoms in a peptide group, atoms in a mainchain group or atoms of a sidechain that are expected to be planar.

Mol	Chain	Chirality	Planarity
1	A	0.0±0.0	25.8±1.5
All	All	0	258

All unique bond outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	24	DA	N3-C4	16.68	1.44	1.34	10	3
1	A	9	DT	C5-C7	16.13	1.59	1.50	5	5
1	A	7	DG	C6-N1	14.53	1.49	1.39	8	4
1	A	27	DG	N7-C5	14.21	1.47	1.39	10	2
1	A	25	DG	C2-N2	-14.19	1.20	1.34	5	6
1	A	22	DA	N3-C4	13.97	1.43	1.34	1	2
1	A	6	DG	N1-C2	-13.96	1.26	1.37	5	5
1	A	32	DG	N7-C5	-13.34	1.31	1.39	1	1
1	A	8	DT	C5-C7	13.20	1.57	1.50	1	4
1	A	20	DG	C6-N1	-12.87	1.30	1.39	9	2
1	A	9	DT	N1-C2	12.38	1.48	1.38	6	3
1	A	32	DG	C8-N7	-12.31	1.23	1.30	10	1
1	A	24	DA	O3'-P	-12.21	1.46	1.61	3	2
1	A	11	DG	C5-C4	-12.19	1.29	1.38	9	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	8	DT	P-O5'	12.06	1.71	1.59	4	3
1	A	26	DG	P-O5'	12.04	1.71	1.59	1	4
1	A	24	DA	N7-C5	12.01	1.46	1.39	4	3
1	A	17	DA	N7-C5	11.91	1.46	1.39	7	3
1	A	13	DG	C5'-C4'	11.79	1.64	1.51	1	5
1	A	27	DG	C4'-O4'	-11.75	1.33	1.45	6	3
1	A	13	DG	P-O5'	11.71	1.71	1.59	5	2
1	A	18	DG	C5'-C4'	11.65	1.64	1.51	10	2
1	A	13	DG	C8-N7	-11.58	1.24	1.30	2	6
1	A	21	DA	C5'-C4'	11.51	1.64	1.51	2	1
1	A	21	DA	N3-C4	11.51	1.41	1.34	4	6
1	A	18	DG	N7-C5	11.36	1.46	1.39	5	3
1	A	26	DG	C8-N7	-11.36	1.24	1.30	8	5
1	A	2	DG	C5-C4	-11.22	1.30	1.38	3	1
1	A	6	DG	C2-N2	-11.13	1.23	1.34	4	5
1	A	23	DG	N7-C5	11.09	1.46	1.39	8	3
1	A	28	DG	N7-C5	11.00	1.45	1.39	6	2
1	A	14	DA	N7-C5	-10.99	1.32	1.39	9	4
1	A	30	DA	C8-N7	-10.97	1.23	1.31	3	5
1	A	12	DG	N1-C2	-10.93	1.29	1.37	7	8
1	A	7	DG	N1-C2	-10.90	1.29	1.37	1	7
1	A	4	DG	N7-C5	10.76	1.45	1.39	7	6
1	A	3	DG	C4'-O4'	-10.60	1.34	1.45	10	4
1	A	15	DA	N7-C5	10.58	1.45	1.39	8	7
1	A	14	DA	C2'-C1'	-10.53	1.41	1.52	7	2
1	A	8	DT	C4'-O4'	-10.49	1.34	1.45	1	1
1	A	6	DG	C8-N7	-10.39	1.24	1.30	7	1
1	A	20	DG	N3-C4	10.31	1.42	1.35	1	5
1	A	14	DA	C6-N6	-10.22	1.25	1.33	10	4
1	A	20	DG	C4'-O4'	-10.14	1.34	1.45	1	4
1	A	19	DG	N3-C4	10.12	1.42	1.35	4	4
1	A	7	DG	N3-C4	10.11	1.42	1.35	4	6
1	A	30	DA	C6-N6	-10.06	1.25	1.33	2	3
1	A	31	DG	N7-C5	10.03	1.45	1.39	1	4
1	A	7	DG	N7-C5	9.98	1.45	1.39	7	2
1	A	26	DG	N3-C4	9.96	1.42	1.35	6	2
1	A	4	DG	C4'-C3'	9.87	1.63	1.53	1	3
1	A	12	DG	C6-N1	9.86	1.46	1.39	6	5
1	A	20	DG	C2-N2	-9.79	1.24	1.34	6	4
1	A	25	DG	O3'-P	-9.77	1.49	1.61	3	1
1	A	3	DG	C2'-C1'	9.71	1.62	1.52	10	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	27	DG	C5'-C4'	9.68	1.61	1.51	10	2
1	A	21	DA	P-O5'	-9.66	1.50	1.59	1	4
1	A	1	DA	N7-C5	9.63	1.45	1.39	5	5
1	A	4	DG	N3-C4	-9.62	1.28	1.35	6	1
1	A	11	DG	C2-N2	-9.62	1.25	1.34	8	4
1	A	18	DG	C5-C4	-9.55	1.31	1.38	2	2
1	A	28	DG	C4'-O4'	-9.55	1.35	1.45	6	3
1	A	32	DG	C2-N2	-9.53	1.25	1.34	1	6
1	A	14	DA	N3-C4	9.52	1.40	1.34	4	2
1	A	2	DG	C8-N7	-9.51	1.25	1.30	9	3
1	A	8	DT	N3-C4	9.49	1.46	1.38	2	2
1	A	5	DC	N1-C6	-9.49	1.31	1.37	9	2
1	A	32	DG	P-O5'	9.46	1.69	1.59	5	3
1	A	5	DC	C3'-C2'	9.43	1.63	1.52	10	6
1	A	26	DG	C6-N1	9.43	1.46	1.39	10	5
1	A	6	DG	N9-C8	-9.42	1.31	1.37	9	3
1	A	28	DG	C2-N2	-9.42	1.25	1.34	4	5
1	A	27	DG	N1-C2	-9.40	1.30	1.37	4	4
1	A	21	DA	C6-N1	-9.39	1.28	1.35	5	3
1	A	24	DA	N9-C4	9.39	1.43	1.37	7	4
1	A	31	DG	C2-N2	-9.38	1.25	1.34	5	4
1	A	14	DA	N9-C4	9.37	1.43	1.37	6	1
1	A	17	DA	C6-N1	-9.35	1.29	1.35	6	2
1	A	2	DG	C2'-C1'	9.33	1.61	1.52	1	4
1	A	15	DA	N3-C4	9.31	1.40	1.34	5	6
1	A	30	DA	C6-N1	-9.30	1.29	1.35	8	5
1	A	3	DG	C5-C4	-9.30	1.31	1.38	8	3
1	A	31	DG	N3-C4	9.29	1.42	1.35	2	3
1	A	12	DG	N9-C8	-9.28	1.31	1.37	9	6
1	A	17	DA	C4'-O4'	-9.26	1.35	1.45	10	4
1	A	19	DG	C5-C6	9.26	1.51	1.42	2	1
1	A	22	DA	C8-N7	9.25	1.38	1.31	2	2
1	A	12	DG	O3'-P	9.25	1.72	1.61	1	2
1	A	12	DG	N9-C4	-9.24	1.30	1.38	3	4
1	A	31	DG	N1-C2	-9.23	1.30	1.37	5	2
1	A	28	DG	N9-C4	9.22	1.45	1.38	10	1
1	A	14	DA	C4'-O4'	-9.21	1.35	1.45	7	4
1	A	9	DT	N1-C6	-9.21	1.31	1.38	4	2
1	A	31	DG	N9-C8	-9.18	1.31	1.37	3	1
1	A	13	DG	O3'-P	-9.18	1.50	1.61	1	2
1	A	25	DG	C8-N7	-9.16	1.25	1.30	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	9	DT	C4'-O4'	-9.15	1.35	1.45	7	2
1	A	9	DT	C5'-C4'	9.13	1.61	1.51	7	2
1	A	22	DA	C6-N1	-9.12	1.29	1.35	2	2
1	A	26	DG	N7-C5	-9.12	1.33	1.39	6	5
1	A	16	DG	C2-N2	-9.10	1.25	1.34	7	4
1	A	16	DG	N9-C8	-9.06	1.31	1.37	9	3
1	A	32	DG	N9-C8	-9.05	1.31	1.37	6	5
1	A	19	DG	C2'-C1'	9.05	1.61	1.52	8	1
1	A	11	DG	C5'-C4'	9.04	1.61	1.51	8	5
1	A	5	DC	C4-N4	-9.03	1.25	1.33	4	5
1	A	31	DG	C4'-C3'	-9.02	1.43	1.52	7	4
1	A	29	DG	N3-C4	9.01	1.41	1.35	4	5
1	A	18	DG	C3'-C2'	9.00	1.63	1.52	6	6
1	A	7	DG	C2'-C1'	9.00	1.61	1.52	5	3
1	A	3	DG	N7-C5	8.97	1.44	1.39	8	3
1	A	1	DA	N3-C4	8.94	1.40	1.34	1	5
1	A	14	DA	C6-N1	-8.93	1.29	1.35	3	3
1	A	15	DA	C8-N7	-8.93	1.25	1.31	8	3
1	A	2	DG	N9-C8	-8.91	1.31	1.37	5	4
1	A	23	DG	C2-N2	-8.88	1.25	1.34	4	4
1	A	30	DA	N9-C4	8.84	1.43	1.37	4	3
1	A	20	DG	N7-C5	8.83	1.44	1.39	9	5
1	A	28	DG	P-O5'	-8.82	1.50	1.59	3	3
1	A	28	DG	N1-C2	-8.79	1.30	1.37	4	2
1	A	19	DG	N7-C5	8.79	1.44	1.39	9	2
1	A	7	DG	C5-C4	-8.78	1.32	1.38	2	3
1	A	15	DA	C5'-C4'	8.78	1.61	1.51	9	3
1	A	18	DG	N3-C4	8.77	1.41	1.35	6	3
1	A	27	DG	N3-C4	8.76	1.41	1.35	9	2
1	A	31	DG	C5'-C4'	8.73	1.60	1.51	10	5
1	A	27	DG	C2-N2	-8.67	1.25	1.34	2	4
1	A	27	DG	C2-N3	8.65	1.39	1.32	9	2
1	A	11	DG	N1-C2	-8.65	1.30	1.37	5	3
1	A	5	DC	C5-C6	8.63	1.41	1.34	5	4
1	A	22	DA	C6-N6	-8.62	1.27	1.33	10	1
1	A	11	DG	O3'-P	8.62	1.71	1.61	1	2
1	A	2	DG	N3-C4	8.61	1.41	1.35	9	3
1	A	25	DG	C6-N1	-8.60	1.33	1.39	4	1
1	A	5	DC	C2'-C1'	8.59	1.60	1.52	5	1
1	A	25	DG	N9-C8	-8.58	1.31	1.37	5	3
1	A	12	DG	C4'-O4'	-8.56	1.36	1.45	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	13	DG	C2'-C1'	8.56	1.60	1.52	1	2
1	A	25	DG	N3-C4	8.54	1.41	1.35	6	2
1	A	4	DG	C2-N2	-8.54	1.26	1.34	7	5
1	A	4	DG	C5-C4	-8.49	1.32	1.38	4	3
1	A	5	DC	C2-N3	-8.46	1.28	1.35	10	3
1	A	26	DG	N9-C4	-8.43	1.31	1.38	6	2
1	A	18	DG	C2-N2	-8.42	1.26	1.34	1	5
1	A	27	DG	C2'-C1'	8.41	1.60	1.52	10	2
1	A	15	DA	C4'-O4'	-8.41	1.36	1.45	1	4
1	A	7	DG	P-O5'	-8.38	1.51	1.59	1	2
1	A	16	DG	N7-C5	8.33	1.44	1.39	3	5
1	A	24	DA	C2'-C1'	8.30	1.60	1.52	6	2
1	A	6	DG	P-O5'	8.29	1.68	1.59	9	3
1	A	22	DA	C5-C4	-8.27	1.32	1.38	6	4
1	A	6	DG	N7-C5	-8.21	1.34	1.39	10	2
1	A	10	DT	N1-C2	8.19	1.44	1.38	1	3
1	A	19	DG	C2-N2	-8.16	1.26	1.34	4	3
1	A	3	DG	N3-C4	8.15	1.41	1.35	7	5
1	A	16	DG	C5'-C4'	8.15	1.60	1.51	7	1
1	A	23	DG	N3-C4	8.14	1.41	1.35	8	2
1	A	17	DA	C5'-C4'	8.09	1.60	1.51	4	2
1	A	11	DG	C2'-C1'	8.07	1.60	1.52	1	2
1	A	10	DT	C4'-O4'	-8.06	1.36	1.45	7	4
1	A	23	DG	C4'-C3'	8.05	1.61	1.53	4	2
1	A	8	DT	C5-C6	8.05	1.40	1.34	10	3
1	A	10	DT	N1-C6	-8.04	1.32	1.38	1	3
1	A	13	DG	C2-N2	-8.03	1.26	1.34	7	3
1	A	18	DG	N9-C4	8.03	1.44	1.38	1	2
1	A	18	DG	C6-N1	-8.03	1.33	1.39	1	4
1	A	17	DA	C4'-C3'	8.02	1.61	1.53	4	3
1	A	7	DG	N9-C8	-8.02	1.32	1.37	9	3
1	A	18	DG	C4'-C3'	7.99	1.61	1.53	7	1
1	A	2	DG	C2-N3	7.99	1.39	1.32	9	2
1	A	27	DG	C3'-C2'	7.98	1.61	1.52	4	2
1	A	32	DG	N1-C2	-7.97	1.31	1.37	2	5
1	A	23	DG	C8-N7	7.96	1.35	1.30	9	4
1	A	4	DG	C8-N7	7.95	1.35	1.30	3	1
1	A	11	DG	N9-C8	-7.93	1.32	1.37	6	2
1	A	31	DG	C5-C6	7.91	1.50	1.42	1	2
1	A	9	DT	C4'-C3'	7.86	1.61	1.53	8	3
1	A	10	DT	C5-C7	-7.86	1.45	1.50	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	23	DG	C4'-O4'	-7.84	1.37	1.45	4	1
1	A	2	DG	C2-N2	-7.84	1.26	1.34	2	5
1	A	14	DA	C8-N7	-7.84	1.26	1.31	4	2
1	A	18	DG	N1-C2	-7.80	1.31	1.37	8	4
1	A	10	DT	C5-C6	7.78	1.39	1.34	8	2
1	A	22	DA	N7-C5	7.77	1.44	1.39	1	3
1	A	12	DG	C8-N7	-7.76	1.26	1.30	3	1
1	A	25	DG	C2'-C1'	7.74	1.60	1.52	2	1
1	A	22	DA	O3'-P	-7.74	1.51	1.61	3	3
1	A	1	DA	O3'-P	-7.74	1.51	1.61	8	1
1	A	15	DA	C2-N3	7.74	1.40	1.33	6	1
1	A	20	DG	C2'-C1'	7.73	1.60	1.52	8	2
1	A	24	DA	C4'-C3'	7.72	1.61	1.53	6	1
1	A	28	DG	N3-C4	7.69	1.40	1.35	10	6
1	A	17	DA	P-O5'	7.68	1.67	1.59	3	5
1	A	22	DA	N9-C4	7.68	1.42	1.37	5	2
1	A	32	DG	C6-N1	-7.67	1.34	1.39	6	1
1	A	7	DG	C4'-O4'	-7.67	1.37	1.45	2	1
1	A	4	DG	C4'-O4'	-7.65	1.37	1.45	1	1
1	A	28	DG	C2'-C1'	7.65	1.59	1.52	9	5
1	A	18	DG	C3'-O3'	7.65	1.53	1.44	2	1
1	A	7	DG	C3'-C2'	7.64	1.61	1.52	4	4
1	A	16	DG	C6-N1	7.63	1.44	1.39	10	2
1	A	29	DG	C8-N7	7.62	1.35	1.30	6	1
1	A	9	DT	P-O5'	-7.62	1.52	1.59	1	2
1	A	24	DA	C5-C4	7.61	1.44	1.38	6	2
1	A	14	DA	P-O5'	7.60	1.67	1.59	4	2
1	A	23	DG	N9-C8	7.59	1.43	1.37	1	2
1	A	7	DG	C8-N7	7.58	1.35	1.30	7	4
1	A	16	DG	N3-C4	7.56	1.40	1.35	6	3
1	A	21	DA	N7-C5	-7.55	1.34	1.39	2	4
1	A	30	DA	C5'-C4'	7.54	1.59	1.51	3	3
1	A	20	DG	N9-C4	7.54	1.44	1.38	2	2
1	A	24	DA	C6-N1	-7.53	1.30	1.35	10	2
1	A	27	DG	C6-N1	-7.53	1.34	1.39	4	2
1	A	4	DG	C2'-C1'	7.53	1.59	1.52	7	3
1	A	19	DG	C4'-O4'	-7.53	1.37	1.45	6	3
1	A	12	DG	P-O5'	7.50	1.67	1.59	6	2
1	A	30	DA	N3-C4	7.50	1.39	1.34	6	4
1	A	28	DG	C8-N7	-7.49	1.26	1.30	7	1
1	A	7	DG	C2-N2	-7.48	1.27	1.34	5	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	25	DG	N7-C5	7.46	1.43	1.39	10	5
1	A	13	DG	C4'-C3'	7.46	1.60	1.53	6	1
1	A	10	DT	C4'-C3'	7.46	1.60	1.53	6	3
1	A	29	DG	P-O5'	-7.45	1.52	1.59	1	2
1	A	11	DG	C4'-O4'	-7.43	1.37	1.45	8	3
1	A	20	DG	C8-N7	-7.42	1.26	1.30	4	3
1	A	8	DT	N1-C6	7.41	1.43	1.38	1	2
1	A	1	DA	N1-C2	-7.37	1.27	1.34	4	2
1	A	30	DA	P-O5'	7.34	1.67	1.59	7	3
1	A	30	DA	C2'-C1'	7.32	1.59	1.52	2	4
1	A	5	DC	C4'-C3'	7.32	1.60	1.53	5	3
1	A	1	DA	C5-C4	-7.28	1.33	1.38	8	3
1	A	31	DG	C6-N1	-7.28	1.34	1.39	10	2
1	A	15	DA	P-O5'	7.28	1.67	1.59	1	1
1	A	15	DA	C6-N1	-7.27	1.30	1.35	9	2
1	A	5	DC	C4'-O4'	-7.26	1.37	1.45	8	1
1	A	25	DG	P-O5'	7.26	1.67	1.59	5	2
1	A	28	DG	C6-N1	-7.25	1.34	1.39	6	5
1	A	12	DG	C2'-C1'	-7.25	1.45	1.52	10	2
1	A	1	DA	C5-C6	7.25	1.47	1.41	5	2
1	A	21	DA	C5-C4	-7.24	1.33	1.38	8	2
1	A	2	DG	O3'-P	-7.24	1.52	1.61	9	3
1	A	11	DG	C6-N1	-7.24	1.34	1.39	9	2
1	A	14	DA	N1-C2	-7.23	1.27	1.34	8	3
1	A	6	DG	C2'-C1'	7.23	1.59	1.52	9	6
1	A	22	DA	C5'-C4'	7.23	1.59	1.51	4	3
1	A	6	DG	C4'-O4'	-7.22	1.37	1.45	7	1
1	A	4	DG	C6-N1	7.22	1.44	1.39	1	2
1	A	27	DG	P-O5'	7.22	1.67	1.59	2	2
1	A	24	DA	O4'-C1'	7.21	1.50	1.42	6	1
1	A	6	DG	O4'-C1'	-7.21	1.33	1.42	3	1
1	A	29	DG	C6-O6	-7.20	1.17	1.24	5	1
1	A	11	DG	N9-C4	7.20	1.43	1.38	3	1
1	A	25	DG	C4'-O4'	-7.19	1.37	1.45	3	2
1	A	18	DG	C8-N7	7.18	1.35	1.30	3	1
1	A	17	DA	O4'-C1'	7.18	1.50	1.42	9	1
1	A	6	DG	C6-O6	-7.17	1.17	1.24	4	2
1	A	15	DA	C2'-C1'	7.17	1.59	1.52	1	2
1	A	4	DG	N1-C2	-7.16	1.32	1.37	1	1
1	A	29	DG	C6-N1	-7.14	1.34	1.39	4	2
1	A	6	DG	N3-C4	7.14	1.40	1.35	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	26	DG	C5-C6	-7.14	1.35	1.42	9	1
1	A	11	DG	N3-C4	7.13	1.40	1.35	1	1
1	A	19	DG	C4'-C3'	7.12	1.60	1.53	4	1
1	A	22	DA	C4'-C3'	7.12	1.60	1.53	1	3
1	A	16	DG	C5-C4	-7.11	1.33	1.38	3	1
1	A	17	DA	C3'-O3'	-7.11	1.34	1.44	9	1
1	A	5	DC	C1'-N1	7.10	1.58	1.49	7	1
1	A	30	DA	N9-C8	7.10	1.43	1.37	10	2
1	A	11	DG	C3'-C2'	7.10	1.60	1.52	6	1
1	A	19	DG	N9-C8	-7.08	1.32	1.37	3	2
1	A	3	DG	C6-N1	-7.08	1.34	1.39	2	4
1	A	13	DG	C2-N3	7.08	1.38	1.32	5	3
1	A	26	DG	C2-N2	-7.07	1.27	1.34	8	5
1	A	8	DT	C5'-C4'	7.07	1.59	1.51	7	1
1	A	6	DG	C5-C6	7.05	1.49	1.42	8	2
1	A	6	DG	C3'-C2'	7.05	1.60	1.52	6	1
1	A	8	DT	N1-C2	7.04	1.43	1.38	6	5
1	A	28	DG	C6-O6	-7.03	1.17	1.24	1	1
1	A	16	DG	C6-O6	-7.03	1.17	1.24	2	1
1	A	19	DG	C6-N1	7.03	1.44	1.39	9	3
1	A	31	DG	C5-C4	-7.03	1.33	1.38	3	1
1	A	29	DG	C4'-O4'	-7.00	1.38	1.45	5	2
1	A	26	DG	N1-C2	-6.98	1.32	1.37	7	2
1	A	26	DG	N9-C8	-6.98	1.32	1.37	2	2
1	A	12	DG	N7-C5	6.94	1.43	1.39	7	3
1	A	31	DG	P-O5'	-6.93	1.52	1.59	9	3
1	A	29	DG	N1-C2	-6.91	1.32	1.37	8	1
1	A	19	DG	C5-C4	-6.90	1.33	1.38	4	3
1	A	18	DG	C2-N3	6.90	1.38	1.32	1	2
1	A	12	DG	C5-C6	6.89	1.49	1.42	6	1
1	A	24	DA	C2-N3	-6.86	1.27	1.33	3	1
1	A	21	DA	N9-C4	6.86	1.42	1.37	7	2
1	A	28	DG	N9-C8	-6.84	1.33	1.37	3	3
1	A	32	DG	C4'-C3'	6.84	1.60	1.53	7	1
1	A	2	DG	O4'-C1'	-6.83	1.34	1.42	6	1
1	A	27	DG	C5-C4	6.83	1.43	1.38	1	1
1	A	22	DA	C4'-O4'	-6.82	1.38	1.45	9	2
1	A	13	DG	N1-C2	-6.82	1.32	1.37	2	2
1	A	18	DG	C4'-O4'	-6.81	1.38	1.45	3	2
1	A	16	DG	C4'-C3'	6.81	1.60	1.53	8	3
1	A	6	DG	O3'-P	-6.79	1.53	1.61	8	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	26	DG	C5-C4	-6.79	1.33	1.38	10	3
1	A	23	DG	C2'-C1'	6.76	1.59	1.52	7	1
1	A	9	DT	C5-C6	6.74	1.39	1.34	6	2
1	A	3	DG	C8-N7	-6.73	1.26	1.30	4	3
1	A	6	DG	C4'-C3'	-6.72	1.45	1.52	8	2
1	A	16	DG	C8-N7	6.72	1.34	1.30	1	1
1	A	9	DT	C3'-C2'	6.67	1.60	1.52	6	3
1	A	3	DG	C3'-C2'	6.67	1.60	1.52	9	3
1	A	8	DT	O3'-P	-6.67	1.53	1.61	5	1
1	A	11	DG	C8-N7	-6.66	1.26	1.30	5	1
1	A	29	DG	C2-N3	6.66	1.38	1.32	10	2
1	A	5	DC	N3-C4	-6.66	1.29	1.33	7	3
1	A	18	DG	O3'-P	6.64	1.69	1.61	3	2
1	A	2	DG	N1-C2	-6.64	1.32	1.37	6	2
1	A	24	DA	C6-N6	-6.64	1.28	1.33	10	2
1	A	25	DG	C5-C6	6.64	1.49	1.42	9	3
1	A	21	DA	C4'-O4'	-6.63	1.38	1.45	7	2
1	A	4	DG	C5'-C4'	6.63	1.58	1.51	3	3
1	A	32	DG	C2-N3	-6.62	1.27	1.32	4	2
1	A	6	DG	C6-N1	6.61	1.44	1.39	1	1
1	A	27	DG	C8-N7	6.60	1.34	1.30	6	4
1	A	8	DT	C4-C5	6.60	1.50	1.45	10	4
1	A	21	DA	N1-C2	-6.60	1.28	1.34	2	2
1	A	25	DG	N9-C4	-6.59	1.32	1.38	1	1
1	A	7	DG	C1'-N9	-6.59	1.38	1.47	5	1
1	A	23	DG	C6-O6	-6.58	1.18	1.24	4	2
1	A	8	DT	C2-O2	6.58	1.27	1.22	5	1
1	A	5	DC	P-O5'	6.58	1.66	1.59	8	2
1	A	24	DA	C4'-O4'	-6.56	1.38	1.45	9	2
1	A	13	DG	C5-C4	-6.55	1.33	1.38	5	2
1	A	30	DA	C3'-O3'	-6.54	1.35	1.44	2	1
1	A	23	DG	C5-C4	6.52	1.43	1.38	9	2
1	A	25	DG	C2-N3	6.52	1.38	1.32	3	3
1	A	20	DG	C3'-O3'	-6.51	1.35	1.44	4	1
1	A	5	DC	C5'-C4'	6.47	1.58	1.51	5	4
1	A	30	DA	C1'-N9	-6.47	1.38	1.47	9	1
1	A	15	DA	N9-C4	6.45	1.41	1.37	10	2
1	A	2	DG	N7-C5	-6.43	1.35	1.39	4	1
1	A	32	DG	C5-C4	-6.42	1.33	1.38	3	2
1	A	25	DG	C5'-C4'	6.41	1.58	1.51	9	2
1	A	10	DT	C5'-C4'	-6.39	1.44	1.51	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	30	DA	N1-C2	-6.39	1.28	1.34	5	1
1	A	17	DA	C6-N6	-6.38	1.28	1.33	2	1
1	A	7	DG	C2-N3	6.37	1.37	1.32	1	2
1	A	20	DG	N1-C2	-6.37	1.32	1.37	6	2
1	A	4	DG	N9-C4	-6.37	1.32	1.38	8	2
1	A	32	DG	C5'-C4'	6.36	1.58	1.51	5	2
1	A	3	DG	C5'-C4'	-6.35	1.44	1.51	10	4
1	A	23	DG	C5'-C4'	6.34	1.58	1.51	7	1
1	A	29	DG	N7-C5	6.34	1.43	1.39	2	2
1	A	26	DG	C4'-C3'	-6.34	1.46	1.52	8	2
1	A	10	DT	C2-N3	-6.33	1.32	1.37	7	1
1	A	20	DG	P-O5'	-6.32	1.53	1.59	7	2
1	A	18	DG	C5-C6	6.32	1.48	1.42	10	2
1	A	29	DG	C5-C4	-6.32	1.33	1.38	3	1
1	A	14	DA	C2-N3	6.31	1.39	1.33	3	1
1	A	28	DG	C2-N3	6.30	1.37	1.32	1	2
1	A	29	DG	C2-N2	-6.30	1.28	1.34	10	2
1	A	13	DG	N9-C4	6.28	1.43	1.38	6	2
1	A	28	DG	C4'-C3'	6.28	1.59	1.53	10	2
1	A	24	DA	C8-N7	6.27	1.35	1.31	2	2
1	A	17	DA	C5-C6	6.26	1.46	1.41	3	1
1	A	5	DC	O4'-C1'	6.26	1.49	1.42	8	1
1	A	8	DT	C4'-C3'	6.25	1.59	1.53	10	2
1	A	17	DA	O3'-P	-6.24	1.53	1.61	7	2
1	A	6	DG	C5-C4	-6.22	1.33	1.38	8	2
1	A	13	DG	C5-C6	-6.21	1.36	1.42	8	2
1	A	19	DG	C5'-C4'	6.19	1.58	1.51	10	1
1	A	23	DG	N1-C2	6.15	1.42	1.37	8	2
1	A	30	DA	C5-C6	6.15	1.46	1.41	1	1
1	A	14	DA	C3'-C2'	-6.14	1.44	1.52	3	1
1	A	17	DA	N9-C8	-6.12	1.32	1.37	10	3
1	A	30	DA	N7-C5	-6.12	1.35	1.39	6	2
1	A	2	DG	C6-N1	-6.11	1.35	1.39	9	1
1	A	8	DT	C2-N3	-6.10	1.32	1.37	1	2
1	A	13	DG	N3-C4	6.09	1.39	1.35	1	3
1	A	32	DG	C4'-O4'	-6.08	1.39	1.45	8	1
1	A	16	DG	C4'-O4'	-6.07	1.39	1.45	6	2
1	A	32	DG	N9-C4	6.06	1.42	1.38	3	1
1	A	29	DG	N9-C8	-6.06	1.33	1.37	10	1
1	A	4	DG	C2-N3	-6.06	1.27	1.32	1	3
1	A	2	DG	C4'-O4'	-6.05	1.39	1.45	1	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	1	DA	C6-N1	-6.02	1.31	1.35	1	2
1	A	21	DA	C8-N7	-6.01	1.27	1.31	6	2
1	A	9	DT	N3-C4	6.00	1.43	1.38	3	3
1	A	15	DA	O3'-P	-6.00	1.53	1.61	5	2
1	A	6	DG	N9-C4	-5.99	1.33	1.38	10	1
1	A	27	DG	N9-C8	-5.98	1.33	1.37	2	3
1	A	11	DG	P-O5'	-5.96	1.53	1.59	6	1
1	A	11	DG	O4'-C1'	5.96	1.49	1.42	2	2
1	A	25	DG	C1'-N9	-5.94	1.39	1.47	6	1
1	A	19	DG	N9-C4	5.93	1.42	1.38	10	2
1	A	19	DG	C8-N7	-5.93	1.27	1.30	3	2
1	A	31	DG	C4'-O4'	-5.93	1.39	1.45	4	1
1	A	9	DT	C4-C5	5.92	1.50	1.45	3	1
1	A	13	DG	C3'-C2'	5.92	1.59	1.52	10	3
1	A	6	DG	C2-N3	-5.92	1.28	1.32	10	3
1	A	15	DA	C6-N6	-5.90	1.29	1.33	7	1
1	A	3	DG	N1-C2	-5.89	1.33	1.37	9	1
1	A	14	DA	O3'-P	-5.89	1.54	1.61	8	1
1	A	29	DG	C5-C6	5.88	1.48	1.42	5	3
1	A	9	DT	C2-O2	5.88	1.27	1.22	8	1
1	A	29	DG	N9-C4	5.88	1.42	1.38	4	2
1	A	23	DG	C6-N1	-5.88	1.35	1.39	4	2
1	A	1	DA	C2'-C1'	5.88	1.58	1.52	5	3
1	A	2	DG	C4'-C3'	5.86	1.59	1.53	4	1
1	A	13	DG	O4'-C1'	5.84	1.49	1.42	9	1
1	A	25	DG	O4'-C1'	5.84	1.49	1.42	4	1
1	A	30	DA	O4'-C1'	-5.84	1.35	1.42	10	1
1	A	21	DA	N9-C8	-5.81	1.33	1.37	9	3
1	A	7	DG	N9-C4	-5.81	1.33	1.38	3	1
1	A	15	DA	C5-C4	-5.81	1.34	1.38	5	2
1	A	19	DG	N1-C2	-5.79	1.33	1.37	5	1
1	A	30	DA	C4'-O4'	-5.78	1.39	1.45	9	1
1	A	28	DG	C5'-C4'	5.78	1.57	1.51	1	2
1	A	15	DA	N1-C2	-5.78	1.29	1.34	6	1
1	A	26	DG	C1'-N9	-5.74	1.39	1.47	4	2
1	A	22	DA	P-O5'	-5.73	1.54	1.59	4	2
1	A	26	DG	O3'-P	5.73	1.68	1.61	3	1
1	A	22	DA	C5-C6	5.73	1.46	1.41	7	1
1	A	11	DG	N7-C5	-5.73	1.35	1.39	8	1
1	A	4	DG	C3'-O3'	-5.72	1.36	1.44	3	1
1	A	13	DG	N9-C8	-5.72	1.33	1.37	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	29	DG	O3'-P	5.70	1.68	1.61	2	1
1	A	31	DG	C1'-N9	5.70	1.56	1.49	10	1
1	A	31	DG	C2-N3	-5.69	1.28	1.32	1	2
1	A	8	DT	C2'-C1'	5.69	1.58	1.52	4	1
1	A	7	DG	C4'-C3'	5.69	1.59	1.53	7	1
1	A	4	DG	N9-C8	-5.68	1.33	1.37	5	2
1	A	1	DA	C4'-O4'	-5.68	1.39	1.45	3	1
1	A	14	DA	C5-C4	-5.66	1.34	1.38	10	2
1	A	10	DT	C2-O2	-5.64	1.18	1.22	4	1
1	A	21	DA	O3'-P	-5.64	1.54	1.61	5	1
1	A	22	DA	C3'-C2'	5.64	1.59	1.52	9	1
1	A	32	DG	O4'-C1'	-5.63	1.35	1.42	5	1
1	A	26	DG	C6-O6	-5.62	1.19	1.24	8	2
1	A	13	DG	C4'-O4'	-5.62	1.39	1.45	1	2
1	A	2	DG	C3'-C2'	-5.61	1.45	1.52	3	1
1	A	32	DG	C6-O6	-5.61	1.19	1.24	3	3
1	A	3	DG	O4'-C1'	-5.61	1.35	1.42	2	1
1	A	7	DG	O3'-P	-5.59	1.54	1.61	6	2
1	A	3	DG	O3'-P	-5.59	1.54	1.61	4	1
1	A	28	DG	O3'-P	-5.58	1.54	1.61	5	1
1	A	18	DG	P-O5'	5.58	1.65	1.59	3	1
1	A	2	DG	C6-O6	-5.57	1.19	1.24	6	2
1	A	27	DG	C5-C6	-5.57	1.36	1.42	7	1
1	A	3	DG	C5-C6	-5.56	1.36	1.42	9	1
1	A	20	DG	C3'-C2'	-5.56	1.45	1.52	10	2
1	A	31	DG	N9-C4	-5.54	1.33	1.38	2	2
1	A	17	DA	N3-C4	5.52	1.38	1.34	4	3
1	A	12	DG	N3-C4	5.51	1.39	1.35	8	2
1	A	32	DG	C2'-C1'	5.50	1.57	1.52	6	1
1	A	30	DA	C2-N3	-5.50	1.28	1.33	7	1
1	A	31	DG	O3'-P	5.49	1.67	1.61	3	1
1	A	12	DG	C6-O6	-5.49	1.19	1.24	8	2
1	A	10	DT	C2'-C1'	5.48	1.57	1.52	4	1
1	A	27	DG	C6-O6	-5.48	1.19	1.24	7	1
1	A	3	DG	N9-C8	5.47	1.41	1.37	4	2
1	A	18	DG	O4'-C1'	-5.46	1.35	1.42	9	2
1	A	16	DG	P-O5'	-5.46	1.54	1.59	7	2
1	A	20	DG	C2-N3	-5.46	1.28	1.32	5	1
1	A	15	DA	N9-C8	-5.44	1.33	1.37	9	1
1	A	4	DG	C6-O6	-5.43	1.19	1.24	3	2
1	A	20	DG	C4'-C3'	-5.43	1.47	1.52	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	26	DG	C4'-O4'	-5.43	1.39	1.45	7	1
1	A	26	DG	C5'-C4'	5.42	1.57	1.51	3	4
1	A	12	DG	C5'-C4'	5.42	1.57	1.51	2	2
1	A	12	DG	C5-C4	-5.39	1.34	1.38	6	2
1	A	27	DG	N9-C4	5.39	1.42	1.38	6	2
1	A	19	DG	C6-O6	-5.38	1.19	1.24	8	1
1	A	25	DG	N1-C2	-5.38	1.33	1.37	10	1
1	A	3	DG	N9-C4	-5.37	1.33	1.38	3	1
1	A	10	DT	O3'-P	-5.37	1.54	1.61	7	1
1	A	24	DA	N9-C8	5.34	1.42	1.37	1	1
1	A	25	DG	C3'-C2'	5.33	1.58	1.52	7	1
1	A	16	DG	O3'-P	5.31	1.67	1.61	7	1
1	A	17	DA	N9-C4	5.28	1.41	1.37	7	3
1	A	11	DG	C4'-C3'	5.28	1.58	1.53	1	3
1	A	17	DA	C5-C4	-5.28	1.35	1.38	8	1
1	A	29	DG	O4'-C1'	-5.28	1.35	1.42	9	1
1	A	20	DG	C5-C6	5.26	1.47	1.42	1	1
1	A	2	DG	P-O5'	5.25	1.65	1.59	2	2
1	A	23	DG	O3'-P	5.25	1.67	1.61	4	2
1	A	23	DG	P-O5'	5.24	1.65	1.59	10	1
1	A	17	DA	C3'-C2'	5.24	1.58	1.52	5	1
1	A	20	DG	C5-C4	-5.23	1.34	1.38	3	1
1	A	13	DG	C1'-N9	5.22	1.56	1.49	10	1
1	A	21	DA	C3'-C2'	-5.22	1.46	1.52	6	1
1	A	3	DG	P-O5'	-5.21	1.54	1.59	9	1
1	A	20	DG	N9-C8	-5.21	1.34	1.37	2	2
1	A	23	DG	C5-C6	5.21	1.47	1.42	4	1
1	A	24	DA	P-O5'	-5.20	1.54	1.59	8	2
1	A	1	DA	N9-C8	-5.18	1.33	1.37	3	1
1	A	18	DG	N9-C8	-5.18	1.34	1.37	6	1
1	A	10	DT	P-O5'	5.17	1.65	1.59	5	1
1	A	16	DG	C2-N3	5.17	1.36	1.32	2	1
1	A	16	DG	C5-C6	5.16	1.47	1.42	5	1
1	A	31	DG	C2'-C1'	-5.16	1.47	1.52	1	1
1	A	12	DG	C2-N2	-5.16	1.29	1.34	2	1
1	A	10	DT	N3-C4	-5.16	1.34	1.38	10	1
1	A	16	DG	N9-C4	5.15	1.42	1.38	9	1
1	A	12	DG	C2-N3	-5.12	1.28	1.32	4	1
1	A	17	DA	N1-C2	5.11	1.39	1.34	4	1
1	A	17	DA	C2'-C1'	5.07	1.57	1.52	6	1
1	A	1	DA	C8-N7	5.06	1.35	1.31	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)	Models	
								Worst	Total
1	A	19	DG	P-O5'	-5.04	1.54	1.59	5	1
1	A	10	DT	C4-C5	5.03	1.49	1.45	5	1
1	A	14	DA	N9-C8	-5.01	1.33	1.37	7	1
1	A	24	DA	C5'-C4'	5.01	1.56	1.51	8	1
1	A	28	DG	C5-C6	5.01	1.47	1.42	6	1

All unique angle outliers are listed below. They are sorted according to the Z-score of the worst occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	8	DT	O4'-C1'-N1	33.67	131.57	108.00	4	6
1	A	29	DG	O4'-C1'-N9	25.37	125.76	108.00	1	10
1	A	9	DT	O4'-C1'-N1	25.31	125.72	108.00	4	10
1	A	30	DA	N1-C6-N6	-22.10	105.34	118.60	1	8
1	A	26	DG	O4'-C1'-N9	20.68	122.47	108.00	10	9
1	A	24	DA	N1-C6-N6	-20.13	106.52	118.60	3	9
1	A	3	DG	C5-C6-O6	-19.69	116.79	128.60	10	7
1	A	11	DG	N7-C8-N9	19.21	122.71	113.10	3	6
1	A	1	DA	C4-C5-C6	-18.99	107.50	117.00	5	4
1	A	21	DA	N1-C6-N6	-18.77	107.33	118.60	7	7
1	A	3	DG	O4'-C1'-N9	18.42	120.89	108.00	9	9
1	A	19	DG	C5-C6-N1	18.26	120.63	111.50	5	4
1	A	4	DG	N3-C2-N2	-18.20	107.16	119.90	8	6
1	A	22	DA	N1-C6-N6	-18.13	107.72	118.60	7	9
1	A	30	DA	O4'-C1'-N9	-18.07	95.35	108.00	10	6
1	A	2	DG	O4'-C1'-N9	17.96	120.57	108.00	8	9
1	A	7	DG	C5-C6-O6	-17.78	117.93	128.60	3	5
1	A	13	DG	O4'-C1'-N9	17.68	120.38	108.00	6	8
1	A	11	DG	C8-N9-C4	-17.66	99.34	106.40	3	7
1	A	12	DG	N7-C8-N9	17.61	121.90	113.10	8	8
1	A	14	DA	C4-C5-C6	-17.59	108.21	117.00	2	7
1	A	29	DG	O4'-C1'-C2'	-17.36	92.02	105.90	9	9
1	A	23	DG	C2-N3-C4	17.35	120.57	111.90	6	4
1	A	12	DG	C5-N7-C8	-17.20	95.70	104.30	8	9
1	A	4	DG	C5-N7-C8	-17.06	95.77	104.30	2	9
1	A	12	DG	C5-C6-N1	16.82	119.91	111.50	9	6
1	A	20	DG	C8-N9-C4	-16.77	99.69	106.40	5	6
1	A	30	DA	O4'-C4'-C3'	16.72	116.03	106.00	1	9
1	A	13	DG	C5-C6-O6	-16.60	118.64	128.60	8	9
1	A	24	DA	N9-C4-C5	-16.36	99.26	105.80	5	4
1	A	11	DG	C5-N7-C8	-16.14	96.23	104.30	2	8

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	20	DG	N3-C2-N2	-16.11	108.62	119.90	9	7
1	A	21	DA	O4'-C1'-N9	15.93	119.15	108.00	9	8
1	A	16	DG	N3-C2-N2	-15.89	108.78	119.90	10	3
1	A	15	DA	C5-C6-N1	15.62	125.51	117.70	6	8
1	A	18	DG	O4'-C1'-N9	15.54	118.88	108.00	10	4
1	A	5	DC	N3-C2-O2	-15.54	111.03	121.90	10	9
1	A	25	DG	N3-C2-N2	-15.53	109.03	119.90	2	9
1	A	12	DG	C5-C6-O6	-15.48	119.31	128.60	2	10
1	A	13	DG	N3-C4-N9	15.45	135.27	126.00	6	10
1	A	32	DG	O4'-C1'-N9	15.40	118.78	108.00	2	3
1	A	31	DG	N1-C6-O6	-15.38	110.67	119.90	2	4
1	A	31	DG	O4'-C1'-N9	15.37	118.76	108.00	6	6
1	A	26	DG	C5-C6-N1	15.34	119.17	111.50	3	6
1	A	6	DG	C5-C6-O6	-15.34	119.40	128.60	4	3
1	A	14	DA	C5-C6-N1	15.33	125.36	117.70	10	7
1	A	8	DT	C6-C5-C7	-15.26	113.75	122.90	6	6
1	A	2	DG	O4'-C4'-C3'	15.22	115.14	106.00	8	8
1	A	5	DC	O4'-C1'-N1	15.22	118.66	108.00	3	7
1	A	4	DG	C6-C5-N7	15.16	139.50	130.40	6	6
1	A	32	DG	C8-N9-C4	-14.94	100.42	106.40	1	4
1	A	2	DG	N3-C4-C5	-14.88	121.16	128.60	8	7
1	A	19	DG	C8-N9-C4	-14.86	100.46	106.40	7	3
1	A	15	DA	N1-C6-N6	-14.76	109.75	118.60	2	9
1	A	7	DG	N7-C8-N9	14.69	120.44	113.10	10	2
1	A	21	DA	C5-C6-N1	14.58	124.99	117.70	8	8
1	A	28	DG	O4'-C1'-N9	14.53	118.17	108.00	8	8
1	A	23	DG	N1-C6-O6	-14.44	111.24	119.90	6	3
1	A	17	DA	N1-C6-N6	-14.38	109.97	118.60	2	10
1	A	17	DA	C4-C5-C6	-14.37	109.81	117.00	1	9
1	A	27	DG	C5-C6-N1	14.37	118.69	111.50	5	6
1	A	28	DG	C2-N3-C4	-14.31	104.74	111.90	9	3
1	A	5	DC	N1-C2-O2	14.30	127.48	118.90	10	6
1	A	2	DG	C5-N7-C8	-14.25	97.17	104.30	2	6
1	A	26	DG	N9-C4-C5	-14.20	99.72	105.40	1	1
1	A	2	DG	N3-C4-N9	14.19	134.51	126.00	8	5
1	A	27	DG	N7-C8-N9	14.15	120.17	113.10	1	6
1	A	16	DG	O4'-C4'-C3'	14.14	114.48	106.00	8	6
1	A	8	DT	C1'-O4'-C4'	-14.08	96.02	110.10	6	4
1	A	2	DG	C6-C5-N7	-14.03	121.98	130.40	2	5
1	A	27	DG	N3-C4-N9	13.99	134.40	126.00	7	6
1	A	9	DT	C6-C5-C7	-13.99	114.51	122.90	7	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	2	DG	C6-N1-C2	-13.92	116.75	125.10	4	8
1	A	29	DG	N1-C6-O6	-13.90	111.56	119.90	6	6
1	A	32	DG	N1-C6-O6	-13.85	111.59	119.90	4	2
1	A	16	DG	C4-C5-N7	-13.84	105.26	110.80	9	3
1	A	19	DG	O4'-C4'-C3'	13.83	114.30	106.00	3	5
1	A	31	DG	N3-C2-N2	-13.80	110.24	119.90	4	4
1	A	23	DG	N3-C4-C5	-13.75	121.73	128.60	4	6
1	A	14	DA	N1-C6-N6	-13.72	110.37	118.60	10	8
1	A	22	DA	C5-C6-N1	13.69	124.55	117.70	5	7
1	A	23	DG	C6-N1-C2	-13.68	116.89	125.10	8	2
1	A	13	DG	C6-N1-C2	-13.68	116.89	125.10	10	8
1	A	6	DG	O4'-C4'-C3'	-13.68	97.79	106.00	9	7
1	A	12	DG	C6-N1-C2	-13.66	116.90	125.10	9	6
1	A	31	DG	O4'-C4'-C3'	13.65	114.19	106.00	2	5
1	A	2	DG	N7-C8-N9	13.62	119.91	113.10	2	7
1	A	19	DG	N9-C4-C5	13.61	110.84	105.40	7	5
1	A	12	DG	O4'-C1'-N9	-13.57	98.50	108.00	7	6
1	A	23	DG	O4'-C4'-C3'	13.57	114.14	106.00	8	4
1	A	4	DG	O4'-C1'-N9	13.57	117.50	108.00	1	7
1	A	27	DG	O4'-C4'-C3'	-13.51	97.89	106.00	1	4
1	A	32	DG	N3-C4-C5	-13.46	121.87	128.60	8	4
1	A	4	DG	N1-C2-N2	13.45	128.30	116.20	8	6
1	A	17	DA	C5-C6-N1	13.44	124.42	117.70	2	4
1	A	27	DG	C3'-C2'-C1'	-13.39	86.44	102.50	1	1
1	A	4	DG	O4'-C4'-C3'	-13.34	98.00	106.00	3	5
1	A	26	DG	C5-C6-O6	-13.34	120.60	128.60	9	9
1	A	25	DG	N1-C2-N3	13.32	131.89	123.90	8	2
1	A	11	DG	C5-C6-O6	-13.29	120.62	128.60	10	5
1	A	32	DG	N7-C8-N9	13.22	119.71	113.10	1	7
1	A	4	DG	C2-N3-C4	13.21	118.50	111.90	1	5
1	A	4	DG	C4-C5-C6	-13.19	110.89	118.80	1	10
1	A	29	DG	O4'-C4'-C3'	13.18	113.91	106.00	7	7
1	A	2	DG	C4-C5-N7	13.07	116.03	110.80	2	4
1	A	19	DG	N3-C4-C5	-13.06	122.07	128.60	7	2
1	A	31	DG	C5-N7-C8	-12.99	97.81	104.30	3	5
1	A	27	DG	C5-C6-O6	-12.99	120.81	128.60	2	7
1	A	28	DG	C4-C5-C6	-12.98	111.01	118.80	4	3
1	A	2	DG	N9-C4-C5	-12.97	100.21	105.40	7	7
1	A	13	DG	N1-C2-N2	-12.95	104.54	116.20	7	2
1	A	1	DA	N3-C4-C5	12.91	135.84	126.80	5	3
1	A	1	DA	C8-N9-C4	12.88	110.95	105.80	5	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	8	DT	C3'-C2'-C1'	-12.88	87.05	102.50	5	6
1	A	3	DG	O4'-C4'-C3'	-12.83	98.30	106.00	5	7
1	A	8	DT	C5-C6-N1	-12.83	116.00	123.70	2	6
1	A	3	DG	C6-N1-C2	-12.83	117.40	125.10	8	6
1	A	8	DT	C4-C5-C7	-12.79	111.32	119.00	7	3
1	A	10	DT	O4'-C4'-C3'	12.77	113.66	106.00	7	8
1	A	27	DG	C5-N7-C8	-12.71	97.94	104.30	6	6
1	A	13	DG	N1-C6-O6	12.68	127.51	119.90	9	5
1	A	27	DG	O4'-C1'-C2'	12.49	115.89	105.90	1	3
1	A	10	DT	O4'-C1'-N1	12.43	116.70	108.00	1	5
1	A	13	DG	O4'-C4'-C3'	-12.34	98.59	106.00	1	4
1	A	4	DG	C5-C6-N1	12.30	117.65	111.50	4	9
1	A	16	DG	C5-N7-C8	-12.30	98.15	104.30	10	4
1	A	17	DA	N7-C8-N9	12.25	119.93	113.80	2	3
1	A	3	DG	C5-C6-N1	12.22	117.61	111.50	8	6
1	A	23	DG	C5-C6-N1	12.20	117.60	111.50	6	5
1	A	6	DG	C6-N1-C2	-12.19	117.79	125.10	6	6
1	A	1	DA	N1-C6-N6	-12.17	111.30	118.60	8	9
1	A	1	DA	N9-C4-C5	12.16	110.67	105.80	6	6
1	A	21	DA	N9-C4-C5	12.16	110.67	105.80	5	3
1	A	29	DG	C4'-C3'-C2'	-12.16	92.16	103.10	2	8
1	A	13	DG	N3-C4-C5	-12.14	122.53	128.60	6	7
1	A	17	DA	C5-N7-C8	-12.13	97.83	103.90	2	4
1	A	24	DA	C4-C5-C6	-12.13	110.94	117.00	3	7
1	A	24	DA	C5-C6-N1	12.13	123.76	117.70	2	6
1	A	27	DG	C6-N1-C2	-12.12	117.83	125.10	5	4
1	A	7	DG	C5-N7-C8	-12.09	98.26	104.30	4	4
1	A	27	DG	N9-C4-C5	-12.07	100.57	105.40	7	5
1	A	14	DA	C8-N9-C4	-12.06	100.98	105.80	9	6
1	A	10	DT	C6-C5-C7	-12.04	115.68	122.90	9	10
1	A	19	DG	C2-N3-C4	12.01	117.91	111.90	7	4
1	A	3	DG	C4-C5-N7	12.01	115.60	110.80	2	3
1	A	25	DG	C5-C6-N1	12.00	117.50	111.50	7	3
1	A	11	DG	C4-C5-N7	11.96	115.58	110.80	8	4
1	A	25	DG	C5-N7-C8	-11.95	98.32	104.30	7	3
1	A	15	DA	O4'-C1'-N9	11.91	116.34	108.00	1	8
1	A	3	DG	O4'-C1'-C2'	11.83	115.36	105.90	3	5
1	A	17	DA	O4'-C4'-C3'	11.82	113.09	106.00	7	7
1	A	30	DA	C5-C6-N1	11.81	123.60	117.70	6	6
1	A	6	DG	C8-N9-C4	-11.80	101.68	106.40	8	3
1	A	1	DA	O4'-C4'-C3'	-11.79	98.93	106.00	4	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	13	DG	C5-C6-N1	11.78	117.39	111.50	10	6
1	A	24	DA	C2-N3-C4	11.77	116.48	110.60	3	4
1	A	29	DG	C5-C6-O6	11.76	135.66	128.60	3	3
1	A	8	DT	C5-C4-O4	11.76	133.13	124.90	2	4
1	A	23	DG	O4'-C1'-N9	11.75	116.22	108.00	4	3
1	A	21	DA	C4-C5-C6	-11.75	111.13	117.00	2	5
1	A	19	DG	C6-N1-C2	-11.73	118.06	125.10	5	3
1	A	30	DA	C5-C6-N6	11.72	133.08	123.70	1	3
1	A	1	DA	N1-C2-N3	11.72	135.16	129.30	5	6
1	A	13	DG	N9-C4-C5	-11.68	100.73	105.40	9	9
1	A	7	DG	C4-N9-C1'	-11.65	111.35	126.50	1	10
1	A	1	DA	C5-C6-N6	11.63	133.00	123.70	7	3
1	A	8	DT	C4'-C3'-C2'	-11.59	92.67	103.10	2	5
1	A	3	DG	C6-C5-N7	-11.52	123.49	130.40	4	4
1	A	31	DG	C5-C6-N1	11.51	117.25	111.50	6	7
1	A	11	DG	N3-C4-C5	-11.50	122.85	128.60	1	5
1	A	29	DG	C8-N9-C4	-11.49	101.80	106.40	2	5
1	A	2	DG	C8-N9-C4	-11.49	101.80	106.40	6	7
1	A	12	DG	C4-C5-C6	-11.47	111.92	118.80	9	4
1	A	20	DG	N1-C6-O6	-11.46	113.03	119.90	6	5
1	A	28	DG	O4'-C4'-C3'	-11.45	99.13	106.00	5	7
1	A	26	DG	C6-N1-C2	-11.45	118.23	125.10	3	8
1	A	3	DG	N1-C6-O6	11.43	126.76	119.90	10	4
1	A	4	DG	C5-C6-O6	-11.43	121.74	128.60	1	3
1	A	7	DG	C8-N9-C4	-11.41	101.84	106.40	4	2
1	A	13	DG	N1-C2-N3	11.40	130.74	123.90	7	3
1	A	16	DG	C5-C6-O6	11.40	135.44	128.60	2	3
1	A	28	DG	N1-C6-O6	-11.39	113.07	119.90	6	5
1	A	28	DG	N3-C4-C5	-11.39	122.91	128.60	1	5
1	A	4	DG	C4-C5-N7	11.39	115.35	110.80	2	5
1	A	24	DA	C5-N7-C8	-11.38	98.21	103.90	1	2
1	A	16	DG	O4'-C1'-N9	11.37	115.96	108.00	5	5
1	A	22	DA	C5-C6-N6	11.34	132.78	123.70	7	3
1	A	32	DG	C5-C6-N1	11.33	117.17	111.50	6	3
1	A	29	DG	N7-C8-N9	11.32	118.76	113.10	2	2
1	A	4	DG	C4'-C3'-C2'	-11.31	92.92	103.10	5	5
1	A	20	DG	C5-C6-N1	11.25	117.13	111.50	5	5
1	A	18	DG	C4'-C3'-C2'	-11.24	92.99	103.10	10	2
1	A	12	DG	N3-C2-N2	-11.23	112.04	119.90	7	6
1	A	20	DG	C6-N1-C2	-11.23	118.36	125.10	5	4
1	A	26	DG	N3-C4-C5	-11.21	122.99	128.60	5	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	19	DG	O4'-C1'-N9	11.20	115.84	108.00	7	6
1	A	8	DT	O4'-C4'-C3'	-11.19	99.28	106.00	1	5
1	A	4	DG	N7-C8-N9	11.16	118.68	113.10	2	4
1	A	12	DG	N1-C2-N3	11.16	130.59	123.90	9	6
1	A	7	DG	C2-N3-C4	11.15	117.48	111.90	2	2
1	A	11	DG	N3-C2-N2	-11.15	112.10	119.90	4	4
1	A	19	DG	C4-C5-N7	-11.14	106.34	110.80	7	3
1	A	2	DG	C5-C6-O6	-11.12	121.93	128.60	5	7
1	A	4	DG	C4-N9-C1'	-11.10	112.07	126.50	3	10
1	A	16	DG	C8-N9-C4	-11.06	101.97	106.40	4	6
1	A	27	DG	C4'-C3'-C2'	-11.06	93.14	103.10	4	6
1	A	17	DA	C6-C5-N7	11.05	140.03	132.30	5	4
1	A	6	DG	N3-C4-C5	-11.03	123.08	128.60	8	6
1	A	8	DT	C4-C5-C6	11.03	124.62	118.00	6	7
1	A	9	DT	N3-C4-O4	-11.02	113.29	119.90	1	2
1	A	7	DG	C6-N1-C2	-11.00	118.50	125.10	3	4
1	A	18	DG	C5-N7-C8	-10.99	98.80	104.30	3	3
1	A	24	DA	C8-N9-C4	-10.97	101.41	105.80	2	4
1	A	24	DA	C6-C5-N7	10.95	139.96	132.30	4	5
1	A	22	DA	C4-C5-C6	-10.93	111.54	117.00	4	7
1	A	7	DG	N9-C1'-C2'	10.92	133.35	112.60	2	10
1	A	5	DC	C2-N3-C4	10.92	125.36	119.90	1	3
1	A	17	DA	C4'-C3'-C2'	-10.90	93.29	103.10	3	4
1	A	2	DG	C2-N3-C4	-10.89	106.45	111.90	7	6
1	A	29	DG	N9-C4-C5	10.83	109.73	105.40	2	4
1	A	32	DG	N3-C2-N2	-10.82	112.32	119.90	5	8
1	A	7	DG	C4'-C3'-C2'	-10.81	93.37	103.10	1	3
1	A	16	DG	N3-C4-C5	-10.81	123.19	128.60	1	3
1	A	16	DG	N1-C2-N2	10.80	125.92	116.20	10	2
1	A	6	DG	C5-N7-C8	-10.77	98.92	104.30	2	7
1	A	24	DA	O4'-C1'-N9	10.76	115.53	108.00	5	7
1	A	11	DG	C5-C6-N1	10.76	116.88	111.50	8	2
1	A	20	DG	N9-C4-C5	10.73	109.69	105.40	9	3
1	A	25	DG	N7-C8-N9	10.72	118.46	113.10	7	3
1	A	30	DA	N1-C2-N3	-10.71	123.95	129.30	8	2
1	A	30	DA	C2-N3-C4	-10.71	105.25	110.60	4	2
1	A	10	DT	C4'-C3'-C2'	-10.71	93.47	103.10	7	4
1	A	18	DG	O4'-C4'-C3'	10.68	112.41	106.00	10	5
1	A	29	DG	C5-C6-N1	10.68	116.84	111.50	6	3
1	A	3	DG	C8-N9-C4	10.68	110.67	106.40	10	3
1	A	26	DG	C2-N3-C4	10.65	117.23	111.90	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	23	DG	N3-C4-N9	10.63	132.38	126.00	4	3
1	A	7	DG	N1-C6-O6	10.62	126.27	119.90	3	5
1	A	19	DG	O4'-C1'-C2'	-10.62	97.41	105.90	2	3
1	A	31	DG	N7-C8-N9	10.61	118.40	113.10	9	3
1	A	14	DA	O4'-C1'-N9	10.58	115.41	108.00	7	2
1	A	18	DG	O4'-C1'-C2'	-10.58	97.44	105.90	10	3
1	A	28	DG	C6-C5-N7	10.57	136.75	130.40	4	7
1	A	28	DG	N7-C8-N9	10.54	118.37	113.10	3	3
1	A	27	DG	C8-N9-C4	-10.54	102.18	106.40	8	5
1	A	27	DG	O4'-C1'-N9	-10.53	100.63	108.00	8	5
1	A	24	DA	N1-C2-N3	-10.53	124.04	129.30	2	6
1	A	21	DA	C4'-C3'-C2'	-10.51	93.64	103.10	9	5
1	A	5	DC	C5-C4-N4	10.50	127.55	120.20	2	5
1	A	10	DT	C2-N3-C4	-10.48	120.91	127.20	2	4
1	A	11	DG	N3-C4-N9	10.45	132.27	126.00	1	4
1	A	3	DG	N9-C4-C5	-10.42	101.23	105.40	10	4
1	A	4	DG	N3-C4-N9	-10.42	119.75	126.00	5	6
1	A	28	DG	N3-C4-N9	10.41	132.25	126.00	1	6
1	A	20	DG	N7-C8-N9	10.41	118.30	113.10	9	7
1	A	8	DT	O4'-C1'-C2'	-10.40	97.58	105.90	7	6
1	A	9	DT	C4-C5-C7	10.40	125.24	119.00	9	2
1	A	22	DA	O4'-C1'-N9	10.38	115.26	108.00	1	5
1	A	23	DG	C5-N7-C8	-10.38	99.11	104.30	1	3
1	A	20	DG	C4-C5-N7	10.32	114.93	110.80	1	3
1	A	20	DG	N1-C2-N2	10.32	125.48	116.20	9	2
1	A	27	DG	C4-C5-N7	10.28	114.91	110.80	6	4
1	A	8	DT	C6-N1-C1'	-10.27	104.99	120.40	3	7
1	A	30	DA	C4-C5-C6	-10.26	111.87	117.00	8	8
1	A	26	DG	C4'-C3'-C2'	-10.24	93.89	103.10	9	7
1	A	11	DG	N9-C4-C5	-10.22	101.31	105.40	8	5
1	A	19	DG	N1-C6-O6	-10.21	113.77	119.90	6	5
1	A	32	DG	C2-N3-C4	10.20	117.00	111.90	9	3
1	A	12	DG	C4-C5-N7	10.20	114.88	110.80	7	4
1	A	9	DT	C2-N3-C4	-10.18	121.09	127.20	6	4
1	A	23	DG	N3-C2-N2	10.17	127.02	119.90	1	4
1	A	12	DG	O4'-C4'-C3'	10.17	112.10	106.00	3	4
1	A	20	DG	C5-N7-C8	-10.16	99.22	104.30	1	5
1	A	7	DG	O4'-C1'-C2'	-10.14	97.79	105.90	2	2
1	A	15	DA	C4-C5-C6	-10.13	111.93	117.00	3	9
1	A	2	DG	C4'-C3'-C2'	-10.12	93.99	103.10	8	7
1	A	27	DG	N3-C4-C5	-10.11	123.55	128.60	4	6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	22	DA	O4'-C1'-C2'	10.08	113.96	105.90	3	3
1	A	23	DG	N7-C8-N9	10.06	118.13	113.10	10	3
1	A	20	DG	O4'-C1'-C2'	10.06	113.95	105.90	4	3
1	A	9	DT	O4'-C1'-C2'	-10.05	97.86	105.90	8	6
1	A	3	DG	C3'-C2'-C1'	-10.04	90.45	102.50	10	5
1	A	25	DG	N1-C2-N2	10.04	125.24	116.20	5	6
1	A	12	DG	O4'-C1'-C2'	-10.02	97.88	105.90	9	2
1	A	19	DG	C4-C5-C6	-10.00	112.80	118.80	8	4
1	A	31	DG	C4'-C3'-C2'	-9.99	94.11	103.10	2	6
1	A	17	DA	C5-C6-N6	9.99	131.69	123.70	3	3
1	A	16	DG	N1-C6-O6	-9.98	113.91	119.90	5	4
1	A	28	DG	C5-N7-C8	-9.98	99.31	104.30	3	2
1	A	13	DG	N3-C2-N2	-9.96	112.92	119.90	10	2
1	A	5	DC	C6-N1-C2	-9.96	116.32	120.30	2	3
1	A	10	DT	N1-C2-N3	9.96	120.57	114.60	7	2
1	A	5	DC	N3-C4-C5	-9.96	117.92	121.90	1	3
1	A	25	DG	O4'-C1'-C2'	9.95	113.86	105.90	7	2
1	A	14	DA	C2-N3-C4	9.95	115.58	110.60	10	3
1	A	21	DA	C6-C5-N7	9.94	139.25	132.30	10	3
1	A	17	DA	C2-N3-C4	9.93	115.56	110.60	3	3
1	A	29	DG	N3-C4-C5	-9.91	123.64	128.60	7	7
1	A	25	DG	P-O3'-C3'	9.91	131.59	119.70	5	8
1	A	25	DG	C6-N1-C2	-9.88	119.17	125.10	7	3
1	A	16	DG	N9-C4-C5	9.87	109.35	105.40	3	4
1	A	6	DG	C5-C6-N1	9.86	116.43	111.50	6	4
1	A	5	DC	O4'-C4'-C3'	9.85	111.91	106.00	2	4
1	A	29	DG	C2-N3-C4	9.84	116.82	111.90	7	2
1	A	14	DA	N1-C2-N3	-9.83	124.39	129.30	6	6
1	A	7	DG	N1-C2-N3	9.83	129.80	123.90	3	4
1	A	21	DA	C8-N9-C4	-9.82	101.87	105.80	5	3
1	A	1	DA	C2-N3-C4	-9.81	105.69	110.60	5	6
1	A	1	DA	C6-C5-N7	9.79	139.16	132.30	5	3
1	A	1	DA	C5-C6-N1	9.79	122.59	117.70	5	3
1	A	13	DG	C6-C5-N7	-9.76	124.55	130.40	9	4
1	A	23	DG	C4-C5-C6	-9.76	112.95	118.80	6	2
1	A	18	DG	N1-C6-O6	-9.74	114.05	119.90	2	6
1	A	25	DG	C4-C5-N7	-9.74	106.90	110.80	5	4
1	A	16	DG	N7-C8-N9	9.74	117.97	113.10	10	5
1	A	23	DG	N9-C4-C5	9.71	109.28	105.40	8	1
1	A	30	DA	C3'-C2'-C1'	9.65	114.08	102.50	7	4
1	A	10	DT	N3-C2-O2	-9.64	116.51	122.30	3	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	20	DG	O4'-C1'-N9	9.61	114.73	108.00	8	3
1	A	10	DT	C4-C5-C6	9.55	123.73	118.00	2	4
1	A	11	DG	N1-C6-O6	9.51	125.61	119.90	10	3
1	A	12	DG	C8-N9-C4	-9.49	102.60	106.40	8	5
1	A	21	DA	O4'-C1'-C2'	-9.48	98.32	105.90	10	4
1	A	18	DG	C3'-C2'-C1'	-9.46	91.14	102.50	6	5
1	A	8	DT	C2-N3-C4	-9.46	121.52	127.20	7	6
1	A	25	DG	O4'-C4'-C3'	9.45	111.67	106.00	10	3
1	A	21	DA	C1'-O4'-C4'	-9.44	100.66	110.10	8	3
1	A	7	DG	O4'-C1'-N9	-9.43	101.40	108.00	2	4
1	A	17	DA	N9-C4-C5	9.43	109.57	105.80	5	4
1	A	25	DG	N3-C4-N9	-9.40	120.36	126.00	9	2
1	A	31	DG	C4-C5-C6	-9.40	113.16	118.80	1	4
1	A	28	DG	N1-C2-N2	-9.39	107.75	116.20	8	3
1	A	23	DG	P-O3'-C3'	9.39	130.97	119.70	5	6
1	A	26	DG	N3-C2-N2	-9.39	113.33	119.90	7	5
1	A	5	DC	N3-C4-N4	-9.36	111.44	118.00	2	7
1	A	30	DA	C4-C5-N7	9.35	115.38	110.70	8	4
1	A	17	DA	C4-C5-N7	9.35	115.37	110.70	8	2
1	A	14	DA	O4'-C4'-C3'	9.34	111.60	106.00	8	4
1	A	32	DG	O4'-C1'-C2'	9.34	113.37	105.90	8	2
1	A	21	DA	P-O3'-C3'	9.33	130.90	119.70	1	2
1	A	6	DG	P-O3'-C3'	9.33	130.90	119.70	9	2
1	A	11	DG	C6-C5-N7	-9.33	124.80	130.40	7	8
1	A	28	DG	N3-C2-N2	9.33	126.43	119.90	8	3
1	A	13	DG	C4-C5-N7	9.32	114.53	110.80	9	4
1	A	1	DA	C6-N1-C2	-9.32	113.01	118.60	5	3
1	A	7	DG	C4-C5-N7	-9.31	107.08	110.80	9	2
1	A	3	DG	C5-N7-C8	-9.31	99.65	104.30	6	8
1	A	13	DG	C8-N9-C4	9.30	110.12	106.40	3	3
1	A	26	DG	C4-C5-N7	9.28	114.51	110.80	1	2
1	A	23	DG	C4'-C3'-C2'	-9.26	94.76	103.10	8	3
1	A	14	DA	O4'-C1'-C2'	9.25	113.30	105.90	8	4
1	A	13	DG	N7-C8-N9	9.24	117.72	113.10	9	2
1	A	9	DT	C6-N1-C2	9.23	125.91	121.30	9	5
1	A	26	DG	P-O3'-C3'	9.23	130.78	119.70	9	8
1	A	19	DG	C5-N7-C8	-9.22	99.69	104.30	8	2
1	A	19	DG	C6-C5-N7	9.20	135.92	130.40	3	2
1	A	2	DG	C4-N9-C1'	9.13	138.37	126.50	2	4
1	A	18	DG	C5-C6-O6	9.13	134.08	128.60	2	4
1	A	19	DG	N3-C2-N2	-9.12	113.52	119.90	5	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	31	DG	C4-C5-N7	9.12	114.45	110.80	3	3
1	A	3	DG	C4'-C3'-C2'	-9.10	94.91	103.10	2	6
1	A	14	DA	C5-C6-N6	-9.09	116.43	123.70	1	1
1	A	4	DG	N1-C2-N3	-9.07	118.46	123.90	2	2
1	A	9	DT	C5-C4-O4	9.07	131.25	124.90	1	2
1	A	25	DG	N3-C4-C5	-9.06	124.07	128.60	4	1
1	A	32	DG	C6-N1-C2	-9.06	119.67	125.10	6	5
1	A	12	DG	N1-C6-O6	9.05	125.33	119.90	2	5
1	A	25	DG	C6-C5-N7	9.03	135.82	130.40	5	5
1	A	7	DG	O4'-C4'-C3'	-9.03	100.58	106.00	2	1
1	A	15	DA	C8-N9-C4	-9.02	102.19	105.80	6	4
1	A	14	DA	N7-C8-N9	9.01	118.31	113.80	8	5
1	A	17	DA	N1-C2-N3	-9.00	124.80	129.30	4	5
1	A	28	DG	C5-C6-N1	8.96	115.98	111.50	4	6
1	A	8	DT	N3-C2-O2	-8.96	116.93	122.30	9	3
1	A	26	DG	N1-C6-O6	8.92	125.25	119.90	8	4
1	A	23	DG	C4-C5-N7	8.92	114.37	110.80	1	4
1	A	24	DA	C4-C5-N7	8.89	115.15	110.70	5	4
1	A	3	DG	C2-N3-C4	-8.89	107.45	111.90	10	1
1	A	22	DA	O4'-C4'-C3'	-8.88	100.67	106.00	4	1
1	A	11	DG	O4'-C1'-N9	8.87	114.21	108.00	8	6
1	A	15	DA	O4'-C4'-C3'	8.87	111.32	106.00	6	4
1	A	9	DT	C4-C5-C6	8.87	123.32	118.00	7	1
1	A	2	DG	N3-C2-N2	-8.86	113.70	119.90	4	4
1	A	1	DA	C5-N7-C8	-8.82	99.49	103.90	1	4
1	A	24	DA	C5-C6-N6	8.81	130.75	123.70	3	4
1	A	3	DG	C1'-O4'-C4'	-8.80	101.30	110.10	3	4
1	A	22	DA	C4'-C3'-C2'	-8.78	95.19	103.10	6	2
1	A	11	DG	O4'-C1'-C2'	8.79	112.93	105.90	9	4
1	A	23	DG	N1-C2-N3	-8.77	118.64	123.90	6	3
1	A	16	DG	C6-N1-C2	8.75	130.35	125.10	2	3
1	A	30	DA	O4'-C1'-C2'	8.74	112.89	105.90	3	1
1	A	23	DG	C8-N9-C4	-8.74	102.91	106.40	1	4
1	A	20	DG	C5-C6-O6	-8.73	123.36	128.60	5	3
1	A	13	DG	O3'-P-O5'	8.72	120.58	104.00	9	2
1	A	10	DT	N3-C4-O4	8.71	125.12	119.90	5	5
1	A	23	DG	N1-C2-N2	-8.71	108.36	116.20	1	1
1	A	2	DG	C1'-O4'-C4'	-8.70	101.40	110.10	9	4
1	A	14	DA	C6-N1-C2	-8.69	113.39	118.60	7	5
1	A	13	DG	O4'-C1'-C2'	-8.68	98.95	105.90	10	2
1	A	20	DG	O4'-C4'-C3'	8.68	111.21	106.00	1	5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	32	DG	N9-C4-C5	8.68	108.87	105.40	8	1
1	A	25	DG	C5-C6-O6	-8.64	123.42	128.60	8	4
1	A	4	DG	P-O3'-C3'	8.61	130.04	119.70	1	5
1	A	13	DG	C1'-O4'-C4'	8.61	118.71	110.10	10	2
1	A	5	DC	C1'-O4'-C4'	8.60	118.70	110.10	5	3
1	A	16	DG	N1-C2-N3	8.58	129.05	123.90	4	5
1	A	31	DG	C5-C6-O6	8.58	133.75	128.60	2	3
1	A	7	DG	C1'-O4'-C4'	-8.58	101.52	110.10	8	2
1	A	11	DG	O4'-C4'-C3'	-8.56	100.86	106.00	9	6
1	A	9	DT	C5-C6-N1	-8.56	118.56	123.70	7	2
1	A	6	DG	C2-N3-C4	8.56	116.18	111.90	8	5
1	A	24	DA	O4'-C4'-C3'	-8.55	100.87	106.00	4	2
1	A	16	DG	C5-C6-N1	8.55	115.78	111.50	8	5
1	A	24	DA	C4'-C3'-C2'	-8.54	95.41	103.10	10	3
1	A	10	DT	C4-C5-C7	8.53	124.12	119.00	4	3
1	A	29	DG	C4-C5-N7	-8.53	107.39	110.80	2	4
1	A	32	DG	C6-C5-N7	8.51	135.50	130.40	10	2
1	A	14	DA	C5-N7-C8	-8.50	99.65	103.90	7	6
1	A	22	DA	N3-C4-N9	-8.49	120.60	127.40	4	1
1	A	6	DG	N7-C8-N9	8.48	117.34	113.10	6	4
1	A	8	DT	C5'-C4'-O4'	8.48	125.41	109.30	10	1
1	A	11	DG	P-O3'-C3'	8.47	129.87	119.70	2	5
1	A	14	DA	C4-C5-N7	8.47	114.93	110.70	2	4
1	A	19	DG	C5-C6-O6	8.46	133.68	128.60	6	5
1	A	15	DA	C5-N7-C8	-8.46	99.67	103.90	7	3
1	A	2	DG	O4'-C1'-C2'	8.45	112.66	105.90	9	4
1	A	4	DG	C6-N1-C2	-8.45	120.03	125.10	10	3
1	A	12	DG	C2-N3-C4	-8.45	107.68	111.90	7	3
1	A	21	DA	O4'-C4'-C3'	8.45	111.07	106.00	8	5
1	A	8	DT	N3-C4-O4	8.44	124.97	119.90	6	5
1	A	32	DG	N1-C2-N2	8.44	123.79	116.20	9	2
1	A	6	DG	N1-C2-N3	8.42	128.95	123.90	6	3
1	A	18	DG	N7-C8-N9	8.42	117.31	113.10	3	2
1	A	27	DG	C2-N3-C4	-8.41	107.70	111.90	3	2
1	A	3	DG	N1-C2-N3	8.41	128.94	123.90	5	4
1	A	7	DG	C5-C6-N1	8.40	115.70	111.50	3	3
1	A	1	DA	C4-C5-N7	-8.40	106.50	110.70	4	4
1	A	22	DA	C6-C5-N7	8.39	138.17	132.30	4	2
1	A	31	DG	C6-N1-C2	-8.38	120.07	125.10	3	5
1	A	15	DA	C2-N3-C4	8.38	114.79	110.60	3	2
1	A	3	DG	N3-C2-N2	-8.38	114.04	119.90	10	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	2	DG	C5-C6-N1	8.37	115.69	111.50	10	6
1	A	21	DA	C5-C6-N6	8.35	130.38	123.70	7	2
1	A	6	DG	C4'-C3'-C2'	-8.34	95.59	103.10	2	5
1	A	15	DA	C6-C5-N7	8.31	138.12	132.30	3	5
1	A	13	DG	C4'-C3'-C2'	-8.30	95.63	103.10	5	5
1	A	30	DA	N9-C4-C5	-8.29	102.48	105.80	8	5
1	A	14	DA	N9-C4-C5	-8.27	102.49	105.80	1	4
1	A	32	DG	N1-C2-N3	8.26	128.86	123.90	2	3
1	A	22	DA	C4-C5-N7	8.25	114.83	110.70	5	1
1	A	18	DG	C6-C5-N7	-8.24	125.46	130.40	1	3
1	A	1	DA	O4'-C1'-C2'	8.23	112.49	105.90	2	2
1	A	30	DA	C8-N9-C4	-8.22	102.51	105.80	6	5
1	A	20	DG	P-O3'-C3'	8.20	129.54	119.70	4	5
1	A	28	DG	C6-N1-C2	-8.18	120.19	125.10	1	3
1	A	12	DG	N1-C2-N2	-8.18	108.84	116.20	5	2
1	A	9	DT	O4'-C4'-C3'	8.17	110.90	106.00	7	3
1	A	26	DG	C8-N9-C4	8.16	109.67	106.40	1	2
1	A	27	DG	C6-C5-N7	-8.16	125.51	130.40	6	3
1	A	24	DA	C6-N1-C2	8.15	123.49	118.60	6	3
1	A	17	DA	N3-C4-N9	-8.14	120.89	127.40	5	2
1	A	20	DG	N3-C4-C5	-8.14	124.53	128.60	6	5
1	A	18	DG	C4-C5-N7	8.13	114.05	110.80	1	6
1	A	25	DG	O4'-C1'-N9	8.12	113.68	108.00	2	5
1	A	21	DA	C6-N1-C2	-8.09	113.75	118.60	8	6
1	A	25	DG	O3'-P-O5'	8.08	119.36	104.00	6	3
1	A	12	DG	N3-C4-C5	8.06	132.63	128.60	5	3
1	A	16	DG	C6-C5-N7	-8.04	125.58	130.40	10	4
1	A	3	DG	C4-N9-C1'	-8.03	116.06	126.50	2	7
1	A	6	DG	C4-C5-N7	8.03	114.01	110.80	3	6
1	A	25	DG	C2-N3-C4	-8.01	107.90	111.90	8	2
1	A	29	DG	C5-N7-C8	7.99	108.30	104.30	9	1
1	A	3	DG	O3'-P-O5'	-7.99	88.82	104.00	1	3
1	A	22	DA	C8-N9-C4	7.98	108.99	105.80	8	4
1	A	6	DG	O4'-C1'-N9	7.97	113.58	108.00	5	2
1	A	28	DG	C5-C6-O6	7.97	133.38	128.60	10	2
1	A	26	DG	O4'-C4'-C3'	-7.96	101.22	106.00	2	2
1	A	26	DG	C3'-C2'-C1'	7.96	112.05	102.50	9	3
1	A	21	DA	C4-C5-N7	-7.96	106.72	110.70	5	2
1	A	17	DA	O4'-C1'-C2'	-7.92	99.57	105.90	10	2
1	A	28	DG	C5'-C4'-C3'	7.91	128.34	114.10	1	7
1	A	4	DG	C8-N9-C4	-7.91	103.24	106.40	2	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	25	DG	N9-C4-C5	7.90	108.56	105.40	9	3
1	A	23	DG	C6-C5-N7	7.88	135.13	130.40	3	6
1	A	29	DG	N1-C2-N3	7.85	128.61	123.90	4	2
1	A	18	DG	C8-N9-C4	-7.84	103.26	106.40	2	4
1	A	2	DG	C8-N9-C1'	-7.84	116.81	127.00	2	1
1	A	3	DG	C4-C5-C6	-7.84	114.10	118.80	6	2
1	A	25	DG	C4'-C3'-C2'	7.83	110.15	103.10	8	2
1	A	26	DG	O5'-P-OP2	-7.82	98.67	105.70	9	2
1	A	21	DA	C5-N7-C8	7.81	107.81	103.90	10	3
1	A	10	DT	C5-C6-N1	-7.79	119.03	123.70	9	4
1	A	20	DG	N1-C2-N3	7.78	128.57	123.90	5	4
1	A	6	DG	C4-C5-C6	-7.78	114.13	118.80	3	3
1	A	7	DG	C3'-C2'-C1'	7.76	111.81	102.50	1	2
1	A	20	DG	C6-C5-N7	7.76	135.05	130.40	5	3
1	A	15	DA	C6-N1-C2	-7.75	113.95	118.60	6	2
1	A	22	DA	N7-C8-N9	-7.74	109.93	113.80	8	1
1	A	18	DG	N3-C2-N2	-7.73	114.49	119.90	10	4
1	A	15	DA	N1-C2-N3	-7.68	125.46	129.30	3	3
1	A	19	DG	C4'-C3'-C2'	-7.68	96.19	103.10	4	2
1	A	32	DG	C4-C5-C6	-7.66	114.20	118.80	10	2
1	A	2	DG	C5'-C4'-C3'	-7.65	100.32	114.10	6	2
1	A	20	DG	C2-N3-C4	7.64	115.72	111.90	6	1
1	A	28	DG	O4'-C1'-C2'	-7.63	99.79	105.90	7	3
1	A	29	DG	P-O3'-C3'	7.63	128.85	119.70	10	3
1	A	27	DG	N1-C2-N3	7.62	128.47	123.90	3	1
1	A	18	DG	N3-C4-C5	-7.60	124.80	128.60	5	2
1	A	3	DG	N3-C4-C5	-7.59	124.80	128.60	9	3
1	A	25	DG	N1-C6-O6	-7.59	115.35	119.90	1	4
1	A	7	DG	C4-C5-C6	-7.58	114.25	118.80	5	1
1	A	31	DG	C6-C5-N7	7.57	134.94	130.40	6	3
1	A	21	DA	N7-C8-N9	-7.56	110.02	113.80	10	5
1	A	20	DG	O3'-P-O5'	7.56	118.36	104.00	6	2
1	A	32	DG	C3'-C2'-C1'	-7.55	93.44	102.50	8	1
1	A	18	DG	C2-N3-C4	-7.53	108.13	111.90	6	3
1	A	3	DG	N1-C2-N2	-7.53	109.42	116.20	7	2
1	A	6	DG	N9-C4-C5	-7.53	102.39	105.40	10	6
1	A	21	DA	C2-N3-C4	7.52	114.36	110.60	9	1
1	A	1	DA	O4'-C1'-N9	-7.51	102.74	108.00	1	5
1	A	28	DG	C8-N9-C4	-7.51	103.39	106.40	2	4
1	A	8	DT	N1-C2-N3	7.51	119.11	114.60	9	3
1	A	26	DG	N1-C2-N3	7.50	128.40	123.90	7	3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	6	DG	C1'-O4'-C4'	-7.49	102.61	110.10	4	2
1	A	19	DG	C1'-O4'-C4'	-7.44	102.66	110.10	3	2
1	A	5	DC	N1-C2-N3	7.43	124.41	119.20	2	2
1	A	16	DG	C2-N3-C4	-7.41	108.19	111.90	4	2
1	A	26	DG	N3-C4-N9	7.39	130.43	126.00	5	3
1	A	10	DT	C6-N1-C2	-7.38	117.61	121.30	10	3
1	A	17	DA	P-O3'-C3'	7.37	128.55	119.70	2	1
1	A	10	DT	O4'-C1'-C2'	7.35	111.78	105.90	4	2
1	A	5	DC	C3'-C2'-C1'	7.34	111.31	102.50	4	1
1	A	26	DG	N1-C2-N2	7.34	122.81	116.20	6	3
1	A	13	DG	C5-N7-C8	-7.34	100.63	104.30	9	1
1	A	19	DG	P-O3'-C3'	7.33	128.50	119.70	6	7
1	A	26	DG	O3'-P-O5'	7.32	117.90	104.00	3	2
1	A	14	DA	N3-C4-C5	7.31	131.92	126.80	2	3
1	A	17	DA	N3-C4-C5	7.31	131.91	126.80	1	2
1	A	8	DT	C6-N1-C2	7.29	124.94	121.30	10	3
1	A	30	DA	C5-N7-C8	-7.28	100.26	103.90	8	3
1	A	10	DT	C1'-O4'-C4'	-7.27	102.83	110.10	4	5
1	A	10	DT	C3'-C2'-C1'	7.27	111.23	102.50	9	1
1	A	3	DG	C5'-C4'-C3'	7.26	127.17	114.10	6	4
1	A	28	DG	N1-C2-N3	7.25	128.25	123.90	9	3
1	A	31	DG	C2-N3-C4	7.25	115.53	111.90	7	2
1	A	16	DG	C4-C5-C6	-7.25	114.45	118.80	8	2
1	A	24	DA	N3-C4-N9	-7.24	121.61	127.40	4	1
1	A	31	DG	O3'-P-O5'	7.23	117.74	104.00	2	2
1	A	30	DA	C6-C5-N7	7.21	137.35	132.30	2	2
1	A	14	DA	C6-C5-N7	7.21	137.34	132.30	8	6
1	A	25	DG	C8-N9-C4	-7.20	103.52	106.40	7	2
1	A	31	DG	N1-C2-N2	7.19	122.67	116.20	4	3
1	A	9	DT	N3-C2-O2	-7.16	118.00	122.30	5	5
1	A	2	DG	C4-C5-C6	7.15	123.09	118.80	9	5
1	A	17	DA	C8-N9-C4	-7.13	102.95	105.80	5	3
1	A	24	DA	P-O3'-C3'	7.13	128.25	119.70	5	2
1	A	3	DG	C5'-C4'-O4'	-7.13	95.76	109.30	6	5
1	A	32	DG	C5-C6-O6	-7.13	124.32	128.60	6	4
1	A	11	DG	C4-N9-C1'	-7.12	117.25	126.50	7	3
1	A	15	DA	N9-C4-C5	7.09	108.64	105.80	5	2
1	A	22	DA	C1'-O4'-C4'	7.08	117.19	110.10	1	2
1	A	32	DG	O5'-P-OP2	-7.08	99.33	105.70	10	2
1	A	9	DT	N1-C2-N3	7.06	118.84	114.60	7	4
1	A	6	DG	N3-C2-N2	-7.06	114.96	119.90	7	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	15	DA	C4-C5-N7	7.05	114.22	110.70	7	1
1	A	7	DG	C6-C5-N7	-7.03	126.18	130.40	6	3
1	A	20	DG	N3-C4-N9	-7.03	121.78	126.00	9	1
1	A	22	DA	C6-N1-C2	-7.02	114.39	118.60	3	1
1	A	17	DA	C6-N1-C2	7.01	122.81	118.60	9	2
1	A	30	DA	C1'-O4'-C4'	-7.01	103.09	110.10	4	2
1	A	8	DT	N1-C2-O2	7.01	128.71	123.10	2	2
1	A	1	DA	C1'-O4'-C4'	7.00	117.11	110.10	8	1
1	A	17	DA	C1'-O4'-C4'	-6.99	103.11	110.10	9	1
1	A	13	DG	C4-C5-C6	6.98	122.99	118.80	1	1
1	A	26	DG	O4'-C1'-C2'	-6.94	100.35	105.90	2	3
1	A	13	DG	C2-N3-C4	6.92	115.36	111.90	3	4
1	A	5	DC	C4'-C3'-C2'	-6.92	96.88	103.10	4	3
1	A	32	DG	C5-N7-C8	-6.91	100.85	104.30	1	5
1	A	30	DA	C5'-C4'-O4'	6.90	122.42	109.30	2	2
1	A	7	DG	P-O3'-C3'	6.88	127.96	119.70	10	2
1	A	9	DT	C4'-C3'-C2'	-6.88	96.91	103.10	7	4
1	A	11	DG	N1-C2-N2	6.87	122.38	116.20	4	2
1	A	1	DA	N3-C4-N9	-6.86	121.91	127.40	5	1
1	A	26	DG	C5-N7-C8	6.85	107.72	104.30	9	1
1	A	19	DG	C4-N9-C1'	-6.83	117.61	126.50	2	1
1	A	14	DA	C5'-C4'-C3'	6.81	126.36	114.10	3	1
1	A	19	DG	N3-C4-N9	6.80	130.08	126.00	6	2
1	A	31	DG	O5'-P-OP1	-6.80	99.58	105.70	8	1
1	A	19	DG	N1-C2-N2	-6.79	110.08	116.20	3	1
1	A	23	DG	C3'-C2'-C1'	6.79	110.65	102.50	10	5
1	A	10	DT	N3-C4-C5	-6.76	111.14	115.20	9	2
1	A	20	DG	N9-C1'-C2'	6.74	125.41	112.60	2	1
1	A	2	DG	P-O3'-C3'	6.74	127.79	119.70	9	3
1	A	30	DA	C6-N1-C2	-6.74	114.56	118.60	10	2
1	A	7	DG	N1-C2-N2	-6.74	110.14	116.20	3	5
1	A	8	DT	N3-C4-C5	-6.71	111.17	115.20	1	2
1	A	1	DA	N7-C8-N9	6.71	117.16	113.80	6	3
1	A	31	DG	O4'-C1'-C2'	-6.71	100.53	105.90	9	4
1	A	1	DA	P-O3'-C3'	6.70	127.73	119.70	8	1
1	A	17	DA	O4'-C1'-N9	-6.68	103.32	108.00	10	4
1	A	16	DG	P-O3'-C3'	6.67	127.70	119.70	2	2
1	A	23	DG	C5'-C4'-O4'	6.64	121.92	109.30	4	1
1	A	12	DG	N9-C4-C5	-6.64	102.74	105.40	5	2
1	A	7	DG	O3'-P-O5'	6.62	116.58	104.00	1	2
1	A	22	DA	N3-C4-C5	6.62	131.44	126.80	4	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	18	DG	C1'-O4'-C4'	6.61	116.71	110.10	9	2
1	A	19	DG	N1-C2-N3	6.60	127.86	123.90	5	2
1	A	4	DG	N1-C6-O6	-6.60	115.94	119.90	10	2
1	A	30	DA	N3-C4-C5	6.59	131.41	126.80	4	2
1	A	5	DC	O4'-C1'-C2'	-6.59	100.63	105.90	5	4
1	A	32	DG	C4'-C3'-C2'	6.57	109.02	103.10	1	3
1	A	18	DG	P-O3'-C3'	6.56	127.57	119.70	9	4
1	A	30	DA	C4'-C3'-O3'	6.56	126.10	109.70	7	1
1	A	10	DT	C5-C4-O4	6.55	129.49	124.90	9	2
1	A	18	DG	C8-N9-C1'	-6.55	118.49	127.00	6	2
1	A	29	DG	C6-C5-N7	6.55	134.33	130.40	4	2
1	A	6	DG	N1-C6-O6	6.54	123.83	119.90	4	3
1	A	18	DG	C4-C5-C6	-6.50	114.90	118.80	3	2
1	A	15	DA	O4'-C1'-C2'	6.50	111.10	105.90	5	1
1	A	5	DC	C5-C6-N1	-6.47	117.76	121.00	3	3
1	A	23	DG	O4'-C1'-C2'	-6.47	100.72	105.90	7	2
1	A	29	DG	C1'-O4'-C4'	-6.47	103.63	110.10	3	2
1	A	18	DG	C4-N9-C1'	-6.43	118.14	126.50	1	2
1	A	29	DG	C6-N1-C2	-6.41	121.25	125.10	4	2
1	A	31	DG	C8-N9-C4	-6.39	103.84	106.40	4	2
1	A	29	DG	C5'-C4'-O4'	-6.39	97.15	109.30	4	2
1	A	18	DG	C5-C6-N1	6.38	114.69	111.50	1	3
1	A	4	DG	C5'-C4'-C3'	-6.35	102.67	114.10	8	2
1	A	10	DT	O3'-P-O5'	6.34	116.04	104.00	8	1
1	A	21	DA	N1-C2-N3	6.33	132.47	129.30	4	4
1	A	7	DG	N3-C4-C5	-6.32	125.44	128.60	2	4
1	A	23	DG	P-O5'-C5'	6.31	130.99	120.90	9	1
1	A	19	DG	C3'-C2'-C1'	-6.30	94.94	102.50	6	1
1	A	21	DA	C3'-C2'-C1'	-6.30	94.94	102.50	1	1
1	A	5	DC	P-O3'-C3'	6.30	127.26	119.70	6	3
1	A	16	DG	O4'-C1'-C2'	6.29	110.93	105.90	5	2
1	A	30	DA	O5'-C5'-C4'	6.28	126.70	111.00	9	2
1	A	28	DG	C4-C5-N7	6.28	113.31	110.80	3	2
1	A	15	DA	C5-C6-N6	6.25	128.70	123.70	2	2
1	A	12	DG	C3'-C2'-C1'	6.25	110.00	102.50	9	1
1	A	5	DC	C4-C5-C6	6.24	120.52	117.40	3	3
1	A	15	DA	C5'-C4'-O4'	-6.23	97.47	109.30	7	1
1	A	29	DG	O3'-P-O5'	6.22	115.82	104.00	9	1
1	A	4	DG	N9-C1'-C2'	-6.22	100.79	112.60	7	4
1	A	24	DA	C5'-C4'-C3'	6.21	125.27	114.10	10	1
1	A	23	DG	C5-C6-O6	-6.20	124.88	128.60	2	2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	10	DT	N1-C2-O2	6.18	128.05	123.10	3	1
1	A	21	DA	C5'-C4'-O4'	6.18	121.05	109.30	9	2
1	A	26	DG	OP1-P-OP2	-6.17	110.34	119.60	1	2
1	A	29	DG	N3-C2-N2	-6.17	115.58	119.90	6	2
1	A	27	DG	O3'-P-O5'	6.15	115.69	104.00	5	1
1	A	6	DG	C6-C5-N7	6.14	134.08	130.40	5	2
1	A	4	DG	C1'-O4'-C4'	-6.13	103.97	110.10	8	3
1	A	2	DG	N1-C6-O6	-6.11	116.23	119.90	9	2
1	A	28	DG	O5'-P-OP1	-6.10	100.21	105.70	5	1
1	A	22	DA	N1-C2-N3	-6.10	126.25	129.30	2	2
1	A	20	DG	C4-C5-C6	-6.09	115.14	118.80	5	2
1	A	16	DG	N3-C4-N9	-6.09	122.34	126.00	4	3
1	A	12	DG	C6-C5-N7	-6.09	126.74	130.40	7	2
1	A	11	DG	C4-C5-C6	-6.08	115.15	118.80	10	1
1	A	26	DG	C4-C5-C6	-6.08	115.15	118.80	7	1
1	A	22	DA	N9-C1'-C2'	6.08	124.15	112.60	10	1
1	A	17	DA	C3'-C2'-C1'	6.07	109.79	102.50	3	2
1	A	16	DG	C4'-C3'-C2'	-6.07	97.64	103.10	8	1
1	A	22	DA	C2-N3-C4	6.07	113.64	110.60	7	3
1	A	26	DG	C4'-C3'-O3'	6.05	124.84	109.70	6	2
1	A	10	DT	P-O3'-C3'	6.05	126.96	119.70	8	1
1	A	32	DG	C4-C5-N7	6.04	113.22	110.80	9	2
1	A	21	DA	C4'-C3'-O3'	6.03	124.77	109.70	7	1
1	A	31	DG	N9-C1'-C2'	-6.02	101.16	112.60	9	1
1	A	25	DG	C4-C5-C6	-6.02	115.19	118.80	9	1
1	A	15	DA	C4'-C3'-C2'	-6.01	97.69	103.10	7	1
1	A	14	DA	C3'-C2'-C1'	6.01	109.71	102.50	7	1
1	A	30	DA	N7-C8-N9	-5.99	110.81	113.80	2	3
1	A	10	DT	C5'-C4'-O4'	-5.99	97.92	109.30	3	3
1	A	3	DG	N7-C8-N9	5.97	116.08	113.10	4	4
1	A	9	DT	O3'-P-O5'	5.97	115.34	104.00	9	1
1	A	18	DG	N1-C2-N3	5.94	127.47	123.90	6	1
1	A	28	DG	C4'-C3'-C2'	5.93	108.44	103.10	4	2
1	A	30	DA	C4'-C3'-C2'	-5.92	97.77	103.10	7	2
1	A	9	DT	N1-C2-O2	-5.92	118.37	123.10	7	1
1	A	31	DG	P-O3'-C3'	5.90	126.78	119.70	1	1
1	A	11	DG	O3'-P-O5'	5.88	115.18	104.00	8	1
1	A	30	DA	C5'-C4'-C3'	-5.88	103.52	114.10	4	3
1	A	31	DG	N3-C4-N9	5.84	129.51	126.00	1	2
1	A	29	DG	N3-C4-N9	5.81	129.49	126.00	1	1
1	A	29	DG	O5'-P-OP2	-5.81	100.47	105.70	6	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)	Models	
								Worst	Total
1	A	1	DA	C3'-C2'-C1'	5.80	109.46	102.50	8	1
1	A	30	DA	P-O5'-C5'	5.79	130.17	120.90	10	1
1	A	28	DG	C1'-O4'-C4'	-5.78	104.32	110.10	6	1
1	A	8	DT	P-O3'-C3'	5.75	126.60	119.70	8	2
1	A	21	DA	N9-C1'-C2'	-5.74	101.70	112.60	1	1
1	A	2	DG	N1-C2-N3	5.74	127.34	123.90	7	4
1	A	4	DG	N3-C4-C5	5.73	131.46	128.60	5	2
1	A	15	DA	N7-C8-N9	5.72	116.66	113.80	5	3
1	A	12	DG	P-O5'-C5'	5.71	130.04	120.90	4	2
1	A	18	DG	N9-C4-C5	-5.71	103.12	105.40	4	2
1	A	9	DT	C3'-C2'-C1'	5.71	109.35	102.50	4	1
1	A	4	DG	N9-C4-C5	5.70	107.68	105.40	10	1
1	A	22	DA	C5-N7-C8	-5.67	101.06	103.90	6	2
1	A	7	DG	C5'-C4'-O4'	5.66	120.06	109.30	2	2
1	A	17	DA	O5'-P-OP2	-5.65	100.61	105.70	8	1
1	A	27	DG	C5'-C4'-C3'	-5.63	103.96	114.10	6	1
1	A	12	DG	C8-N9-C1'	-5.63	119.68	127.00	6	2
1	A	24	DA	O4'-C1'-C2'	5.60	110.38	105.90	8	1
1	A	6	DG	N1-C2-N2	-5.59	111.17	116.20	9	1
1	A	14	DA	N3-C4-N9	5.58	131.87	127.40	10	1
1	A	23	DG	C5'-C4'-C3'	-5.58	104.06	114.10	4	1
1	A	31	DG	OP1-P-OP2	-5.57	111.25	119.60	9	1
1	A	27	DG	C1'-O4'-C4'	-5.57	104.53	110.10	3	2
1	A	14	DA	O5'-P-OP2	-5.56	100.69	105.70	9	1
1	A	31	DG	C3'-C2'-C1'	5.55	109.16	102.50	2	3
1	A	15	DA	C1'-O4'-C4'	5.52	115.62	110.10	2	1
1	A	8	DT	C5'-C4'-C3'	-5.51	104.17	114.10	4	1
1	A	12	DG	C4-N9-C1'	5.51	133.67	126.50	8	1
1	A	3	DG	N3-C4-N9	5.51	129.31	126.00	2	1
1	A	19	DG	C5'-C4'-C3'	5.50	124.00	114.10	8	1
1	A	31	DG	N9-C4-C5	5.49	107.60	105.40	6	2
1	A	6	DG	O3'-P-O5'	-5.49	93.57	104.00	4	2
1	A	11	DG	OP1-P-OP2	-5.49	111.37	119.60	7	1
1	A	14	DA	C4'-C3'-O3'	5.48	123.40	109.70	8	1
1	A	11	DG	C4'-C3'-C2'	5.47	108.03	103.10	9	1
1	A	22	DA	O3'-P-O5'	-5.46	93.62	104.00	5	1
1	A	20	DG	C4'-C3'-O3'	5.46	123.36	109.70	4	1
1	A	21	DA	C5'-C4'-C3'	-5.46	104.28	114.10	3	1
1	A	22	DA	P-O3'-C3'	5.44	126.23	119.70	1	2
1	A	24	DA	OP1-P-O3'	5.44	117.17	105.20	8	1
1	A	32	DG	C4-N9-C1'	5.43	133.56	126.50	9	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	23	DG	OP1-P-OP2	5.42	127.74	119.60	5	1
1	A	24	DA	N3-C4-C5	-5.42	123.01	126.80	2	1
1	A	29	DG	O5'-C5'-C4'	5.41	124.53	111.00	4	1
1	A	29	DG	C3'-C2'-C1'	5.40	108.98	102.50	7	3
1	A	2	DG	O3'-P-O5'	-5.39	93.75	104.00	7	1
1	A	24	DA	O5'-P-OP1	5.39	117.16	110.70	4	1
1	A	28	DG	C3'-C2'-C1'	5.37	108.94	102.50	7	1
1	A	24	DA	C1'-O4'-C4'	-5.36	104.74	110.10	8	1
1	A	21	DA	O3'-P-O5'	-5.34	93.85	104.00	2	1
1	A	18	DG	N3-C4-N9	5.32	129.19	126.00	4	3
1	A	4	DG	C3'-C2'-C1'	5.32	108.88	102.50	5	2
1	A	32	DG	N3-C4-N9	5.30	129.18	126.00	8	2
1	A	8	DT	N1-C1'-C2'	-5.30	102.53	112.60	5	1
1	A	19	DG	N7-C8-N9	5.30	115.75	113.10	4	1
1	A	16	DG	C1'-O4'-C4'	-5.30	104.80	110.10	8	1
1	A	22	DA	N9-C4-C5	5.29	107.92	105.80	4	1
1	A	27	DG	N1-C2-N2	-5.26	111.46	116.20	1	2
1	A	7	DG	N9-C4-C5	-5.26	103.29	105.40	7	1
1	A	28	DG	P-O5'-C5'	5.24	129.28	120.90	5	1
1	A	11	DG	N1-C2-N3	-5.22	120.77	123.90	1	2
1	A	26	DG	N7-C8-N9	-5.22	110.49	113.10	10	1
1	A	26	DG	OP1-P-O3'	5.22	116.68	105.20	1	1
1	A	16	DG	C8-N9-C1'	5.21	133.78	127.00	4	1
1	A	31	DG	N1-C2-N3	5.18	127.01	123.90	4	1
1	A	6	DG	C4-N9-C1'	-5.17	119.78	126.50	5	2
1	A	24	DA	N7-C8-N9	5.16	116.38	113.80	1	1
1	A	27	DG	C8-N9-C1'	5.16	133.71	127.00	9	1
1	A	22	DA	C3'-C2'-C1'	-5.16	96.31	102.50	3	1
1	A	23	DG	O3'-P-O5'	-5.13	94.25	104.00	10	1
1	A	21	DA	N3-C4-C5	-5.12	123.21	126.80	7	1
1	A	32	DG	C8-N9-C1'	-5.12	120.35	127.00	7	1
1	A	17	DA	P-O5'-C5'	5.11	129.07	120.90	5	1
1	A	2	DG	N1-C2-N2	5.09	120.78	116.20	3	1
1	A	4	DG	O3'-P-O5'	5.09	113.67	104.00	8	1
1	A	29	DG	N1-C2-N2	-5.09	111.62	116.20	1	1
1	A	6	DG	C3'-C2'-C1'	-5.05	96.43	102.50	9	1
1	A	13	DG	P-O5'-C5'	5.05	128.98	120.90	7	1
1	A	10	DT	O5'-P-OP2	-5.05	101.16	105.70	9	1
1	A	11	DG	C2-N3-C4	5.04	114.42	111.90	6	1
1	A	10	DT	C6-N1-C1'	-5.04	112.84	120.40	9	1
1	A	27	DG	C4-C5-C6	-5.03	115.78	118.80	5	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(^{o})	Ideal(^{o})	Models	
								Worst	Total
1	A	24	DA	C3'-C2'-C1'	-5.03	96.47	102.50	2	1
1	A	16	DG	C3'-C2'-C1'	5.02	108.52	102.50	2	1
1	A	9	DT	O5'-P-OP2	-5.02	101.18	105.70	5	1
1	A	32	DG	C4'-C3'-O3'	5.01	122.32	112.30	7	1

There are no chirality outliers.

All unique planar outliers are listed below. They are sorted by the frequency of occurrence in the ensemble.

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	3	DG	Sidechain	10
1	A	4	DG	Sidechain	10
1	A	6	DG	Sidechain	10
1	A	7	DG	Sidechain	10
1	A	8	DT	Sidechain	10
1	A	11	DG	Sidechain	10
1	A	12	DG	Sidechain	10
1	A	13	DG	Sidechain	10
1	A	25	DG	Sidechain	10
1	A	28	DG	Sidechain	10
1	A	32	DG	Sidechain	10
1	A	19	DG	Sidechain	9
1	A	26	DG	Sidechain	9
1	A	27	DG	Sidechain	9
1	A	9	DT	Sidechain	9
1	A	17	DA	Sidechain	8
1	A	23	DG	Sidechain	8
1	A	29	DG	Sidechain	8
1	A	31	DG	Sidechain	8
1	A	14	DA	Sidechain	8
1	A	1	DA	Sidechain	7
1	A	5	DC	Sidechain	7
1	A	16	DG	Sidechain	7
1	A	24	DA	Sidechain	7
1	A	2	DG	Sidechain	7
1	A	10	DT	Sidechain	7
1	A	30	DA	Sidechain	7
1	A	15	DA	Sidechain	6
1	A	21	DA	Sidechain	5
1	A	18	DG	Sidechain	5
1	A	20	DG	Sidechain	4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type	Group	Models (Total)
1	A	22	DA	Sidechain	3

6.2 Too-close contacts (i)

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in each chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes averaged over the ensemble.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes
1	A	684	357	324	7±2
All	All	6860	3570	3368	71

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 7.

All unique clashes are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:3:DG:H1'	1:A:4:DG:C8	0.60	2.32	2	5
1:A:10:DT:H2"	1:A:11:DG:C8	0.59	2.33	3	4
1:A:12:DG:C2	1:A:25:DG:C8	0.58	2.91	7	5
1:A:28:DG:C8	1:A:28:DG:H5"	0.52	2.38	6	4
1:A:29:DG:N3	1:A:30:DA:H5"	0.52	2.19	3	1
1:A:13:DG:C2	1:A:31:DG:C5	0.52	2.97	4	1
1:A:32:DG:H3'	1:A:32:DG:N3	0.52	2.20	6	3
1:A:16:DG:H2"	1:A:17:DA:C8	0.51	2.41	9	1
1:A:27:DG:C4	1:A:30:DA:N6	0.50	2.80	3	2
1:A:28:DG:C4	1:A:29:DG:C8	0.50	2.98	10	4
1:A:25:DG:C8	1:A:25:DG:H5'	0.50	2.42	9	1
1:A:12:DG:N2	1:A:25:DG:C8	0.49	2.80	10	2
1:A:26:DG:C2'	1:A:27:DG:C8	0.49	2.96	1	7
1:A:3:DG:N2	1:A:6:DG:C8	0.49	2.81	8	1
1:A:12:DG:C2	1:A:25:DG:N7	0.48	2.81	10	2
1:A:26:DG:H2"	1:A:27:DG:C8	0.48	2.44	7	2
1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:C8	0.48	2.43	5	1
1:A:7:DG:C5'	1:A:9:DT:H5'	0.48	2.39	4	3
1:A:3:DG:C2	1:A:4:DG:C4	0.48	3.01	6	3
1:A:19:DG:H4'	1:A:20:DG:C5'	0.48	2.39	7	2
1:A:7:DG:H5'	1:A:9:DT:H5'	0.47	1.85	4	1
1:A:27:DG:C2	1:A:30:DA:C6	0.47	3.03	3	1

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Clash(Å)	Distance(Å)	Models	
				Worst	Total
1:A:7:DG:N2	1:A:32:DG:H2'	0.45	2.26	1	1
1:A:6:DG:C8	1:A:6:DG:H5'	0.45	2.47	6	1
1:A:12:DG:H2"	1:A:13:DG:C5'	0.44	2.42	1	3
1:A:31:DG:H4'	1:A:32:DG:H5'	0.44	1.88	7	1
1:A:23:DG:H4'	1:A:24:DA:OP1	0.44	2.12	3	1
1:A:6:DG:C2	1:A:7:DG:C4	0.43	3.06	9	1
1:A:27:DG:H2"	1:A:28:DG:H5"	0.43	1.89	4	1
1:A:13:DG:C6	1:A:31:DG:C8	0.43	3.07	3	1
1:A:11:DG:H1'	1:A:12:DG:H5'	0.42	1.91	1	2
1:A:29:DG:H1'	1:A:30:DA:C8	0.42	2.50	6	1
1:A:1:DA:H5"	1:A:1:DA:C8	0.41	2.50	4	1
1:A:31:DG:O4'	1:A:32:DG:C2	0.41	2.74	6	1

6.3 Torsion angles (i)

6.3.1 Protein backbone (i)

There are no protein molecules in this entry.

6.3.2 Protein sidechains (i)

There are no protein molecules in this entry.

6.3.3 RNA (i)

There are no RNA molecules in this entry.

6.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains (i)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

6.5 Carbohydrates (i)

There are no monosaccharides in this entry.

6.6 Ligand geometry (i)

Of 2 ligands modelled in this entry, 2 are monoatomic - leaving 0 for Mogul analysis.

6.7 Other polymers (i)

There are no such molecules in this entry.

6.8 Polymer linkage issues (i)

There are no chain breaks in this entry.

7 Chemical shift validation (i)

The completeness of assignment taking into account all chemical shift lists is 70% for the well-defined parts and 70% for the entire structure.

7.1 Chemical shift list 1

File name: working_cs.cif

Chemical shift list name: *starch_output*

7.1.1 Bookkeeping (i)

The following table shows the results of parsing the chemical shift list and reports the number of nuclei with statistically unusual chemical shifts.

Total number of shifts	469
Number of shifts mapped to atoms	469
Number of unparsed shifts	0
Number of shifts with mapping errors	0
Number of shifts with mapping warnings	0
Number of shift outliers (ShiftChecker)	26

7.1.2 Chemical shift referencing (i)

No chemical shift referencing corrections were calculated (not enough data).

7.1.3 Completeness of resonance assignments (i)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the well-defined regions of the structure. The overall completeness is 70%, i.e. 460 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 654. 0 out of 0 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	**^{1}H**	**^{13}C**	**^{15}N**
Sugar	344/384 (90%)	216/224 (96%)	128/160 (80%)	0/0 (—%)
Base	116/270 (43%)	64/174 (37%)	39/44 (89%)	13/52 (25%)
Overall	460/654 (70%)	280/398 (70%)	167/204 (82%)	13/52 (25%)

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 70%, i.e. 460 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 654. 0 out of 0 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

	Total	^{1}H	^{13}C	^{15}N
Sugar	344/384 (90%)	216/224 (96%)	128/160 (80%)	0/0 (—%)
Base	116/270 (43%)	64/174 (37%)	39/44 (89%)	13/52 (25%)
Overall	460/654 (70%)	280/398 (70%)	167/204 (82%)	13/52 (25%)

7.1.4 Statistically unusual chemical shifts (i)

The following table lists the statistically unusual chemical shifts. These are statistical measures, and large deviations from the mean do not necessarily imply incorrect assignments. Molecules containing paramagnetic centres or hemes are expected to give rise to anomalous chemical shifts.

List Id	Chain	Res	Type	Atom	Shift, *ppm*	Expected range, *ppm*	Z-score
1	A	9	DT	C2’	67.59	34.67 – 45.17	26.3
1	A	1	DA	C2’	67.97	34.96 – 45.68	25.8
1	A	21	DA	C2’	67.97	34.96 – 45.68	25.8
1	A	24	DA	C2’	67.97	34.96 – 45.68	25.8
1	A	17	DA	C2’	67.06	34.96 – 45.68	24.9
1	A	5	DC	C5	66.82	92.01 – 105.04	-24.3
1	A	31	DG	C2’	71.80	32.65 – 47.92	20.6
1	A	6	DG	C2’	71.65	32.65 – 47.92	20.5
1	A	3	DG	C2’	70.07	32.65 – 47.92	19.5
1	A	13	DG	C2’	70.05	32.65 – 47.92	19.5
1	A	5	DC	C2’	69.67	32.52 – 47.86	19.2
1	A	7	DG	C2’	69.37	32.65 – 47.92	19.1
1	A	29	DG	C2’	69.09	32.65 – 47.92	18.9
1	A	4	DG	C2’	68.89	32.65 – 47.92	18.7
1	A	11	DG	C2’	68.62	32.65 – 47.92	18.6
1	A	25	DG	C2’	68.49	32.65 – 47.92	18.5
1	A	32	DG	C2’	68.02	32.65 – 47.92	18.2
1	A	2	DG	C2’	67.42	32.65 – 47.92	17.8
1	A	23	DG	C2’	67.28	32.65 – 47.92	17.7
1	A	27	DG	C2’	67.25	32.65 – 47.92	17.6
1	A	19	DG	C2’	67.06	32.65 – 47.92	17.5
1	A	20	DG	C2’	66.80	32.65 – 47.92	17.4
1	A	18	DG	C2’	66.68	32.65 – 47.92	17.3
1	A	28	DG	C2’	66.24	32.65 – 47.92	17.0
1	A	29	DG	H4’	2.34	3.37 – 5.35	-10.2
1	A	31	DG	H5”	2.40	2.89 – 5.33	-7.0

7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots (i)

No *random coil index*(RCI) plot could be generated from the current chemical shift list. RCI is only applicable to proteins

8 NMR restraints analysis (i)

8.1 Conformationally restricting restraints (i)

The following table provides the summary of experimentally observed NMR restraints in different categories. Restraints are classified into different categories based on the sequence separation of the atoms involved.

Description	Value
Total distance restraints	873
Intra-residue (|i-j|=0)	500
Sequential (|i-j|=1)	201
Medium range (|i-j|>1 and |i-j|<5)	54
Long range (|i-j|≥5)	118
Inter-chain	0
Hydrogen bond restraints	0
Disulfide bond restraints	0
Total dihedral-angle restraints	0
Number of unmapped restraints	0
Number of restraints per residue	27.3
Number of long range restraints per residue[1]	3.7

[1]Long range hydrogen bonds and disulfide bonds are counted as long range restraints while calculating the number of long range restraints per residue

8.2 Residual restraint violations (i)

This section provides the overview of the restraint violations analysis. The violations are binned as small, medium and large violations based on its absolute value. Average number of violations per model is calculated by dividing the total number of violations in each bin by the size of the ensemble.

8.2.1 Average number of distance violations per model (i)

Distance violations less than 0.1 Å are not included in the calculation.

Bins (Å)	Average number of violations per model	Max (Å)
0.1-0.2 (Small)	87.0	0.2
0.2-0.5 (Medium)	156.7	0.5
>0.5 (Large)	45.6	4.98

8.2.2 Average number of dihedral-angle violations per model (i)

Dihedral-angle violations less than 1° are not included in the calculation.There are no dihedral-angle violations

9 Distance violation analysis (i)

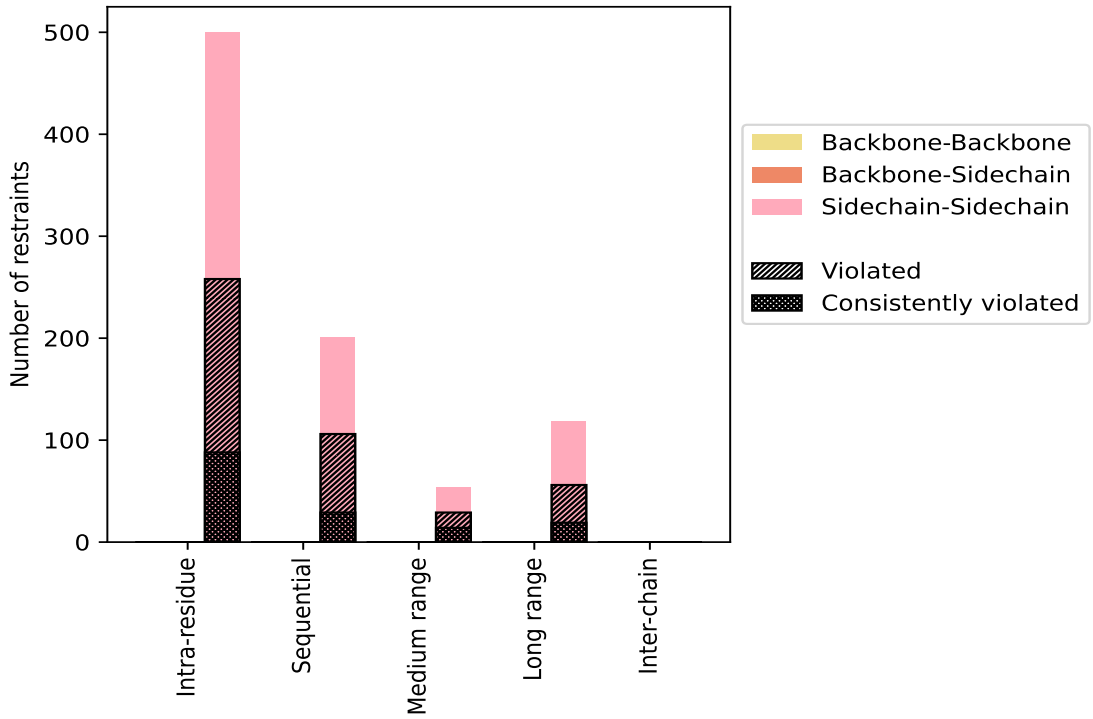
9.1 Summary of distance violations (i)

The following table shows the summary of distance violations in different restraint categories based on the sequence separation of the atoms involved. Each category is further sub-divided into three sub-categories based on the atoms involved. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Restraints type	Count	%[1]	Violated[3]			Consistently Violated[4]		
			Count	%[2]	%[1]	Count	%[2]	%[1]
Intra-residue (|i-j|=0)	500	57.3	258	51.6	29.6	88	17.6	10.1
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	500	57.3	258	51.6	29.6	88	17.6	10.1
Sequential (|i-j|=1)	201	23.0	106	52.7	12.1	29	14.4	3.3
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	201	23.0	106	52.7	12.1	29	14.4	3.3
Medium range (|i-j|>1 & |i-j|<5)	54	6.2	29	53.7	3.3	14	25.9	1.6
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	54	6.2	29	53.7	3.3	14	25.9	1.6
Long range (|i-j|≥5)	118	13.5	56	47.5	6.4	19	16.1	2.2
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	118	13.5	56	47.5	6.4	19	16.1	2.2
Inter-chain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Hydrogen bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Disulfide bond	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Total	873	100.0	449	51.4	51.4	150	17.2	17.2
Backbone-Backbone	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Backbone-Sidechain	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
Sidechain-Sidechain	873	100.0	449	51.4	51.4	150	17.2	17.2

[1] percentage calculated with respect to the total number of distance restraints, [2] percentage calculated with respect to the number of restraints in a particular restraint category, [3] violated in at least one model, [4] violated in all the models

9.1.1 Bar chart : Distribution of distance restraints and violations (i)



Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories. The hydrogen bonds and disulfied bonds are counted in their appropriate category on the x-axis

9.2 Distance violation statistics for each model (i)

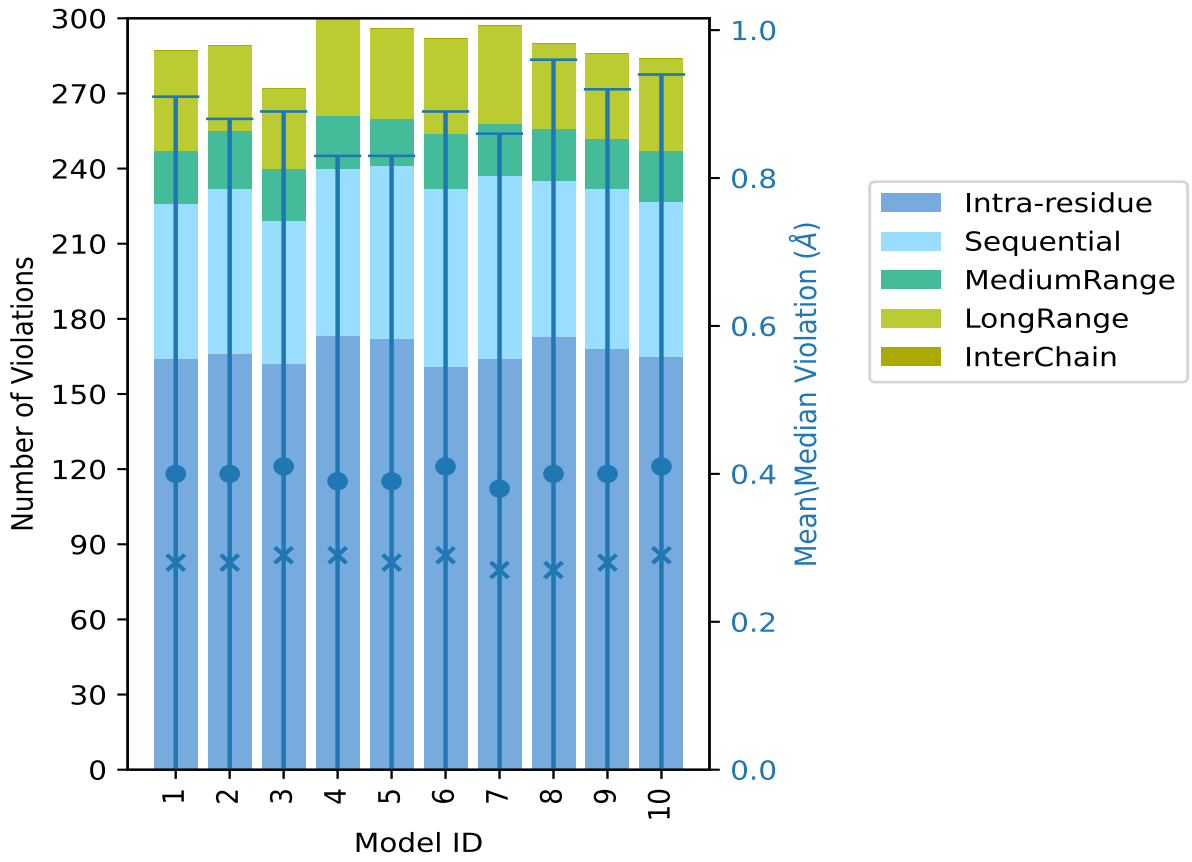
The following table provides the distance violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 0.1 Å are not included in the statistics.

Model ID	Number of violations						Mean (Å)	Max (Å)	SD[6] (Å)	Median (Å)
	IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total				
1	164	62	21	40	0	287	0.4	4.34	0.51	0.28
2	166	66	23	34	0	289	0.4	3.9	0.48	0.28
3	162	57	21	32	0	272	0.41	3.74	0.48	0.29
4	173	67	21	39	0	300	0.39	3.33	0.44	0.29
5	172	69	19	36	0	296	0.39	3.28	0.44	0.28
6	161	71	22	38	0	292	0.41	3.77	0.48	0.29
7	164	73	21	39	0	297	0.38	4.04	0.48	0.27
8	173	62	21	34	0	290	0.4	4.98	0.56	0.27
9	168	64	20	34	0	286	0.4	4.31	0.52	0.28
10	165	62	20	37	0	284	0.41	4.58	0.53	0.29

[1]Intra-residue restraints, [2]Sequential restraints, [3]Medium range restraints, [4]Long range restraints,

[5]Inter-chain restraints, [6]Standard deviation

9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model (i)



The mean(dot),median(x) and the standard deviation are shown in blue with respect to the y axis on the right

9.3 Distance violation statistics for the ensemble (i)

Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 424(IR:242, SQ:95, MR:25, LR:62, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total	Count[6]	%
30	14	4	8	0	56	1	10.0
22	7	1	3	0	33	2	20.0
15	7	2	3	0	27	3	30.0
13	12	0	5	0	30	4	40.0

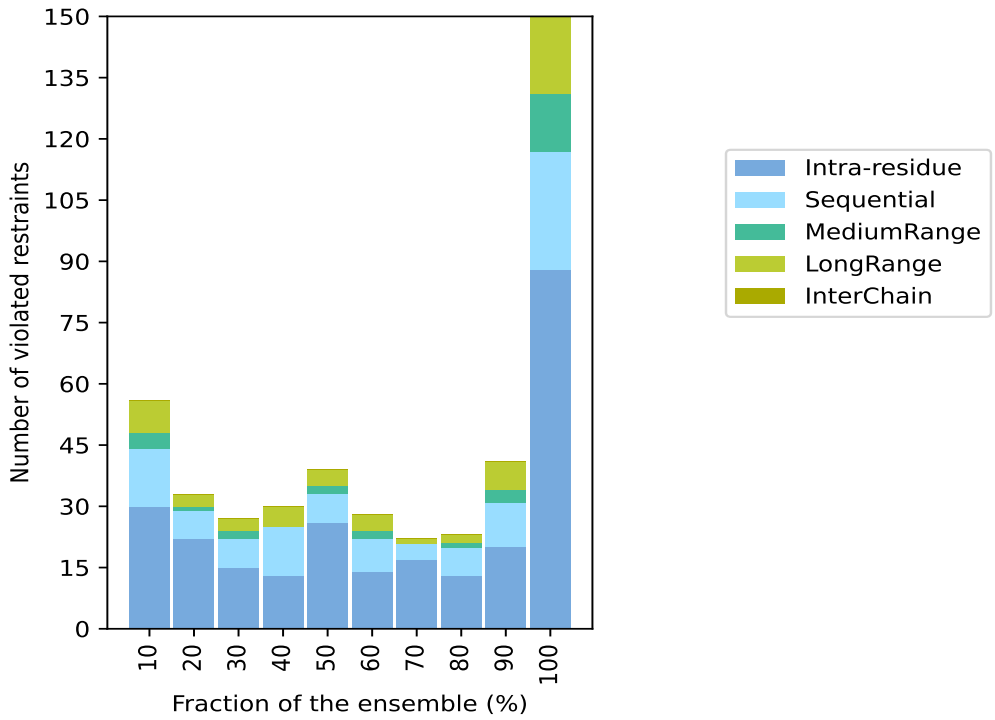
Continued on next page...

Continued from previous page...

Number of violated restraints						Fraction of the ensemble	
IR[1]	SQ[2]	MR[3]	LR[4]	IC[5]	Total	Count[6]	%
26	7	2	4	0	39	5	50.0
14	8	2	4	0	28	6	60.0
17	4	0	1	0	22	7	70.0
13	7	1	2	0	23	8	80.0
20	11	3	7	0	41	9	90.0
88	29	14	19	0	150	10	100.0

[1]Intra-residue restraints, [2]Sequential restraints, [3]Medium range restraints, [4]Long range restraints, [5]Inter-chain restraints, [6] Number of models with violations

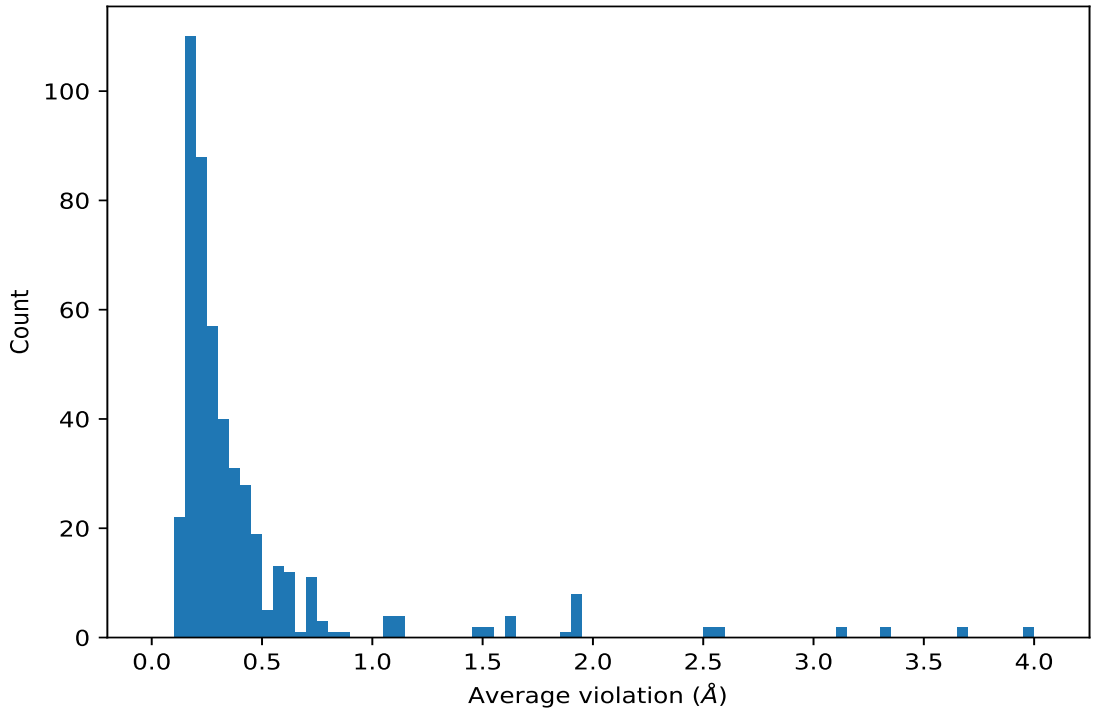
9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble (i)



9.4 Most violated distance restraints in the ensemble (i)

9.4.1 Histogram : Distribution of mean distance violations (i)

The following histogram shows the distribution of the average value of the violation. The average is calculated for each restraint that is violated in more than one model over all the violated models in the ensemble



9.4.2 Table: Most violated distance restraints (i)

The following table provides the mean and the standard deviation of the violation for each restraint sorted by number of violated models and the mean value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint. Rows with same key represent combinatorial or ambiguous restraints and are counted as a single restraint.

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,165)	1:A:10:DT:H5'	1:A:6:DG:H8	10	3.96	0.56	3.9
(1,165)	1:A:10:DT:H5"	1:A:6:DG:H8	10	3.96	0.56	3.9
(1,796)	1:A:10:DT:H5'	1:A:6:DG:H2'	10	3.69	0.5	3.65
(1,796)	1:A:10:DT:H5"	1:A:6:DG:H2'	10	3.69	0.5	3.65
(1,163)	1:A:10:DT:H5'	1:A:6:DG:H1'	10	3.3	0.43	3.3
(1,163)	1:A:10:DT:H5"	1:A:6:DG:H1'	10	3.3	0.43	3.3
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	10	3.11	0.37	3.11
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	10	3.11	0.37	3.11
(1,806)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H8	10	2.57	0.23	2.58
(1,806)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H8	10	2.57	0.23	2.58
(1,808)	1:A:9:DT:H2"	1:A:8:DT:H5'	10	2.51	0.74	2.46
(1,808)	1:A:9:DT:H2"	1:A:8:DT:H5"	10	2.51	0.74	2.46
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	10	1.92	0.12	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	10	1.92	0.12	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5'	10	1.92	0.12	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5"	10	1.92	0.12	1.96

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5'	10	1.92	0.12	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5"	10	1.92	0.12	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5'	10	1.92	0.12	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5"	10	1.92	0.12	1.96
(1,793)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H5'	10	1.88	0.09	1.87
(1,322)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H1'	10	1.64	0.06	1.66
(1,322)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H1'	10	1.64	0.06	1.66
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1'	10	1.64	0.06	1.66
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	10	1.64	0.06	1.66
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	10	1.5	0.07	1.53
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	10	1.5	0.07	1.53
(1,66)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H1'	10	1.47	0.25	1.48
(1,66)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H1'	10	1.47	0.25	1.48
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5'	10	1.14	0.61	1.12
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5"	10	1.14	0.61	1.12
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	10	1.13	0.25	1.17
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	10	1.13	0.25	1.17
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	10	1.07	0.19	1.06
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	10	1.07	0.19	1.06
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	10	1.07	0.19	1.06
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	10	1.07	0.19	1.06
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	10	0.88	0.14	0.92
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	10	0.83	0.14	0.8
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	10	0.79	0.19	0.8
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	10	0.79	0.19	0.8
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	10	0.72	0.12	0.74
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	10	0.71	0.08	0.73
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	10	0.71	0.08	0.73
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	10	0.71	0.08	0.73
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	10	0.71	0.08	0.73
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	10	0.71	0.09	0.72
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	10	0.71	0.09	0.72
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	10	0.65	0.08	0.66
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	10	0.64	0.08	0.62
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	10	0.63	0.12	0.64
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	10	0.63	0.12	0.64
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	10	0.61	0.05	0.62
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	10	0.6	0.1	0.57
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	10	0.6	0.07	0.6
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	10	0.6	0.07	0.6
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	10	0.6	0.13	0.62
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	10	0.6	0.14	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	10	0.6	0.14	0.56
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	10	0.6	0.14	0.56
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	10	0.6	0.14	0.56
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	10	0.58	0.07	0.57
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	10	0.58	0.14	0.57
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	10	0.58	0.14	0.57
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	10	0.58	0.14	0.57
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	10	0.58	0.14	0.57
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	10	0.57	0.22	0.58
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	10	0.56	0.1	0.54
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	10	0.55	0.08	0.56
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	10	0.55	0.09	0.55
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	10	0.55	0.06	0.55
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	10	0.55	0.06	0.55
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	10	0.55	0.06	0.55
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	10	0.55	0.06	0.55
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	10	0.54	0.15	0.48
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	10	0.53	0.11	0.54
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	10	0.51	0.09	0.52
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	10	0.49	0.03	0.5
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	10	0.49	0.09	0.49
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	10	0.49	0.09	0.48
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	10	0.48	0.11	0.52
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	10	0.48	0.06	0.46
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	10	0.47	0.08	0.45
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	10	0.47	0.1	0.44
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	10	0.46	0.15	0.5
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	10	0.46	0.15	0.5
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	10	0.46	0.14	0.46
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	10	0.46	0.14	0.46
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	10	0.46	0.14	0.46
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	10	0.46	0.14	0.46
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	10	0.45	0.14	0.44
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	10	0.45	0.14	0.44
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	10	0.45	0.08	0.44
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	10	0.45	0.07	0.43
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	10	0.45	0.06	0.44
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	10	0.44	0.08	0.44
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	10	0.44	0.06	0.44
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	10	0.43	0.06	0.44
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	10	0.43	0.14	0.4
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	10	0.43	0.05	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	10	0.43	0.06	0.41
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	10	0.43	0.11	0.39
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	10	0.42	0.08	0.43
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	10	0.42	0.03	0.43
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	10	0.42	0.1	0.44
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	10	0.42	0.1	0.44
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	10	0.42	0.09	0.44
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	10	0.42	0.08	0.4
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	10	0.41	0.19	0.34
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	10	0.41	0.19	0.34
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	10	0.41	0.1	0.41
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	10	0.4	0.05	0.4
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	10	0.4	0.06	0.4
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	10	0.4	0.06	0.4
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	10	0.4	0.07	0.39
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	10	0.4	0.07	0.39
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	10	0.4	0.07	0.39
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	10	0.4	0.07	0.39
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	10	0.4	0.14	0.43
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	10	0.4	0.14	0.43
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	10	0.4	0.14	0.43
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	10	0.4	0.14	0.43
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	10	0.39	0.08	0.38
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	10	0.39	0.09	0.42
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	10	0.39	0.05	0.36
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	10	0.38	0.1	0.38
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	10	0.38	0.1	0.38
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	10	0.38	0.03	0.38
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	10	0.37	0.09	0.37
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	10	0.36	0.1	0.38
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	10	0.36	0.05	0.36
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	10	0.36	0.07	0.36
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	10	0.36	0.11	0.35
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	10	0.36	0.07	0.37
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	10	0.36	0.08	0.38
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	10	0.35	0.08	0.35
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	10	0.35	0.13	0.35
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	10	0.35	0.06	0.35
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	10	0.35	0.07	0.36
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	10	0.35	0.07	0.33
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	10	0.34	0.08	0.34
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	10	0.34	0.09	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	10	0.34	0.05	0.36
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	10	0.33	0.06	0.34
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	10	0.33	0.07	0.33
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	10	0.33	0.04	0.32
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	10	0.33	0.05	0.33
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	10	0.33	0.06	0.33
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	10	0.32	0.05	0.31
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	10	0.32	0.09	0.35
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	10	0.32	0.1	0.31
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	10	0.32	0.1	0.31
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	10	0.32	0.07	0.34
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	10	0.32	0.08	0.32
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	10	0.32	0.04	0.3
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	10	0.31	0.05	0.32
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	10	0.31	0.08	0.31
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	10	0.31	0.07	0.31
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	10	0.31	0.07	0.3
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	10	0.31	0.03	0.31
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	10	0.31	0.08	0.28
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	10	0.3	0.09	0.32
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	10	0.3	0.06	0.3
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	10	0.3	0.04	0.3
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	10	0.3	0.07	0.3
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	10	0.29	0.06	0.3
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	10	0.29	0.14	0.24
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	10	0.29	0.1	0.32
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	10	0.29	0.08	0.3
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	10	0.29	0.05	0.29
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	10	0.29	0.11	0.25
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	10	0.29	0.11	0.25
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	10	0.29	0.06	0.31
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	10	0.29	0.1	0.3
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	10	0.29	0.09	0.29
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	10	0.28	0.04	0.28
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	10	0.28	0.08	0.29
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	10	0.28	0.08	0.27
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	10	0.28	0.07	0.26
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	10	0.27	0.08	0.26
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	10	0.27	0.07	0.26
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	10	0.27	0.09	0.28
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	10	0.27	0.09	0.3
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	10	0.26	0.08	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	10	0.26	0.07	0.29
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	10	0.26	0.1	0.24
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	10	0.26	0.08	0.26
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	10	0.26	0.08	0.26
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	10	0.25	0.06	0.24
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	10	0.25	0.08	0.26
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	10	0.25	0.11	0.26
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	10	0.24	0.08	0.24
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	10	0.24	0.08	0.22
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	10	0.24	0.05	0.24
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	10	0.23	0.05	0.22
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	10	0.23	0.1	0.17
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	10	0.23	0.08	0.23
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	10	0.23	0.08	0.21
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	10	0.22	0.06	0.26
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	10	0.22	0.07	0.2
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	10	0.21	0.07	0.19
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	10	0.19	0.07	0.18
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	10	0.19	0.04	0.18
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	10	0.19	0.06	0.2
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	10	0.19	0.06	0.18
(1,795)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H2'	9	0.51	0.2	0.6
(1,795)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H2'	9	0.51	0.2	0.6
(1,400)	1:A:8:DT:H3'	1:A:8:DT:H6	9	0.49	0.12	0.5
(1,577)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2'	9	0.4	0.09	0.37
(1,62)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H8	9	0.39	0.11	0.42
(1,213)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2"	9	0.37	0.13	0.38
(1,418)	1:A:4:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	9	0.37	0.06	0.38
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	9	0.36	0.16	0.34
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	9	0.36	0.16	0.34
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H21	9	0.36	0.16	0.34
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H22	9	0.36	0.16	0.34
(1,96)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	9	0.34	0.07	0.38
(1,573)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H4'	9	0.34	0.05	0.36
(1,857)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H8	9	0.32	0.09	0.31
(1,518)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	9	0.31	0.09	0.31
(1,65)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H6	9	0.31	0.1	0.32
(1,456)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2'	9	0.31	0.09	0.34
(1,519)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H1'	9	0.31	0.05	0.29
(1,697)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H3'	9	0.3	0.08	0.29
(1,655)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H4'	9	0.29	0.12	0.3
(1,483)	1:A:2:DG:H2"	1:A:1:DA:H8	9	0.29	0.08	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,735)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H2'	9	0.28	0.08	0.26
(1,828)	1:A:3:DG:H8	1:A:1:DA:H2'	9	0.28	0.09	0.28
(1,457)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H3'	9	0.27	0.06	0.31
(1,847)	1:A:31:DG:H1'	1:A:13:DG:H1'	9	0.27	0.07	0.24
(1,169)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H1'	9	0.26	0.08	0.26
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	9	0.26	0.06	0.25
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	9	0.26	0.06	0.25
(1,868)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2"	9	0.25	0.1	0.25
(1,238)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5"	9	0.25	0.07	0.25
(1,574)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H1	9	0.24	0.08	0.24
(1,327)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H1'	9	0.24	0.08	0.26
(1,239)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2"	9	0.24	0.07	0.25
(1,281)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H3'	9	0.23	0.09	0.19
(1,257)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H8	9	0.23	0.08	0.2
(1,256)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	9	0.23	0.05	0.24
(1,114)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H4'	9	0.22	0.08	0.21
(1,615)	1:A:7:DG:H1	1:A:12:DG:H8	9	0.22	0.06	0.24
(1,517)	1:A:12:DG:H1	1:A:12:DG:H1'	9	0.22	0.08	0.22
(1,170)	1:A:4:DG:H3'	1:A:30:DA:H1'	9	0.22	0.08	0.2
(1,341)	1:A:30:DA:H2'	1:A:30:DA:H2"	9	0.19	0.05	0.18
(1,700)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H2'	9	0.19	0.04	0.18
(1,590)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H8	9	0.18	0.06	0.17
(1,27)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H4'	9	0.18	0.04	0.18
(1,18)	1:A:27:DG:H8	1:A:28:DG:H8	9	0.17	0.04	0.18
(1,342)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H2'	9	0.15	0.05	0.12
(1,564)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H8	8	0.29	0.12	0.32
(1,143)	1:A:4:DG:H1	1:A:31:DG:H5"	8	0.28	0.07	0.28
(1,558)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H8	8	0.26	0.06	0.24
(1,373)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H5'	8	0.25	0.09	0.24
(1,744)	1:A:3:DG:H2"	1:A:3:DG:H3'	8	0.25	0.06	0.25
(1,195)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	8	0.25	0.09	0.24
(1,548)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H8	8	0.24	0.06	0.22
(1,626)	1:A:11:DG:H8	1:A:10:DT:H6	8	0.24	0.08	0.22
(1,551)	1:A:28:DG:H1	1:A:27:DG:H8	8	0.23	0.06	0.23
(1,800)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H2'	8	0.23	0.07	0.26
(1,749)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H3'	8	0.22	0.04	0.22
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2'	8	0.21	0.09	0.2
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2"	8	0.21	0.09	0.2
(1,870)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H2'	8	0.2	0.04	0.19
(1,750)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H3'	8	0.2	0.03	0.18
(1,45)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H8	8	0.19	0.04	0.2
(1,393)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H2"	8	0.19	0.05	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2'	8	0.19	0.09	0.17
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2"	8	0.19	0.09	0.17
(1,773)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H4'	8	0.18	0.05	0.16
(1,137)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H5'	8	0.18	0.05	0.16
(1,304)	1:A:2:DG:H1'	1:A:2:DG:H4'	8	0.16	0.05	0.14
(1,191)	1:A:6:DG:H1'	1:A:6:DG:H2'	8	0.16	0.03	0.16
(1,384)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H3'	8	0.15	0.02	0.14
(1,30)	1:A:4:DG:H2"	1:A:4:DG:H2'	8	0.14	0.02	0.15
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	7	0.38	0.14	0.37
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	7	0.38	0.14	0.37
(1,678)	1:A:18:DG:H8	1:A:19:DG:H2"	7	0.3	0.13	0.31
(1,135)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H4'	7	0.29	0.1	0.28
(1,80)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H1'	7	0.26	0.1	0.23
(1,60)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H2"	7	0.25	0.05	0.22
(1,742)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H3'	7	0.24	0.08	0.24
(1,201)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H5'	7	0.24	0.05	0.23
(1,568)	1:A:25:DG:H1	1:A:1:DA:H1'	7	0.22	0.07	0.21
(1,715)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H5"	7	0.22	0.07	0.2
(1,363)	1:A:25:DG:H5'	1:A:25:DG:H3'	7	0.21	0.04	0.21
(1,363)	1:A:25:DG:H5"	1:A:25:DG:H3'	7	0.21	0.04	0.21
(1,647)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2"	7	0.2	0.09	0.15
(1,394)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H2'	7	0.2	0.07	0.2
(1,98)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2"	7	0.19	0.06	0.19
(1,385)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H3'	7	0.19	0.02	0.18
(1,273)	1:A:28:DG:H1'	1:A:28:DG:H2"	7	0.19	0.03	0.19
(1,177)	1:A:4:DG:H2'	1:A:4:DG:H3'	7	0.19	0.04	0.18
(1,71)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H3'	7	0.18	0.05	0.19
(1,349)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	7	0.18	0.06	0.17
(1,81)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H3'	7	0.17	0.05	0.16
(1,703)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H4'	7	0.17	0.03	0.18
(1,119)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2"	7	0.16	0.04	0.15
(1,625)	1:A:12:DG:H2"	1:A:12:DG:H2'	7	0.14	0.02	0.15
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	6	0.71	0.31	0.83
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	6	0.71	0.31	0.83
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5'	6	0.31	0.16	0.28
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5"	6	0.31	0.16	0.28
(1,455)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2"	6	0.29	0.09	0.32
(1,739)	1:A:16:DG:H8	1:A:17:DA:H8	6	0.27	0.16	0.22
(1,398)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H6	6	0.26	0.13	0.26
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5'	6	0.25	0.07	0.24
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5"	6	0.25	0.07	0.24
(1,293)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	6	0.25	0.09	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5'	6	0.24	0.03	0.24
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5"	6	0.24	0.03	0.24
(1,760)	1:A:29:DG:H5'	1:A:29:DG:H4'	6	0.23	0.04	0.22
(1,760)	1:A:29:DG:H5"	1:A:29:DG:H4'	6	0.23	0.04	0.22
(1,624)	1:A:11:DG:H2"	1:A:12:DG:H8	6	0.23	0.04	0.22
(1,823)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H6	6	0.22	0.06	0.2
(1,516)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	6	0.22	0.06	0.24
(1,277)	1:A:29:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	6	0.21	0.08	0.19
(1,841)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H1'	6	0.21	0.08	0.2
(1,68)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2'	6	0.2	0.04	0.21
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5'	6	0.2	0.11	0.18
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5"	6	0.2	0.11	0.18
(1,370)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H3'	6	0.2	0.03	0.19
(1,782)	1:A:32:DG:H8	1:A:30:DA:H5'	6	0.2	0.08	0.2
(1,184)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H4'	6	0.2	0.05	0.2
(1,481)	1:A:2:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	6	0.2	0.07	0.2
(1,320)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H1'	6	0.18	0.05	0.18
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5'	6	0.18	0.04	0.18
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5"	6	0.18	0.04	0.18
(1,79)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	6	0.17	0.05	0.16
(1,482)	1:A:2:DG:H2'	1:A:1:DA:H8	6	0.17	0.05	0.16
(1,153)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H1'	6	0.17	0.05	0.16
(1,406)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	6	0.17	0.05	0.16
(1,26)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H3'	6	0.15	0.04	0.14
(1,252)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H3'	6	0.13	0.02	0.12
(1,670)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H3'	5	0.75	0.21	0.79
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5'	5	0.71	0.18	0.67
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5"	5	0.71	0.18	0.67
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5'	5	0.36	0.12	0.33
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5"	5	0.36	0.12	0.33
(1,308)	1:A:2:DG:H5'	1:A:2:DG:H3'	5	0.31	0.07	0.31
(1,308)	1:A:2:DG:H5"	1:A:2:DG:H3'	5	0.31	0.07	0.31
(1,707)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H5"	5	0.29	0.11	0.27
(1,636)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H8	5	0.28	0.04	0.26
(1,835)	1:A:20:DG:H1'	1:A:21:DA:H2	5	0.25	0.06	0.27
(1,294)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	5	0.23	0.05	0.23
(1,94)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	5	0.23	0.06	0.21
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2'	5	0.23	0.07	0.22
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2"	5	0.23	0.07	0.22
(1,729)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	5	0.22	0.03	0.23
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5'	5	0.21	0.04	0.22
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5"	5	0.21	0.04	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,704)	1:A:5:DC:H3'	1:A:6:DG:H4'	5	0.2	0.04	0.2
(1,449)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H3'	5	0.2	0.08	0.19
(1,112)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H3'	5	0.2	0.04	0.19
(1,129)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H2"	5	0.2	0.02	0.21
(1,222)	1:A:22:DA:H8	1:A:22:DA:H2'	5	0.2	0.04	0.2
(1,333)	1:A:6:DG:H1	1:A:9:DT:H1'	5	0.19	0.06	0.21
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5'	5	0.19	0.05	0.16
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5"	5	0.19	0.05	0.16
(1,466)	1:A:2:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	5	0.19	0.05	0.18
(1,663)	1:A:26:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	5	0.19	0.03	0.21
(1,856)	1:A:10:DT:H6	1:A:1:DA:H2	5	0.19	0.06	0.17
(1,340)	1:A:31:DG:H5"	1:A:31:DG:H2"	5	0.19	0.03	0.21
(1,748)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H3'	5	0.18	0.04	0.17
(1,711)	1:A:24:DA:H2'	1:A:24:DA:H2"	5	0.18	0.01	0.18
(1,432)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H2"	5	0.18	0.04	0.18
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5'	5	0.17	0.03	0.19
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5"	5	0.17	0.03	0.19
(1,439)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H4'	5	0.17	0.05	0.18
(1,426)	1:A:29:DG:H2'	1:A:29:DG:H3'	5	0.17	0.03	0.18
(1,215)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2'	5	0.16	0.04	0.14
(1,381)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5'	5	0.16	0.04	0.14
(1,505)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	5	0.16	0.03	0.14
(1,603)	1:A:16:DG:H8	1:A:16:DG:H5"	5	0.16	0.05	0.13
(1,578)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2"	5	0.15	0.04	0.13
(1,802)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H2"	5	0.15	0.03	0.14
(1,248)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H1'	5	0.15	0.03	0.15
(1,614)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H2'	5	0.15	0.03	0.14
(1,217)	1:A:21:DA:H2"	1:A:21:DA:H2'	5	0.15	0.03	0.15
(1,241)	1:A:10:DT:H2"	1:A:10:DT:H2'	5	0.13	0.02	0.12
(1,202)	1:A:20:DG:H1'	1:A:20:DG:H5"	4	0.36	0.09	0.38
(1,399)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H6	4	0.31	0.06	0.3
(1,506)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H1	4	0.24	0.03	0.24
(1,815)	1:A:23:DG:H1'	1:A:24:DA:H4'	4	0.24	0.04	0.24
(1,673)	1:A:20:DG:H5"	1:A:19:DG:H1'	4	0.24	0.07	0.21
(1,530)	1:A:11:DG:H1	1:A:25:DG:H8	4	0.21	0.08	0.2
(1,846)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H1'	4	0.2	0.04	0.22
(1,72)	1:A:7:DG:H3'	1:A:8:DT:H6	4	0.2	0.04	0.19
(1,118)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H2"	4	0.2	0.04	0.19
(1,262)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H3'	4	0.2	0.07	0.2
(1,229)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	4	0.19	0.03	0.21
(1,136)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5"	4	0.19	0.03	0.18
(1,567)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1	4	0.19	0.07	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,855)	1:A:30:DA:H4'	1:A:29:DG:H4'	4	0.19	0.05	0.19
(1,180)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H1'	4	0.19	0.04	0.18
(1,724)	1:A:21:DA:H5"	1:A:21:DA:H2"	4	0.19	0.04	0.2
(1,296)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H6	4	0.19	0.07	0.17
(1,93)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	4	0.17	0.04	0.18
(1,161)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H8	4	0.17	0.05	0.16
(1,331)	1:A:11:DG:H1	1:A:25:DG:H1'	4	0.17	0.05	0.16
(1,452)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H5'	4	0.16	0.02	0.16
(1,452)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H5"	4	0.16	0.02	0.16
(1,467)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H3'	4	0.16	0.03	0.16
(1,653)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H5"	4	0.16	0.02	0.17
(1,838)	1:A:11:DG:H1'	1:A:12:DG:H1'	4	0.16	0.03	0.15
(1,869)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2'	4	0.16	0.04	0.16
(1,713)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H5"	4	0.16	0.03	0.15
(1,431)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H1'	4	0.15	0.04	0.14
(1,524)	1:A:4:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	4	0.15	0.02	0.14
(1,359)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H4'	4	0.14	0.03	0.14
(1,535)	1:A:32:DG:H1	1:A:13:DG:H8	4	0.14	0.03	0.12
(1,402)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	3	0.35	0.02	0.37
(1,473)	1:A:3:DG:H5'	1:A:3:DG:H3'	3	0.25	0.1	0.26
(1,253)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2"	3	0.23	0.06	0.25
(1,723)	1:A:19:DG:H5'	1:A:20:DG:H2'	3	0.21	0.07	0.24
(1,723)	1:A:19:DG:H5'	1:A:20:DG:H2"	3	0.21	0.07	0.24
(1,11)	1:A:27:DG:H1	1:A:26:DG:H1	3	0.2	0.06	0.18
(1,212)	1:A:21:DA:H8	1:A:20:DG:H5'	3	0.2	0.04	0.21
(1,651)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H5'	3	0.2	0.07	0.21
(1,651)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H5"	3	0.2	0.07	0.21
(1,649)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H2'	3	0.2	0.06	0.16
(1,649)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H2"	3	0.2	0.06	0.16
(1,733)	1:A:11:DG:H1	1:A:24:DA:H2"	3	0.19	0.02	0.2
(1,205)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H5'	3	0.19	0.04	0.18
(1,234)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	3	0.18	0.06	0.16
(1,210)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H5"	3	0.18	0.04	0.17
(1,172)	1:A:31:DG:H8	1:A:30:DA:H2'	3	0.17	0.03	0.18
(1,484)	1:A:27:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	3	0.17	0.01	0.18
(1,230)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H2'	3	0.17	0.04	0.19
(1,616)	1:A:32:DG:H1	1:A:12:DG:H8	3	0.17	0.02	0.16
(1,824)	1:A:11:DG:H1	1:A:24:DA:H8	3	0.17	0.02	0.16
(1,237)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5'	3	0.16	0.02	0.16
(1,706)	1:A:24:DA:H1'	1:A:24:DA:H5"	3	0.16	0.04	0.18
(1,353)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	3	0.15	0.03	0.15
(1,321)	1:A:27:DG:H1	1:A:28:DG:H1'	3	0.15	0.05	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,240)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2'	3	0.14	0.02	0.13
(1,591)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H1'	3	0.13	0.01	0.13
(1,514)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H1'	3	0.13	0.01	0.13
(1,541)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H8	3	0.13	0.01	0.13
(1,648)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2'	3	0.13	0.02	0.12
(1,44)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H8	3	0.12	0.0	0.12
(1,725)	1:A:10:DT:H2'	1:A:10:DT:H5'	2	0.32	0.04	0.32
(1,674)	1:A:20:DG:H5'	1:A:19:DG:H1'	2	0.29	0.02	0.29
(1,204)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H5"	2	0.22	0.07	0.22
(1,464)	1:A:14:DA:H5'	1:A:14:DA:H2'	2	0.2	0.06	0.2
(1,464)	1:A:14:DA:H5"	1:A:14:DA:H2'	2	0.2	0.06	0.2
(1,131)	1:A:6:DG:H1	1:A:7:DG:H2'	2	0.2	0.03	0.2
(1,492)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H1'	2	0.2	0.01	0.2
(1,696)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H3'	2	0.2	0.03	0.2
(1,144)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H4'	2	0.19	0.01	0.19
(1,246)	1:A:9:DT:H1'	1:A:9:DT:H4'	2	0.19	0.05	0.19
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H2'	2	0.18	0.01	0.18
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H2"	2	0.18	0.01	0.18
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H21	2	0.18	0.01	0.18
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H22	2	0.18	0.01	0.18
(1,813)	1:A:4:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	2	0.18	0.04	0.18
(1,618)	1:A:11:DG:H8	1:A:12:DG:H8	2	0.18	0.04	0.18
(1,752)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H2"	2	0.18	0.04	0.18
(1,231)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H4'	2	0.18	0.02	0.18
(1,686)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H5"	2	0.18	0.04	0.18
(1,200)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H3'	2	0.16	0.04	0.16
(1,451)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H4'	2	0.16	0.04	0.16
(1,866)	1:A:12:DG:H2"	1:A:14:DA:H2	2	0.16	0.03	0.16
(1,378)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H2'	2	0.16	0.04	0.16
(1,454)	1:A:13:DG:H5'	1:A:14:DA:H8	2	0.16	0.02	0.16
(1,549)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H8	2	0.16	0.01	0.16
(1,187)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2'	2	0.15	0.02	0.15
(1,223)	1:A:22:DA:H8	1:A:22:DA:H2"	2	0.15	0.0	0.15
(1,745)	1:A:14:DA:H1'	1:A:15:DA:H8	2	0.14	0.03	0.14
(1,21)	1:A:4:DG:H1'	1:A:4:DG:H2"	2	0.14	0.02	0.14
(1,211)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H5'	2	0.14	0.02	0.14
(1,460)	1:A:13:DG:H5'	1:A:14:DA:H1'	2	0.14	0.0	0.14
(1,224)	1:A:22:DA:H1'	1:A:22:DA:H2'	2	0.14	0.01	0.14
(1,245)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H4'	2	0.14	0.01	0.14
(1,672)	1:A:19:DG:H1'	1:A:19:DG:H4'	2	0.14	0.01	0.14
(1,430)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H1'	2	0.13	0.02	0.13
(1,867)	1:A:14:DA:H2	1:A:15:DA:H2	2	0.12	0.01	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

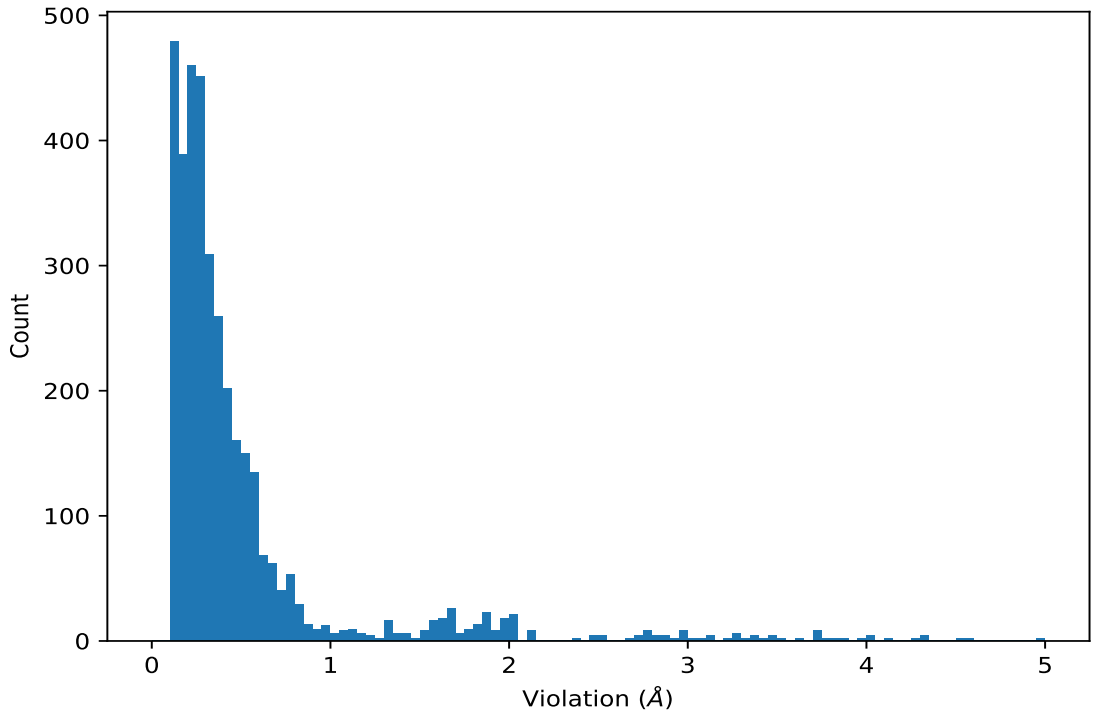
Key	Atom-1	Atom-2	Models[1]	Mean (Å)	SD[1] (Å)	Median (Å)
(1,858)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H4'	2	0.12	0.0	0.12

[1]Number of violated models, [2]Standard deviation

9.5 All violated distance restraints (i)

9.5.1 Histogram : Distribution of distance violations (i)

The following histogram shows the distribution of the absolute value of the violation for all violated restraints in the ensemble.



9.5.2 Table : All distance violations (i)

The following table lists the absolute value of the violation for each restraint in the ensemble sorted by its value. The Key (restraint list ID, restraint ID) is the unique identifier for a given restraint. Rows with same key represent combinatorial or ambiguous restraints and are counted as a single restraint.

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,165)	1:A:10:DT:H5'	1:A:6:DG:H8	8	4.98
(1,165)	1:A:10:DT:H5"	1:A:6:DG:H8	8	4.98
(1,165)	1:A:10:DT:H5'	1:A:6:DG:H8	10	4.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,165)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H8	10	4.58
(1,796)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H2’	8	4.51
(1,796)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H2’	8	4.51
(1,165)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H8	1	4.34
(1,165)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H8	1	4.34
(1,165)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H8	9	4.31
(1,165)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H8	9	4.31
(1,796)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H2’	10	4.25
(1,796)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H2’	10	4.25
(1,796)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H2’	9	4.12
(1,796)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H2’	9	4.12
(1,165)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H8	7	4.04
(1,165)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H8	7	4.04
(1,796)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H2’	1	4.03
(1,796)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H2’	1	4.03
(1,163)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H1’	8	3.98
(1,163)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H1’	8	3.98
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5’	2	3.9
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5”	2	3.9
(1,796)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H2’	7	3.83
(1,796)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H2’	7	3.83
(1,165)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H8	6	3.77
(1,165)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H8	6	3.77
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5’	8	3.74
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5”	8	3.74
(1,165)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H8	3	3.74
(1,165)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H8	3	3.74
(1,163)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H1’	9	3.7
(1,163)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H1’	9	3.7
(1,163)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H1’	10	3.7
(1,163)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H1’	10	3.7
(1,163)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H1’	1	3.62
(1,163)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H1’	1	3.62
(1,163)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H1’	7	3.5
(1,163)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H1’	7	3.5
(1,796)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H2’	3	3.47
(1,796)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H2’	3	3.47
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5’	7	3.46
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5”	7	3.46
(1,796)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H2’	6	3.44
(1,796)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H2’	6	3.44
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5’	9	3.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5”	9	3.38
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5’	1	3.36
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5”	1	3.36
(1,165)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H8	4	3.33
(1,165)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H8	4	3.33
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5’	10	3.3
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5”	10	3.3
(1,165)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H8	5	3.28
(1,165)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H8	5	3.28
(1,165)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H8	2	3.26
(1,165)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H8	2	3.26
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5’	4	3.24
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5”	4	3.24
(1,796)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H2’	5	3.12
(1,796)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H2’	5	3.12
(1,163)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H1’	6	3.1
(1,163)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H1’	6	3.1
(1,796)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H2’	2	3.08
(1,796)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H2’	2	3.08
(1,796)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H2’	4	3.03
(1,796)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H2’	4	3.03
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5’	3	2.99
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5”	3	2.99
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5’	6	2.96
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5”	6	2.96
(1,163)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H1’	3	2.96
(1,163)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H1’	3	2.96
(1,163)	1:A:10:DT:H5’	1:A:6:DG:H1’	5	2.95
(1,163)	1:A:10:DT:H5”	1:A:6:DG:H1’	5	2.95
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5’	5	2.92
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5”	5	2.92
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5’	5	2.9
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5”	5	2.9
(1,806)	1:A:9:DT:H5’	1:A:32:DG:H8	8	2.86
(1,806)	1:A:9:DT:H5”	1:A:32:DG:H8	8	2.86
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5’	6	2.84
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5”	6	2.84
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5’	3	2.81
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5”	3	2.81
(1,806)	1:A:9:DT:H5’	1:A:32:DG:H8	10	2.79
(1,806)	1:A:9:DT:H5”	1:A:32:DG:H8	10	2.79
(1,806)	1:A:9:DT:H5’	1:A:32:DG:H8	2	2.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,806)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H8	2	2.78
(1,163)	1:A:10:DT:H5'	1:A:6:DG:H1'	2	2.77
(1,163)	1:A:10:DT:H5"	1:A:6:DG:H1'	2	2.77
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	2	2.75
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	2	2.75
(1,806)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H8	1	2.71
(1,806)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H8	1	2.71
(1,163)	1:A:10:DT:H5'	1:A:6:DG:H1'	4	2.71
(1,163)	1:A:10:DT:H5"	1:A:6:DG:H1'	4	2.71
(1,806)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H8	9	2.66
(1,806)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H8	9	2.66
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	4	2.53
(1,228)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	4	2.53
(1,806)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H8	4	2.5
(1,806)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H8	4	2.5
(1,806)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H8	3	2.47
(1,806)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H8	3	2.47
(1,806)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H8	7	2.46
(1,806)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H8	7	2.46
(1,806)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H8	6	2.39
(1,806)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H8	6	2.39
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	9	2.1
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	9	2.1
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5'	9	2.1
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5"	9	2.1
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5'	9	2.1
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5"	9	2.1
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5'	9	2.1
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5"	9	2.1
(1,806)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H8	5	2.04
(1,806)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H8	5	2.04
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	8	2.04
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	8	2.04
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5'	8	2.04
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5"	8	2.04
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5'	8	2.04
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5"	8	2.04
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5'	8	2.04
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5"	8	2.04
(1,793)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H5'	4	2.02
(1,808)	1:A:9:DT:H2"	1:A:8:DT:H5'	1	2.01
(1,808)	1:A:9:DT:H2"	1:A:8:DT:H5"	1	2.01

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	6	2.0
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	6	2.0
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5'	6	2.0
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5"	6	2.0
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5'	6	2.0
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5"	6	2.0
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5'	6	2.0
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5"	6	2.0
(1,793)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H5'	3	1.99
(1,793)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H5'	2	1.98
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	2	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	2	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5'	2	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5"	2	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5'	2	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5"	2	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5'	2	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5"	2	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	7	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	7	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5'	7	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5"	7	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5'	7	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5"	7	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5'	7	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5"	7	1.96
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	10	1.95
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	10	1.95
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5'	10	1.95
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5"	10	1.95
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5'	10	1.95
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5"	10	1.95
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5'	10	1.95
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5"	10	1.95
(1,793)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H5'	5	1.9
(1,66)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H1'	10	1.9
(1,66)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H1'	10	1.9
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	3	1.89
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	3	1.89
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5'	3	1.89
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5"	3	1.89
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5'	3	1.89

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5”	3	1.89
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5’	3	1.89
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5”	3	1.89
(1,793)	1:A:10:DT:H5”	1:A:10:DT:H5’	6	1.87
(1,793)	1:A:10:DT:H5”	1:A:10:DT:H5’	10	1.86
(1,781)	1:A:28:DG:H2’	1:A:29:DG:H5’	5	1.86
(1,781)	1:A:28:DG:H2’	1:A:29:DG:H5”	5	1.86
(1,781)	1:A:28:DG:H2”	1:A:29:DG:H5’	5	1.86
(1,781)	1:A:28:DG:H2”	1:A:29:DG:H5”	5	1.86
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5’	5	1.86
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5”	5	1.86
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5’	5	1.86
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5”	5	1.86
(1,313)	1:A:2:DG:H2’	1:A:2:DG:H5’	2	1.85
(1,313)	1:A:2:DG:H2’	1:A:2:DG:H5”	2	1.85
(1,793)	1:A:10:DT:H5”	1:A:10:DT:H5’	8	1.83
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5’	10	1.82
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5”	10	1.82
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5’	9	1.8
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5”	9	1.8
(1,781)	1:A:28:DG:H2’	1:A:29:DG:H5’	4	1.8
(1,781)	1:A:28:DG:H2’	1:A:29:DG:H5”	4	1.8
(1,781)	1:A:28:DG:H2”	1:A:29:DG:H5’	4	1.8
(1,781)	1:A:28:DG:H2”	1:A:29:DG:H5”	4	1.8
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5’	4	1.8
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5”	4	1.8
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5’	4	1.8
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5”	4	1.8
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5’	7	1.79
(1,808)	1:A:9:DT:H2”	1:A:8:DT:H5”	7	1.79
(1,793)	1:A:10:DT:H5”	1:A:10:DT:H5’	9	1.79
(1,313)	1:A:2:DG:H2’	1:A:2:DG:H5’	6	1.79
(1,313)	1:A:2:DG:H2’	1:A:2:DG:H5”	6	1.79
(1,793)	1:A:10:DT:H5”	1:A:10:DT:H5’	1	1.78
(1,793)	1:A:10:DT:H5”	1:A:10:DT:H5’	7	1.78
(1,313)	1:A:2:DG:H2’	1:A:2:DG:H5’	3	1.76
(1,313)	1:A:2:DG:H2’	1:A:2:DG:H5”	3	1.76
(1,66)	1:A:9:DT:H5’	1:A:32:DG:H1’	8	1.72
(1,66)	1:A:9:DT:H5”	1:A:32:DG:H1’	8	1.72
(1,322)	1:A:28:DG:H2’	1:A:28:DG:H1’	8	1.71
(1,322)	1:A:28:DG:H2”	1:A:28:DG:H1’	8	1.71
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1’	8	1.71

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	8	1.71
(1,322)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H1'	6	1.7
(1,322)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H1'	6	1.7
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1'	6	1.7
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	6	1.7
(1,322)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H1'	9	1.7
(1,322)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H1'	9	1.7
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1'	9	1.7
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	9	1.7
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5'	5	1.69
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5"	5	1.69
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	1	1.68
(1,781)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	1	1.68
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5'	1	1.68
(1,781)	1:A:28:DG:H2"	1:A:29:DG:H5"	1	1.68
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5'	1	1.68
(1,781)	1:A:28:DG:H21	1:A:29:DG:H5"	1	1.68
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5'	1	1.68
(1,781)	1:A:28:DG:H22	1:A:29:DG:H5"	1	1.68
(1,322)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H1'	7	1.68
(1,322)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H1'	7	1.68
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1'	7	1.68
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	7	1.68
(1,322)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H1'	4	1.67
(1,322)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H1'	4	1.67
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1'	4	1.67
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	4	1.67
(1,808)	1:A:9:DT:H2"	1:A:8:DT:H5'	8	1.65
(1,808)	1:A:9:DT:H2"	1:A:8:DT:H5"	8	1.65
(1,66)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H1'	2	1.65
(1,66)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H1'	2	1.65
(1,322)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H1'	2	1.65
(1,322)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H1'	2	1.65
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1'	2	1.65
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	2	1.65
(1,322)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H1'	5	1.65
(1,322)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H1'	5	1.65
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1'	5	1.65
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	5	1.65
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5'	4	1.64
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5"	4	1.64
(1,322)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H1'	3	1.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,322)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H1'	3	1.6
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1'	3	1.6
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	3	1.6
(1,66)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H1'	1	1.58
(1,66)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H1'	1	1.58
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	4	1.57
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	4	1.57
(1,322)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H1'	10	1.57
(1,322)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H1'	10	1.57
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1'	10	1.57
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	10	1.57
(1,66)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H1'	7	1.55
(1,66)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H1'	7	1.55
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	3	1.55
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	3	1.55
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	6	1.55
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	6	1.55
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	9	1.55
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	9	1.55
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	5	1.54
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	5	1.54
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	10	1.52
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	10	1.52
(1,322)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H1'	1	1.52
(1,322)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H1'	1	1.52
(1,322)	1:A:28:DG:H21	1:A:28:DG:H1'	1	1.52
(1,322)	1:A:28:DG:H22	1:A:28:DG:H1'	1	1.52
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	8	1.46
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	8	1.46
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	1	1.45
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	1	1.45
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	8	1.44
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	8	1.44
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	10	1.43
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	10	1.43
(1,66)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H1'	6	1.4
(1,66)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H1'	6	1.4
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	2	1.4
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	2	1.4
(1,635)	1:A:28:DG:H5'	1:A:27:DG:H2"	7	1.38
(1,635)	1:A:28:DG:H5"	1:A:27:DG:H2"	7	1.38
(1,66)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H1'	3	1.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,66)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H1'	3	1.34
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	1	1.31
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	1	1.31
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	1	1.31
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	1	1.31
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	10	1.31
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	10	1.31
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	10	1.31
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	10	1.31
(1,66)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H1'	4	1.31
(1,66)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H1'	4	1.31
(1,66)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H1'	9	1.3
(1,66)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H1'	9	1.3
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	9	1.3
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	9	1.3
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	1	1.26
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	1	1.26
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	9	1.22
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	9	1.22
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	9	1.22
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	9	1.22
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	8	1.2
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	8	1.2
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	8	1.2
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	8	1.2
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	7	1.2
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	7	1.2
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	6	1.15
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	6	1.15
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	6	1.14
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	5	1.12
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	5	1.12
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	4	1.11
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	4	1.11
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	6	1.1
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	6	1.1
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	3	1.07
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	3	1.07
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	3	1.07
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	3	1.07
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	2	1.05
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	2	1.05

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	2	1.05
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	2	1.05
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	4	1.04
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	1	1.02
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	9	1.02
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	9	1.02
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	10	1.01
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	3	1.0
(1,670)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H3'	5	0.98
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	4	0.98
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	4	0.98
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	4	0.98
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	4	0.98
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	7	0.97
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5'	1	0.97
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5"	1	0.97
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	7	0.97
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	7	0.97
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	7	0.97
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	7	0.97
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	5	0.95
(1,66)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H1'	5	0.95
(1,66)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H1'	5	0.95
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	5	0.93
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	5	0.93
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	9	0.91
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	3	0.91
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	3	0.91
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	2	0.9
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	8	0.88
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	9	0.88
(1,670)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H3'	4	0.88
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	5	0.88
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	5	0.88
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	4	0.87
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	4	0.87
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	3	0.87
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	3	0.87
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	2	0.86
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	2	0.86
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	6	0.86
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	6	0.86

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	9	0.85
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5'	9	0.84
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5"	9	0.84
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	9	0.84
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	8	0.83
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	8	0.83
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	8	0.83
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	8	0.83
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	7	0.82
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	1	0.82
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	6	0.82
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	3	0.82
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	3	0.82
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	3	0.82
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	3	0.82
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	5	0.81
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	3	0.81
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	9	0.81
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	9	0.81
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	5	0.81
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	2	0.81
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	2	0.81
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	2	0.81
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	2	0.81
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	2	0.8
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	4	0.8
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	4	0.8
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	1	0.8
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	2	0.8
(1,795)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H2'	10	0.79
(1,795)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H2'	10	0.79
(1,670)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H3'	3	0.79
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	4	0.79
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	4	0.79
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	3	0.79
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	3	0.79
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	3	0.79
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	3	0.79
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	6	0.78
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	6	0.78
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	6	0.78
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	6	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	6	0.78
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	4	0.78
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	8	0.78
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	6	0.78
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	6	0.78
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	6	0.78
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	6	0.78
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	2	0.78
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	2	0.78
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	2	0.78
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	2	0.78
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	5	0.77
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	9	0.77
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	9	0.77
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	8	0.77
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	2	0.76
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	2	0.76
(1,665)	1:A:27:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	5	0.76
(1,665)	1:A:27:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	5	0.76
(1,665)	1:A:27:DG:H21	1:A:30:DA:H2	5	0.76
(1,665)	1:A:27:DG:H22	1:A:30:DA:H2	5	0.76
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	1	0.76
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	2	0.76
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	2	0.76
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	2	0.76
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	2	0.76
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	6	0.76
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	9	0.76
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	9	0.76
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	9	0.76
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	9	0.76
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	10	0.75
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	1	0.75
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	1	0.75
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	3	0.75
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	3	0.75
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	6	0.75
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	6	0.75
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	3	0.75
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	3	0.75
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	9	0.74
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	6	0.74

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	6	0.74
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	6	0.74
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	6	0.74
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	5	0.74
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	5	0.74
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	5	0.74
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	5	0.74
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	7	0.73
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	8	0.73
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	9	0.73
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	9	0.73
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	4	0.73
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	4	0.73
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	10	0.72
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	5	0.72
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	5	0.72
(1,670)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H3'	6	0.72
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5'	2	0.72
(1,227)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H5"	2	0.72
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	7	0.72
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	7	0.72
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	7	0.72
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	7	0.72
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	1	0.71
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	3	0.71
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	2	0.71
(1,795)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H2'	7	0.71
(1,795)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H2'	7	0.71
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	4	0.71
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	8	0.71
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	4	0.71
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	8	0.71
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	8	0.71
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	7	0.71
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	1	0.71
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	1	0.71
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	1	0.71
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	1	0.71
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	2	0.7
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	2	0.7
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	2	0.7
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	2	0.7

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	5	0.7
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	1	0.7
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	1	0.7
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	1	0.7
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	1	0.7
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	5	0.69
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	5	0.69
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	1	0.69
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	7	0.69
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	7	0.69
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	5	0.69
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	5	0.69
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	5	0.69
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	5	0.69
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	4	0.68
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	4	0.68
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	2	0.68
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	3	0.68
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	10	0.68
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	2	0.68
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	8	0.67
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5'	10	0.67
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5"	10	0.67
(1,522)	1:A:7:DG:H8	1:A:32:DG:H1'	3	0.67
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	4	0.67
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	10	0.67
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	4	0.67
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	4	0.67
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	4	0.67
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	4	0.67
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	3	0.67
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	4	0.66
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	6	0.66
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	6	0.66
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	10	0.66
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	10	0.66
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	6	0.66
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	10	0.66
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	5	0.66
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	8	0.66
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	8	0.66
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	8	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,400)	1:A:8:DT:H3'	1:A:8:DT:H6	7	0.66
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	5	0.66
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	5	0.66
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	2	0.66
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	4	0.66
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	6	0.65
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	6	0.65
(1,807)	1:A:9:DT:H2'	1:A:8:DT:H5'	2	0.65
(1,807)	1:A:9:DT:H2'	1:A:8:DT:H5"	2	0.65
(1,795)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H2'	1	0.65
(1,795)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H2'	1	0.65
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	8	0.65
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	2	0.65
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	5	0.65
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	2	0.65
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	7	0.65
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	7	0.64
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	10	0.64
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	3	0.64
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	4	0.64
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	2	0.64
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	6	0.64
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	8	0.64
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	8	0.64
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	8	0.64
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	8	0.64
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	4	0.64
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	4	0.64
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	4	0.64
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	4	0.64
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	5	0.64
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	6	0.64
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	6	0.64
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	6	0.64
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	6	0.64
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	4	0.63
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	5	0.63
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	5	0.63
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	5	0.63
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	5	0.63
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	1	0.63
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	4	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	4	0.63
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	6	0.63
(1,400)	1:A:8:DT:H3'	1:A:8:DT:H6	1	0.63
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	6	0.63
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	6	0.63
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	6	0.63
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	6	0.63
(1,850)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1'	6	0.62
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	9	0.62
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	9	0.62
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	1	0.62
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	1	0.62
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	6	0.62
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	9	0.62
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	1	0.62
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	3	0.62
(1,400)	1:A:8:DT:H3'	1:A:8:DT:H6	6	0.62
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	1	0.62
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	3	0.62
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	3	0.62
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	8	0.62
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	3	0.62
(1,795)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H2'	8	0.61
(1,795)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H2'	8	0.61
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5'	8	0.61
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5"	8	0.61
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	5	0.61
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	5	0.61
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	4	0.61
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5'	7	0.61
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5"	7	0.61
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	2	0.61
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5'	10	0.61
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5"	10	0.61
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	7	0.61
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	7	0.61
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	7	0.61
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	7	0.61
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	9	0.61
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	9	0.61
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	9	0.61
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	9	0.61

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	7	0.6
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	6	0.6
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	2	0.6
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	6	0.6
(1,795)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H2'	2	0.6
(1,795)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H2'	2	0.6
(1,739)	1:A:16:DG:H8	1:A:17:DA:H8	6	0.6
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	4	0.6
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	3	0.6
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	8	0.6
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	7	0.6
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	7	0.6
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	7	0.6
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	7	0.6
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	8	0.6
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	8	0.6
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	8	0.6
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	8	0.6
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	6	0.6
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	6	0.6
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	3	0.6
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	3	0.6
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	3	0.6
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	3	0.6
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	2	0.6
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	2	0.6
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	4	0.6
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	4	0.6
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	6	0.6
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	6	0.6
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	9	0.6
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	7	0.6
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	1	0.6
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	1	0.6
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H21	1	0.6
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H22	1	0.6
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	8	0.6
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	8	0.6
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H21	8	0.6
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H22	8	0.6
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	9	0.6
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	10	0.6

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	10	0.6
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	10	0.6
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	10	0.6
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	7	0.59
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	7	0.59
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	7	0.59
(1,577)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2'	10	0.59
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	2	0.59
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	5	0.59
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	2	0.59
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	4	0.58
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	5	0.58
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5'	10	0.58
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5"	10	0.58
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	6	0.58
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	6	0.58
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	7	0.58
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	8	0.58
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	8	0.58
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	2	0.58
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	2	0.58
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	2	0.58
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	2	0.58
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	1	0.58
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	9	0.58
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	7	0.58
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	7	0.58
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	4	0.58
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	2	0.57
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	5	0.57
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	5	0.57
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	8	0.57
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	9	0.57
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	8	0.57
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	8	0.57
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	7	0.57
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	8	0.57
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	9	0.57
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2'	4	0.57
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H2"	4	0.57
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H21	4	0.57
(1,104)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H22	4	0.57

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	6	0.56
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	9	0.56
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	2	0.56
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	2	0.56
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	9	0.56
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	10	0.56
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	1	0.56
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	7	0.56
(1,633)	1:A:27:DG:H5'	1:A:27:DG:H2'	7	0.56
(1,633)	1:A:27:DG:H5"	1:A:27:DG:H2'	7	0.56
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	5	0.56
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	5	0.56
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	5	0.56
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	5	0.56
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	9	0.56
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	9	0.56
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	9	0.56
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	9	0.56
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	9	0.56
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	9	0.56
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	9	0.56
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	9	0.56
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	9	0.56
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	3	0.56
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	2	0.56
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	1	0.56
(1,413)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	3	0.56
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	5	0.56
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5'	8	0.56
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5"	8	0.56
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	9	0.56
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	9	0.56
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	7	0.56
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	1	0.56
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	1	0.56
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	1	0.56
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	7	0.56
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	8	0.55
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	5	0.55
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	2	0.55
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	9	0.55
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	1	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	6	0.55
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	6	0.55
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	10	0.55
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	8	0.55
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	8	0.55
(1,213)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2"	10	0.55
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	2	0.55
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	3	0.55
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	10	0.55
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	7	0.54
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	9	0.54
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	9	0.54
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	7	0.54
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	7	0.54
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	7	0.54
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	7	0.54
(1,577)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2'	2	0.54
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	3	0.54
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	3	0.54
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	3	0.54
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	3	0.54
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	8	0.54
(1,400)	1:A:8:DT:H3'	1:A:8:DT:H6	8	0.54
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	10	0.54
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	5	0.54
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	5	0.54
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	5	0.54
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	5	0.54
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	10	0.54
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	2	0.54
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	8	0.54
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	2	0.54
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	8	0.53
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	9	0.53
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	9	0.53
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	6	0.53
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	6	0.53
(1,730)	1:A:32:DG:H2"	1:A:32:DG:H1	7	0.53
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	10	0.53
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	10	0.53
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	3	0.53
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	10	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,62)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H8	5	0.53
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	2	0.53
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	7	0.53
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	7	0.53
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	1	0.53
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	4	0.53
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	4	0.53
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	4	0.53
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	4	0.53
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	6	0.53
(1,509)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	7	0.53
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	2	0.53
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	9	0.53
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	2	0.53
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	5	0.53
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	7	0.52
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	8	0.52
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	8	0.52
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	3	0.52
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	4	0.52
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	9	0.52
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	10	0.52
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	4	0.52
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	4	0.52
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	4	0.52
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	4	0.52
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	7	0.52
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	9	0.52
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	4	0.52
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	7	0.52
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	7	0.52
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	7	0.52
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	7	0.52
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5'	10	0.52
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5"	10	0.52
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	6	0.52
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	6	0.52
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	10	0.52
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	10	0.52
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	10	0.52
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	10	0.52
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	4	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	3	0.51
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	7	0.51
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	7	0.51
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	1	0.51
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	7	0.51
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	4	0.51
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	6	0.51
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	10	0.51
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	6	0.51
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	6	0.51
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	6	0.51
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	6	0.51
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	6	0.51
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	6	0.51
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	10	0.51
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	6	0.51
(1,398)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H6	2	0.51
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	6	0.51
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	6	0.51
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	9	0.51
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	9	0.51
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5'	9	0.51
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5"	9	0.51
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	1	0.51
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	3	0.51
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	6	0.51
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	6	0.51
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	9	0.51
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	9	0.51
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H21	9	0.51
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H22	9	0.51
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	9	0.51
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	8	0.51
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	6	0.5
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	10	0.5
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	7	0.5
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	5	0.5
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	6	0.5
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	4	0.5
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	4	0.5
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	4	0.5
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	4	0.5

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	6	0.5
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	6	0.5
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	6	0.5
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	6	0.5
(1,735)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H2'	9	0.5
(1,678)	1:A:18:DG:H8	1:A:19:DG:H2"	5	0.5
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	3	0.5
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	4	0.5
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	2	0.5
(1,475)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H3'	9	0.5
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	8	0.5
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	7	0.5
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	7	0.5
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5'	10	0.5
(1,436)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H5"	10	0.5
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	5	0.5
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	10	0.5
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	10	0.5
(1,400)	1:A:8:DT:H3'	1:A:8:DT:H6	5	0.5
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	10	0.5
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	10	0.5
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	10	0.5
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	10	0.5
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5'	1	0.5
(1,313)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H5"	1	0.5
(1,213)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2"	8	0.5
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	2	0.5
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	2	0.5
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	3	0.5
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	4	0.5
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	5	0.5
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	9	0.5
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	6	0.5
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	2	0.49
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	4	0.49
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	10	0.49
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	4	0.49
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	7	0.49
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	6	0.49
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	3	0.49
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	1	0.49
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	1	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	1	0.49
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	1	0.49
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	4	0.49
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	4	0.49
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	8	0.49
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	2	0.49
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	2	0.49
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	2	0.49
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	2	0.49
(1,95)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	10	0.48
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	4	0.48
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	4	0.48
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	10	0.48
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	10	0.48
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	6	0.48
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	6	0.48
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	6	0.48
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	9	0.48
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	10	0.48
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	6	0.48
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	8	0.48
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	3	0.48
(1,655)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H4'	9	0.48
(1,65)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H6	9	0.48
(1,62)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H8	4	0.48
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	5	0.48
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	1	0.48
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	1	0.48
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	1	0.48
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	1	0.48
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	7	0.48
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	2	0.48
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	2	0.48
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	5	0.48
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	5	0.48
(1,418)	1:A:4:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	6	0.48
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	3	0.48
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	4	0.48
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	10	0.48
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	1	0.48
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	1	0.48
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	1	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	2	0.48
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	8	0.48
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	1	0.48
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	7	0.48
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	7	0.48
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	7	0.48
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	7	0.48
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	10	0.48
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	2	0.48
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	10	0.47
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	4	0.47
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	2	0.47
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	2	0.47
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	2	0.47
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	2	0.47
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	2	0.47
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5'	7	0.47
(1,757)	1:A:15:DA:H2'	1:A:15:DA:H5"	7	0.47
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	2	0.47
(1,707)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H5"	6	0.47
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	6	0.47
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	2	0.47
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	6	0.47
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	5	0.47
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	10	0.47
(1,456)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2'	3	0.47
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	7	0.47
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	1	0.47
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	7	0.47
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	7	0.47
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	3	0.47
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	1	0.47
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	3	0.47
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	2	0.47
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	5	0.47
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	5	0.47
(1,213)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2"	9	0.47
(1,120)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2'	10	0.47
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	7	0.47
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	10	0.47
(1,857)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H8	7	0.46
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	5	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	5	0.46
(1,655)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H4'	2	0.46
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	10	0.46
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	10	0.46
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	10	0.46
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	10	0.46
(1,518)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	5	0.46
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	1	0.46
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	7	0.46
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	10	0.46
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	4	0.46
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	10	0.46
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	10	0.46
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	6	0.46
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	8	0.46
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	6	0.46
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	3	0.46
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	5	0.46
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	8	0.46
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	8	0.46
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	8	0.46
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	8	0.46
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	10	0.46
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	10	0.46
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	10	0.46
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	10	0.46
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	5	0.46
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	1	0.46
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	2	0.46
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	10	0.46
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	2	0.46
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	2	0.46
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	3	0.46
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	2	0.45
(1,828)	1:A:3:DG:H8	1:A:1:DA:H2'	2	0.45
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	5	0.45
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	3	0.45
(1,678)	1:A:18:DG:H8	1:A:19:DG:H2"	7	0.45
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	9	0.45
(1,62)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H8	9	0.45
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	8	0.45
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	6	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	8	0.45
(1,573)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H4'	4	0.45
(1,564)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H8	4	0.45
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	10	0.45
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	1	0.45
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	1	0.45
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	2	0.45
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	7	0.45
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	7	0.45
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	10	0.45
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	1	0.45
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	5	0.45
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	6	0.45
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	7	0.45
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	5	0.45
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	7	0.45
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	3	0.45
(1,213)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2"	7	0.45
(1,202)	1:A:20:DG:H1'	1:A:20:DG:H5"	5	0.45
(1,202)	1:A:20:DG:H1'	1:A:20:DG:H5"	6	0.45
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	6	0.45
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	4	0.45
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	3	0.45
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	1	0.45
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	6	0.45
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	1	0.44
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	8	0.44
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	7	0.44
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	6	0.44
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	4	0.44
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	1	0.44
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	6	0.44
(1,62)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H8	3	0.44
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	2	0.44
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	4	0.44
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	3	0.44
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	9	0.44
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	10	0.44
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2"	10	0.44
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H21	10	0.44
(1,528)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H22	10	0.44
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	1	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	3	0.44
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	9	0.44
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	9	0.44
(1,418)	1:A:4:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	1	0.44
(1,400)	1:A:8:DT:H3'	1:A:8:DT:H6	10	0.44
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	10	0.44
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5'	10	0.44
(1,283)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H5"	10	0.44
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	7	0.44
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	3	0.44
(1,195)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	5	0.44
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	4	0.44
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	5	0.44
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	1	0.44
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	10	0.44
(1,150)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H2'	8	0.44
(1,135)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H4'	3	0.44
(1,135)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H4'	10	0.44
(1,115)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H2"	5	0.44
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	9	0.44
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	9	0.44
(1,868)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2"	10	0.43
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	3	0.43
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	5	0.43
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	5	0.43
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	2	0.43
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	5	0.43
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	5	0.43
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	5	0.43
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	5	0.43
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	6	0.43
(1,697)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H3'	8	0.43
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	10	0.43
(1,564)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H8	5	0.43
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	4	0.43
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	3	0.43
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	6	0.43
(1,518)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	7	0.43
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	4	0.43
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	9	0.43
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	9	0.43
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	9	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	5	0.43
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	4	0.43
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	6	0.43
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	4	0.43
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	7	0.43
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	9	0.43
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	10	0.43
(1,308)	1:A:2:DG:H5'	1:A:2:DG:H3'	6	0.43
(1,308)	1:A:2:DG:H5"	1:A:2:DG:H3'	6	0.43
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	1	0.43
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	1	0.43
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	5	0.43
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	9	0.43
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	4	0.43
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	6	0.43
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	1	0.43
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	1	0.43
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	1	0.43
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	1	0.43
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	4	0.43
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	4	0.43
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	4	0.43
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	4	0.43
(1,96)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	1	0.42
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	9	0.42
(1,80)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H1'	10	0.42
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	2	0.42
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2'	10	0.42
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2"	10	0.42
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	3	0.42
(1,62)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H8	6	0.42
(1,62)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H8	7	0.42
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	1	0.42
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	8	0.42
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	4	0.42
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	9	0.42
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	4	0.42
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	4	0.42
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	1	0.42
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	2	0.42
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	9	0.42
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	2	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5'	7	0.42
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5"	7	0.42
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	9	0.42
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	7	0.42
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	10	0.42
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	10	0.42
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	4	0.42
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	9	0.42
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	1	0.42
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	3	0.42
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	7	0.42
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	5	0.42
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	5	0.42
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	5	0.42
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	5	0.42
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	5	0.42
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	4	0.41
(1,857)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H8	1	0.41
(1,857)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H8	4	0.41
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	5	0.41
(1,795)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H2'	4	0.41
(1,795)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H2'	4	0.41
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	1	0.41
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	1	0.41
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	2	0.41
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	4	0.41
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	8	0.41
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	8	0.41
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	8	0.41
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	8	0.41
(1,67)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2"	8	0.41
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	4	0.41
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	10	0.41
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	8	0.41
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	9	0.41
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	5	0.41
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	3	0.41
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	3	0.41
(1,483)	1:A:2:DG:H2"	1:A:1:DA:H8	5	0.41
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	4	0.41
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	6	0.41
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	3	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	8	0.41
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	3	0.41
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	7	0.41
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	7	0.41
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	5	0.41
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	7	0.41
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	3	0.41
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	4	0.41
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	4	0.41
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	6	0.41
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	10	0.41
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	5	0.41
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2'	9	0.41
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H2"	9	0.41
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H21	9	0.41
(1,20)	1:A:30:DA:H8	1:A:28:DG:H22	9	0.41
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	8	0.41
(1,169)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H1'	5	0.41
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	4	0.41
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	10	0.4
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5'	8	0.4
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5"	8	0.4
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	1	0.4
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	10	0.4
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	7	0.4
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	1	0.4
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	7	0.4
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	2	0.4
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	9	0.4
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	8	0.4
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	3	0.4
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	2	0.4
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	4	0.4
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	5	0.4
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	2	0.4
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	3	0.4
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	10	0.4
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	3	0.4
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	3	0.4
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	3	0.4
(1,455)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2"	8	0.4
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	8	0.4

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	9	0.4
(1,418)	1:A:4:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	10	0.4
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	1	0.4
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	6	0.4
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	4	0.4
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	9	0.4
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	3	0.4
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	8	0.4
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	6	0.4
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	4	0.4
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	9	0.4
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	2	0.4
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	2	0.4
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	7	0.4
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	7	0.4
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	4	0.4
(1,143)	1:A:4:DG:H1	1:A:31:DG:H5"	4	0.4
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	1	0.39
(1,829)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	1	0.39
(1,80)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H1'	5	0.39
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	7	0.39
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	10	0.39
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	7	0.39
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	9	0.39
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	8	0.39
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2'	6	0.39
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2"	6	0.39
(1,65)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H6	10	0.39
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	6	0.39
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	8	0.39
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	5	0.39
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	2	0.39
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	6	0.39
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	6	0.39
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	6	0.39
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	6	0.39
(1,577)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2'	8	0.39
(1,577)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2'	9	0.39
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	1	0.39
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	1	0.39
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	1	0.39
(1,519)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H1'	1	0.39

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,517)	1:A:12:DG:H1	1:A:12:DG:H1'	10	0.39
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	4	0.39
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	7	0.39
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	1	0.39
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	2	0.39
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	6	0.39
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	3	0.39
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	7	0.39
(1,418)	1:A:4:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	5	0.39
(1,399)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H6	5	0.39
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	3	0.39
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	4	0.39
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	9	0.39
(1,373)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H5'	5	0.39
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	3	0.39
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	10	0.39
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	9	0.39
(1,293)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	10	0.39
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	3	0.39
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	9	0.39
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	6	0.39
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	7	0.39
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	8	0.39
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	4	0.39
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	2	0.39
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	5	0.39
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	5	0.39
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	7	0.39
(1,114)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H4'	3	0.39
(1,96)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	4	0.38
(1,96)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	5	0.38
(1,96)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	6	0.38
(1,96)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	9	0.38
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	3	0.38
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	3	0.38
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	8	0.38
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	3	0.38
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	3	0.38
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	3	0.38
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	4	0.38
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	8	0.38
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	3	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	9	0.38
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	4	0.38
(1,697)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H3'	5	0.38
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2'	3	0.38
(1,695)	1:A:23:DG:H4'	1:A:23:DG:H2"	3	0.38
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	8	0.38
(1,647)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2"	4	0.38
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	5	0.38
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	6	0.38
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	5	0.38
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	3	0.38
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	10	0.38
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	8	0.38
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	1	0.38
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	7	0.38
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	2	0.38
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	10	0.38
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	5	0.38
(1,418)	1:A:4:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	4	0.38
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	1	0.38
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	5	0.38
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	9	0.38
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	3	0.38
(1,327)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H1'	3	0.38
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	3	0.38
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	3	0.38
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	1	0.38
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	5	0.38
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	8	0.38
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	9	0.38
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	10	0.38
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	9	0.38
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	9	0.38
(1,281)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H3'	8	0.38
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	9	0.38
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	1	0.38
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	2	0.38
(1,251)	1:A:9:DT:H2'	1:A:9:DT:H3'	5	0.38
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	6	0.38
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	7	0.38
(1,213)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2"	1	0.38
(1,213)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2"	5	0.38

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	3	0.38
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	8	0.38
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	3	0.38
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	5	0.38
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	5	0.37
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	6	0.37
(1,847)	1:A:31:DG:H1'	1:A:13:DG:H1'	6	0.37
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	5	0.37
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	3	0.37
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	8	0.37
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	2	0.37
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	3	0.37
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	1	0.37
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	3	0.37
(1,776)	1:A:30:DA:H4'	1:A:30:DA:H5'	9	0.37
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	6	0.37
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	3	0.37
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	3	0.37
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	3	0.37
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	3	0.37
(1,725)	1:A:10:DT:H2'	1:A:10:DT:H5'	4	0.37
(1,697)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H3'	6	0.37
(1,670)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H3'	2	0.37
(1,65)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H6	8	0.37
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	8	0.37
(1,626)	1:A:11:DG:H8	1:A:10:DT:H6	7	0.37
(1,62)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H8	10	0.37
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	6	0.37
(1,577)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2'	6	0.37
(1,573)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H4'	3	0.37
(1,568)	1:A:25:DG:H1	1:A:1:DA:H1'	1	0.37
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	8	0.37
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	5	0.37
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	7	0.37
(1,519)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H1'	8	0.37
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	8	0.37
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	8	0.37
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	2	0.37
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	9	0.37
(1,483)	1:A:2:DG:H2"	1:A:1:DA:H8	6	0.37
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	5	0.37
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	7	0.37

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,473)	1:A:3:DG:H5'	1:A:3:DG:H3'	10	0.37
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	5	0.37
(1,456)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2'	7	0.37
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	10	0.37
(1,402)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	3	0.37
(1,402)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	6	0.37
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	5	0.37
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	5	0.37
(1,400)	1:A:8:DT:H3'	1:A:8:DT:H6	9	0.37
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	4	0.37
(1,373)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H5'	1	0.37
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	10	0.37
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	6	0.37
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	1	0.37
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	1	0.37
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	1	0.37
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	1	0.37
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	6	0.37
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	8	0.37
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	10	0.37
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	1	0.37
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	7	0.37
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	9	0.37
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	9	0.37
(1,286)	1:A:29:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	8	0.37
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	10	0.37
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	10	0.37
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	10	0.37
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	9	0.37
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	9	0.37
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	7	0.37
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	10	0.37
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	1	0.37
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	1	0.37
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	6	0.37
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	8	0.37
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	10	0.37
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5'	7	0.37
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5"	7	0.37
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	1	0.37
(1,100)	1:A:27:DG:H1'	1:A:27:DG:H2"	8	0.37
(1,96)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	2	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	7	0.36
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	7	0.36
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	10	0.36
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	10	0.36
(1,841)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H1'	2	0.36
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	1	0.36
(1,828)	1:A:3:DG:H8	1:A:1:DA:H2'	6	0.36
(1,795)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H2'	6	0.36
(1,795)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H2'	6	0.36
(1,784)	1:A:2:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	1	0.36
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	5	0.36
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	5	0.36
(1,707)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H5"	1	0.36
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	10	0.36
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	5	0.36
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	7	0.36
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	10	0.36
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	8	0.36
(1,574)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H1	1	0.36
(1,573)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H4'	2	0.36
(1,573)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H4'	8	0.36
(1,573)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H4'	9	0.36
(1,558)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H8	2	0.36
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	8	0.36
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	2	0.36
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	6	0.36
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	9	0.36
(1,518)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	10	0.36
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	7	0.36
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	8	0.36
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	9	0.36
(1,455)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2"	9	0.36
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	3	0.36
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	3	0.36
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	2	0.36
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	2	0.36
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	10	0.36
(1,343)	1:A:27:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	9	0.36
(1,343)	1:A:27:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	9	0.36
(1,343)	1:A:27:DG:H21	1:A:3:DG:H8	9	0.36
(1,343)	1:A:27:DG:H22	1:A:3:DG:H8	9	0.36
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	3	0.36

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	2	0.36
(1,314)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H2'	2	0.36
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	8	0.36
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	6	0.36
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	8	0.36
(1,277)	1:A:29:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	4	0.36
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	4	0.36
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	10	0.36
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	8	0.36
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	10	0.36
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	1	0.36
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	9	0.36
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	6	0.36
(1,176)	1:A:4:DG:H4'	1:A:4:DG:H3'	9	0.36
(1,170)	1:A:4:DG:H3'	1:A:30:DA:H1'	7	0.36
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	7	0.36
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	7	0.36
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H21	7	0.36
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H22	7	0.36
(1,143)	1:A:4:DG:H1	1:A:31:DG:H5"	9	0.36
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5'	8	0.36
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5"	8	0.36
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	6	0.36
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	8	0.36
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	4	0.35
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	1	0.35
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	1	0.35
(1,868)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2"	1	0.35
(1,847)	1:A:31:DG:H1'	1:A:13:DG:H1'	1	0.35
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	10	0.35
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	3	0.35
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	8	0.35
(1,742)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H3'	10	0.35
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	4	0.35
(1,673)	1:A:20:DG:H5"	1:A:19:DG:H1'	2	0.35
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	9	0.35
(1,636)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H8	6	0.35
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	4	0.35
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	7	0.35
(1,577)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2'	3	0.35
(1,574)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H1	8	0.35
(1,558)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H8	5	0.35

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,519)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H1'	4	0.35
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	5	0.35
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	10	0.35
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	10	0.35
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	6	0.35
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	8	0.35
(1,456)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2'	2	0.35
(1,456)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2'	10	0.35
(1,434)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H2"	7	0.35
(1,418)	1:A:4:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	2	0.35
(1,400)	1:A:8:DT:H3'	1:A:8:DT:H6	3	0.35
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	9	0.35
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	8	0.35
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	2	0.35
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	5	0.35
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	2	0.35
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	5	0.35
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	5	0.35
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	5	0.35
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	6	0.35
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	5	0.35
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	5	0.35
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	10	0.35
(1,238)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5"	10	0.35
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	6	0.35
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	10	0.35
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	3	0.35
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	4	0.35
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	5	0.35
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	9	0.35
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	7	0.35
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	4	0.34
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	2	0.34
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	6	0.34
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	1	0.34
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	1	0.34
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	1	0.34
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	1	0.34
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	7	0.34
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	7	0.34
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	7	0.34
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	7	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	3	0.34
(1,65)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H6	1	0.34
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	1	0.34
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	4	0.34
(1,626)	1:A:11:DG:H8	1:A:10:DT:H6	5	0.34
(1,60)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H2"	10	0.34
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	4	0.34
(1,574)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H1	5	0.34
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	4	0.34
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	6	0.34
(1,564)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H8	2	0.34
(1,564)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H8	6	0.34
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	2	0.34
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	2	0.34
(1,551)	1:A:28:DG:H1	1:A:27:DG:H8	9	0.34
(1,548)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H8	10	0.34
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	5	0.34
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	3	0.34
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	6	0.34
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	1	0.34
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	6	0.34
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	5	0.34
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	6	0.34
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	6	0.34
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	4	0.34
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	4	0.34
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	3	0.34
(1,456)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2'	6	0.34
(1,449)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H3'	1	0.34
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5'	4	0.34
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5"	4	0.34
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	5	0.34
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	7	0.34
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	2	0.34
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	10	0.34
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	4	0.34
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	1	0.34
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	3	0.34
(1,327)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H1'	8	0.34
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	4	0.34
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	2	0.34
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	4	0.34

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,281)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H3'	1	0.34
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	5	0.34
(1,257)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H8	1	0.34
(1,257)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H8	4	0.34
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	1	0.34
(1,170)	1:A:4:DG:H3'	1:A:30:DA:H1'	4	0.34
(1,169)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H1'	8	0.34
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	10	0.34
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	10	0.34
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H21	10	0.34
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H22	10	0.34
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	1	0.34
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	9	0.34
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	5	0.34
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	3	0.34
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	4	0.34
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	4	0.34
(1,101)	1:A:27:DG:H2'	1:A:27:DG:H2"	10	0.34
(1,94)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	3	0.33
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5'	2	0.33
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5"	2	0.33
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	2	0.33
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	2	0.33
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	2	0.33
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	5	0.33
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	10	0.33
(1,857)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H8	8	0.33
(1,847)	1:A:31:DG:H1'	1:A:13:DG:H1'	10	0.33
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	1	0.33
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	6	0.33
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	8	0.33
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	1	0.33
(1,823)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H6	8	0.33
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	7	0.33
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	5	0.33
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	10	0.33
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	10	0.33
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	10	0.33
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	10	0.33
(1,744)	1:A:3:DG:H2"	1:A:3:DG:H3'	3	0.33
(1,744)	1:A:3:DG:H2"	1:A:3:DG:H3'	7	0.33
(1,735)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H2'	4	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,678)	1:A:18:DG:H8	1:A:19:DG:H2"	2	0.33
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	3	0.33
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	1	0.33
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	9	0.33
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	9	0.33
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	1	0.33
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	1	0.33
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	6	0.33
(1,577)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2'	4	0.33
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	8	0.33
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	2	0.33
(1,518)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	6	0.33
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	2	0.33
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	5	0.33
(1,483)	1:A:2:DG:H2"	1:A:1:DA:H8	9	0.33
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	1	0.33
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	1	0.33
(1,457)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H3'	10	0.33
(1,455)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2"	10	0.33
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	3	0.33
(1,399)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H6	6	0.33
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	4	0.33
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	10	0.33
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	4	0.33
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	3	0.33
(1,352)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2"	2	0.33
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	4	0.33
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	8	0.33
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	1	0.33
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	8	0.33
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	1	0.33
(1,308)	1:A:2:DG:H5'	1:A:2:DG:H3'	2	0.33
(1,308)	1:A:2:DG:H5"	1:A:2:DG:H3'	2	0.33
(1,303)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H4'	8	0.33
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	3	0.33
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	4	0.33
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	4	0.33
(1,239)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2"	7	0.33
(1,238)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5"	3	0.33
(1,201)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H5'	4	0.33
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	5	0.33
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	8	0.33

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,143)	1:A:4:DG:H1	1:A:31:DG:H5"	6	0.33
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	5	0.33
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	9	0.33
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	6	0.32
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	7	0.32
(1,828)	1:A:3:DG:H8	1:A:1:DA:H2'	5	0.32
(1,828)	1:A:3:DG:H8	1:A:1:DA:H2'	9	0.32
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	4	0.32
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	10	0.32
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	2	0.32
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	5	0.32
(1,760)	1:A:29:DG:H5'	1:A:29:DG:H4'	2	0.32
(1,760)	1:A:29:DG:H5"	1:A:29:DG:H4'	2	0.32
(1,715)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H5"	4	0.32
(1,655)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H4'	5	0.32
(1,65)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H6	7	0.32
(1,64)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H2'	2	0.32
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	6	0.32
(1,615)	1:A:7:DG:H1	1:A:12:DG:H8	2	0.32
(1,577)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2'	1	0.32
(1,559)	1:A:12:DG:H1	1:A:25:DG:H2"	7	0.32
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	9	0.32
(1,548)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H8	5	0.32
(1,54)	1:A:32:DG:H8	1:A:32:DG:H3'	4	0.32
(1,530)	1:A:11:DG:H1	1:A:25:DG:H8	10	0.32
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	3	0.32
(1,519)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H1'	5	0.32
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	4	0.32
(1,496)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	9	0.32
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	4	0.32
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	5	0.32
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	7	0.32
(1,457)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H3'	6	0.32
(1,457)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H3'	8	0.32
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5'	5	0.32
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5"	5	0.32
(1,402)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	4	0.32
(1,394)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H2'	7	0.32
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	8	0.32
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	1	0.32
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	9	0.32
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	8	0.32

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	2	0.32
(1,341)	1:A:30:DA:H2'	1:A:30:DA:H2"	7	0.32
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	6	0.32
(1,294)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	10	0.32
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	8	0.32
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	8	0.32
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	2	0.32
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	3	0.32
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	3	0.32
(1,282)	1:A:28:DG:H5'	1:A:28:DG:H3'	8	0.32
(1,282)	1:A:28:DG:H5"	1:A:28:DG:H3'	8	0.32
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	4	0.32
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	8	0.32
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	9	0.32
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	6	0.32
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	8	0.32
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	2	0.32
(1,239)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2"	5	0.32
(1,202)	1:A:20:DG:H1'	1:A:20:DG:H5"	4	0.32
(1,169)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H1'	2	0.32
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	3	0.32
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	7	0.32
(1,151)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H3'	6	0.32
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	10	0.32
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	9	0.32
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	5	0.32
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	6	0.32
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	8	0.32
(1,96)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	10	0.31
(1,91)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H2"	3	0.31
(1,868)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2"	2	0.31
(1,857)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H8	6	0.31
(1,847)	1:A:31:DG:H1'	1:A:13:DG:H1'	8	0.31
(1,835)	1:A:20:DG:H1'	1:A:21:DA:H2	8	0.31
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	9	0.31
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	7	0.31
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	7	0.31
(1,782)	1:A:32:DG:H8	1:A:30:DA:H5'	5	0.31
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	2	0.31
(1,739)	1:A:16:DG:H8	1:A:17:DA:H8	3	0.31
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	2	0.31
(1,678)	1:A:18:DG:H8	1:A:19:DG:H2"	10	0.31

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,674)	1:A:20:DG:H5'	1:A:19:DG:H1'	6	0.31
(1,65)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H6	2	0.31
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	1	0.31
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	9	0.31
(1,577)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2'	7	0.31
(1,573)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H4'	6	0.31
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	7	0.31
(1,558)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H8	4	0.31
(1,526)	1:A:3:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	2	0.31
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	7	0.31
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	6	0.31
(1,518)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	8	0.31
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	7	0.31
(1,483)	1:A:2:DG:H2"	1:A:1:DA:H8	3	0.31
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	10	0.31
(1,457)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H3'	1	0.31
(1,457)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H3'	9	0.31
(1,455)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2"	1	0.31
(1,418)	1:A:4:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	9	0.31
(1,400)	1:A:8:DT:H3'	1:A:8:DT:H6	4	0.31
(1,393)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H2"	10	0.31
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	7	0.31
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	2	0.31
(1,308)	1:A:2:DG:H5'	1:A:2:DG:H3'	3	0.31
(1,308)	1:A:2:DG:H5"	1:A:2:DG:H3'	3	0.31
(1,293)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	9	0.31
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	7	0.31
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	2	0.31
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	2	0.31
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	6	0.31
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	4	0.31
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	2	0.31
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	10	0.31
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	9	0.31
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	6	0.31
(1,143)	1:A:4:DG:H1	1:A:31:DG:H5"	1	0.31
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	2	0.31
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	7	0.31
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	10	0.31
(1,862)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H5"	9	0.3
(1,857)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H8	9	0.3
(1,856)	1:A:10:DT:H6	1:A:1:DA:H2	10	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,835)	1:A:20:DG:H1'	1:A:21:DA:H2	6	0.3
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	10	0.3
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	3	0.3
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	3	0.3
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	9	0.3
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	9	0.3
(1,795)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H2'	9	0.3
(1,795)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H2'	9	0.3
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	4	0.3
(1,786)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H4'	8	0.3
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	4	0.3
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	9	0.3
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	9	0.3
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H21	9	0.3
(1,76)	1:A:31:DG:H8	1:A:28:DG:H22	9	0.3
(1,744)	1:A:3:DG:H2"	1:A:3:DG:H3'	8	0.3
(1,742)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H3'	9	0.3
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	1	0.3
(1,697)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H3'	4	0.3
(1,655)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H4'	1	0.3
(1,655)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H4'	3	0.3
(1,65)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H6	4	0.3
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2'	9	0.3
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2"	9	0.3
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	5	0.3
(1,624)	1:A:11:DG:H2"	1:A:12:DG:H8	10	0.3
(1,589)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H8	5	0.3
(1,573)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H4'	5	0.3
(1,567)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1	5	0.3
(1,564)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H8	7	0.3
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	3	0.3
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	9	0.3
(1,517)	1:A:12:DG:H1	1:A:12:DG:H1'	7	0.3
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	1	0.3
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	9	0.3
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	8	0.3
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	2	0.3
(1,481)	1:A:2:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	3	0.3
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	1	0.3
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	5	0.3
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	1	0.3
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	9	0.3

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	5	0.3
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5'	7	0.3
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5"	7	0.3
(1,418)	1:A:4:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	8	0.3
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	9	0.3
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	6	0.3
(1,373)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H5'	4	0.3
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	4	0.3
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	8	0.3
(1,349)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	8	0.3
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	2	0.3
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	6	0.3
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	10	0.3
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	10	0.3
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	10	0.3
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	5	0.3
(1,281)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H3'	10	0.3
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	3	0.3
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	3	0.3
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	4	0.3
(1,256)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	1	0.3
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	7	0.3
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	1	0.3
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	7	0.3
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	8	0.3
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	3	0.3
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	3	0.3
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	10	0.3
(1,114)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H4'	6	0.3
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	9	0.3
(1,98)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2"	7	0.29
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	5	0.29
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	3	0.29
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	3	0.29
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	8	0.29
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	8	0.29
(1,815)	1:A:23:DG:H1'	1:A:24:DA:H4'	9	0.29
(1,81)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H3'	8	0.29
(1,800)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H2'	7	0.29
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	2	0.29
(1,782)	1:A:32:DG:H8	1:A:30:DA:H5'	9	0.29
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	10	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,773)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H4'	4	0.29
(1,742)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H3'	3	0.29
(1,715)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H5"	3	0.29
(1,697)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H3'	2	0.29
(1,697)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H3'	3	0.29
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2'	4	0.29
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2"	4	0.29
(1,658)	1:A:17:DA:H2'	1:A:17:DA:H3'	3	0.29
(1,655)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H4'	7	0.29
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2'	1	0.29
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2"	1	0.29
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5'	2	0.29
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5"	2	0.29
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	2	0.29
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	7	0.29
(1,615)	1:A:7:DG:H1	1:A:12:DG:H8	4	0.29
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	10	0.29
(1,60)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H2"	1	0.29
(1,60)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H2"	8	0.29
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	6	0.29
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	8	0.29
(1,590)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H8	7	0.29
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	3	0.29
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	3	0.29
(1,551)	1:A:28:DG:H1	1:A:27:DG:H8	8	0.29
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	10	0.29
(1,519)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H1'	2	0.29
(1,519)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H1'	6	0.29
(1,516)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	4	0.29
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	1	0.29
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	1	0.29
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	1	0.29
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	4	0.29
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	4	0.29
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	9	0.29
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	6	0.29
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	8	0.29
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	1	0.29
(1,415)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H1'	1	0.29
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	4	0.29
(1,398)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H6	9	0.29
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	6	0.29

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	3	0.29
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	5	0.29
(1,382)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5"	7	0.29
(1,373)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H5'	3	0.29
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	10	0.29
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	2	0.29
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	9	0.29
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	8	0.29
(1,320)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H1'	8	0.29
(1,296)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H6	7	0.29
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	10	0.29
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	10	0.29
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	1	0.29
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	8	0.29
(1,257)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H8	5	0.29
(1,253)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2"	5	0.29
(1,239)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2"	3	0.29
(1,195)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	8	0.29
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	6	0.29
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	3	0.29
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	4	0.29
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	5	0.29
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	4	0.29
(1,135)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H4'	8	0.29
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	1	0.29
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	2	0.29
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	1	0.29
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	10	0.28
(1,870)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H2'	4	0.28
(1,857)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H8	10	0.28
(1,828)	1:A:3:DG:H8	1:A:1:DA:H2'	4	0.28
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	2	0.28
(1,800)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H2'	3	0.28
(1,800)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H2'	4	0.28
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	10	0.28
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	10	0.28
(1,79)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	9	0.28
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	4	0.28
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	7	0.28
(1,725)	1:A:10:DT:H2'	1:A:10:DT:H5'	2	0.28
(1,715)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H5"	2	0.28
(1,651)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H5'	2	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,651)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H5"	2	0.28
(1,649)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H2'	4	0.28
(1,649)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H2"	4	0.28
(1,636)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H8	3	0.28
(1,587)	1:A:30:DA:H5'	1:A:29:DG:H2'	5	0.28
(1,573)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H4'	7	0.28
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	5	0.28
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	3	0.28
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	6	0.28
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	9	0.28
(1,519)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H1'	10	0.28
(1,518)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	1	0.28
(1,506)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H1	7	0.28
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	4	0.28
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	3	0.28
(1,466)	1:A:2:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	4	0.28
(1,45)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H8	9	0.28
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	2	0.28
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	4	0.28
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	6	0.28
(1,418)	1:A:4:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	7	0.28
(1,406)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	10	0.28
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5'	3	0.28
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5"	3	0.28
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	4	0.28
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	4	0.28
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	5	0.28
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	7	0.28
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	4	0.28
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	4	0.28
(1,308)	1:A:2:DG:H5'	1:A:2:DG:H3'	5	0.28
(1,308)	1:A:2:DG:H5"	1:A:2:DG:H3'	5	0.28
(1,293)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	6	0.28
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	7	0.28
(1,238)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5"	4	0.28
(1,204)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H5"	1	0.28
(1,201)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H5'	10	0.28
(1,195)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	6	0.28
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	1	0.28
(1,184)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H4'	8	0.28
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	9	0.28
(1,169)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H1'	9	0.28

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	8	0.28
(1,135)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H4'	7	0.28
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	6	0.28
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	1	0.28
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	2	0.28
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	7	0.28
(1,11)	1:A:27:DG:H1	1:A:26:DG:H1	9	0.28
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	8	0.27
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	5	0.27
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	5	0.27
(1,868)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2"	8	0.27
(1,835)	1:A:20:DG:H1'	1:A:21:DA:H2	7	0.27
(1,828)	1:A:3:DG:H8	1:A:1:DA:H2'	8	0.27
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	4	0.27
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	10	0.27
(1,80)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H1'	1	0.27
(1,749)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H3'	2	0.27
(1,744)	1:A:3:DG:H2"	1:A:3:DG:H3'	2	0.27
(1,723)	1:A:19:DG:H5'	1:A:20:DG:H2'	5	0.27
(1,723)	1:A:19:DG:H5'	1:A:20:DG:H2"	5	0.27
(1,72)	1:A:7:DG:H3'	1:A:8:DT:H6	3	0.27
(1,707)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H5"	5	0.27
(1,704)	1:A:5:DC:H3'	1:A:6:DG:H4'	3	0.27
(1,612)	1:A:31:DG:H5'	1:A:31:DG:H5"	3	0.27
(1,590)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H8	4	0.27
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	8	0.27
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	8	0.27
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	8	0.27
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	8	0.27
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	10	0.27
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	6	0.27
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	10	0.27
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	10	0.27
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	10	0.27
(1,506)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H1	2	0.27
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5'	7	0.27
(1,493)	1:A:1:DA:H2'	1:A:1:DA:H5"	7	0.27
(1,483)	1:A:2:DG:H2"	1:A:1:DA:H8	2	0.27
(1,483)	1:A:2:DG:H2"	1:A:1:DA:H8	4	0.27
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	10	0.27
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	10	0.27
(1,464)	1:A:14:DA:H5'	1:A:14:DA:H2'	5	0.27

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,464)	1:A:14:DA:H5"	1:A:14:DA:H2'	5	0.27
(1,457)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H3'	2	0.27
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5'	6	0.27
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5"	6	0.27
(1,398)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H6	10	0.27
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	5	0.27
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	9	0.27
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	7	0.27
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	10	0.27
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	3	0.27
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	5	0.27
(1,333)	1:A:6:DG:H1	1:A:9:DT:H1'	3	0.27
(1,327)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H1'	7	0.27
(1,327)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H1'	9	0.27
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5'	9	0.27
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5"	9	0.27
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	8	0.27
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	7	0.27
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	9	0.27
(1,277)	1:A:29:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	8	0.27
(1,262)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H3'	1	0.27
(1,256)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	4	0.27
(1,239)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2"	1	0.27
(1,238)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5"	2	0.27
(1,234)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	3	0.27
(1,195)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	7	0.27
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	1	0.27
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	2	0.27
(1,177)	1:A:4:DG:H2'	1:A:4:DG:H3'	6	0.27
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	6	0.27
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	6	0.27
(1,137)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H5'	3	0.27
(1,121)	1:A:5:DC:H2"	1:A:5:DC:H2'	7	0.27
(1,112)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H3'	5	0.27
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5'	1	0.26
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5"	1	0.26
(1,857)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H8	3	0.26
(1,823)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H6	9	0.26
(1,815)	1:A:23:DG:H1'	1:A:24:DA:H4'	10	0.26
(1,800)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H2'	1	0.26
(1,800)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H2'	6	0.26
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	1	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	1	0.26
(1,774)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H5'	1	0.26
(1,771)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5'	3	0.26
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	9	0.26
(1,750)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H3'	6	0.26
(1,749)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H3'	8	0.26
(1,748)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H3'	6	0.26
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	7	0.26
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	9	0.26
(1,735)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H2'	2	0.26
(1,735)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H2'	3	0.26
(1,735)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H2'	10	0.26
(1,71)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H3'	5	0.26
(1,700)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H2'	3	0.26
(1,69)	1:A:9:DT:H1'	1:A:8:DT:H4'	1	0.26
(1,68)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2'	8	0.26
(1,674)	1:A:20:DG:H5'	1:A:19:DG:H1'	5	0.26
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	9	0.26
(1,636)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H8	4	0.26
(1,636)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H8	5	0.26
(1,624)	1:A:11:DG:H2"	1:A:12:DG:H8	4	0.26
(1,615)	1:A:7:DG:H1	1:A:12:DG:H8	6	0.26
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	5	0.26
(1,574)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H1	3	0.26
(1,573)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H4'	10	0.26
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	5	0.26
(1,568)	1:A:25:DG:H1	1:A:1:DA:H1'	6	0.26
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	2	0.26
(1,564)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H8	1	0.26
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	1	0.26
(1,551)	1:A:28:DG:H1	1:A:27:DG:H8	4	0.26
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	3	0.26
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	7	0.26
(1,517)	1:A:12:DG:H1	1:A:12:DG:H1'	9	0.26
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	8	0.26
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	5	0.26
(1,491)	1:A:26:DG:H3'	1:A:26:DG:H2'	7	0.26
(1,482)	1:A:2:DG:H2'	1:A:1:DA:H8	7	0.26
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	3	0.26
(1,476)	1:A:3:DG:H2'	1:A:3:DG:H2"	1	0.26
(1,473)	1:A:3:DG:H5'	1:A:3:DG:H3'	8	0.26
(1,456)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2'	4	0.26

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,456)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2'	9	0.26
(1,399)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H6	3	0.26
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	10	0.26
(1,370)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H3'	10	0.26
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	1	0.26
(1,368)	1:A:25:DG:H2"	1:A:25:DG:H2'	6	0.26
(1,363)	1:A:25:DG:H5'	1:A:25:DG:H3'	4	0.26
(1,363)	1:A:25:DG:H5"	1:A:25:DG:H3'	4	0.26
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	4	0.26
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	6	0.26
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	9	0.26
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	5	0.26
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	2	0.26
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	4	0.26
(1,327)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H1'	4	0.26
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	5	0.26
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	7	0.26
(1,325)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	9	0.26
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	2	0.26
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	2	0.26
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	2	0.26
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	1	0.26
(1,262)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H3'	7	0.26
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	1	0.26
(1,194)	1:A:6:DG:H2"	1:A:6:DG:H2'	4	0.26
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	4	0.26
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	3	0.26
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	5	0.26
(1,169)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H1'	6	0.26
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	5	0.26
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	5	0.26
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	7	0.26
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	7	0.26
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	2	0.26
(1,153)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H1'	10	0.26
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	2	0.26
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	2	0.26
(1,132)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2'	7	0.26
(1,114)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H4'	2	0.26
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	6	0.26
(1,98)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2"	8	0.25
(1,870)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H2'	1	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,868)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2"	3	0.25
(1,855)	1:A:30:DA:H4'	1:A:29:DG:H4'	1	0.25
(1,846)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H1'	5	0.25
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	5	0.25
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	1	0.25
(1,782)	1:A:32:DG:H8	1:A:30:DA:H5'	4	0.25
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	3	0.25
(1,749)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H3'	10	0.25
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	3	0.25
(1,729)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	8	0.25
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	9	0.25
(1,647)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2"	2	0.25
(1,636)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H8	2	0.25
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	2	0.25
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	2	0.25
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	2	0.25
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	2	0.25
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	7	0.25
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	1	0.25
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	7	0.25
(1,558)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H8	6	0.25
(1,548)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H8	7	0.25
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	8	0.25
(1,519)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H1'	7	0.25
(1,518)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	4	0.25
(1,516)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	2	0.25
(1,516)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	8	0.25
(1,483)	1:A:2:DG:H2"	1:A:1:DA:H8	7	0.25
(1,481)	1:A:2:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	7	0.25
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	8	0.25
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	9	0.25
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	8	0.25
(1,455)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2"	2	0.25
(1,432)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H2"	9	0.25
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	5	0.25
(1,399)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H6	4	0.25
(1,394)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H2'	9	0.25
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	9	0.25
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	5	0.25
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	1	0.25
(1,363)	1:A:25:DG:H5'	1:A:25:DG:H3'	3	0.25
(1,363)	1:A:25:DG:H5"	1:A:25:DG:H3'	3	0.25

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	10	0.25
(1,348)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	6	0.25
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	10	0.25
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	5	0.25
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5'	2	0.25
(1,32)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H5"	2	0.25
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	7	0.25
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	7	0.25
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	4	0.25
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	3	0.25
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	10	0.25
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5'	2	0.25
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5"	2	0.25
(1,257)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H8	6	0.25
(1,256)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	5	0.25
(1,256)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	6	0.25
(1,253)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2"	9	0.25
(1,239)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2"	9	0.25
(1,238)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5"	5	0.25
(1,222)	1:A:22:DA:H8	1:A:22:DA:H2'	8	0.25
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	3	0.25
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	10	0.25
(1,180)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H1'	6	0.25
(1,161)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H8	9	0.25
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	8	0.25
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	6	0.25
(1,118)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H2"	1	0.25
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	4	0.25
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	4	0.24
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	4	0.24
(1,847)	1:A:31:DG:H1'	1:A:13:DG:H1'	2	0.24
(1,846)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H1'	2	0.24
(1,835)	1:A:20:DG:H1'	1:A:21:DA:H2	10	0.24
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	10	0.24
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	9	0.24
(1,749)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H3'	1	0.24
(1,742)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H3'	1	0.24
(1,742)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H3'	8	0.24
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	5	0.24
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	8	0.24
(1,735)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H2'	8	0.24
(1,729)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	5	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,723)	1:A:19:DG:H5'	1:A:20:DG:H2'	3	0.24
(1,723)	1:A:19:DG:H5'	1:A:20:DG:H2"	3	0.24
(1,697)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H3'	10	0.24
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2'	9	0.24
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2"	9	0.24
(1,68)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2'	5	0.24
(1,647)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2"	3	0.24
(1,626)	1:A:11:DG:H8	1:A:10:DT:H6	4	0.24
(1,624)	1:A:11:DG:H2"	1:A:12:DG:H8	8	0.24
(1,615)	1:A:7:DG:H1	1:A:12:DG:H8	5	0.24
(1,615)	1:A:7:DG:H1	1:A:12:DG:H8	7	0.24
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	3	0.24
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	4	0.24
(1,574)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H1	6	0.24
(1,558)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H8	1	0.24
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	6	0.24
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	9	0.24
(1,551)	1:A:28:DG:H1	1:A:27:DG:H8	10	0.24
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	10	0.24
(1,530)	1:A:11:DG:H1	1:A:25:DG:H8	6	0.24
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	4	0.24
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	3	0.24
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	4	0.24
(1,518)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	3	0.24
(1,481)	1:A:2:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	10	0.24
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	7	0.24
(1,456)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2'	1	0.24
(1,439)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H4'	4	0.24
(1,420)	1:A:32:DG:H2'	1:A:32:DG:H2"	8	0.24
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5'	2	0.24
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5"	2	0.24
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5'	4	0.24
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5"	4	0.24
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	1	0.24
(1,398)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H6	7	0.24
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	3	0.24
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	8	0.24
(1,361)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H3'	10	0.24
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	8	0.24
(1,331)	1:A:11:DG:H1	1:A:25:DG:H1'	7	0.24
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	5	0.24
(1,304)	1:A:2:DG:H1'	1:A:2:DG:H4'	5	0.24

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,294)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	4	0.24
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	3	0.24
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	3	0.24
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	2	0.24
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	3	0.24
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	10	0.24
(1,281)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H3'	6	0.24
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	8	0.24
(1,27)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H4'	2	0.24
(1,27)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H4'	10	0.24
(1,256)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	3	0.24
(1,256)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	8	0.24
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	6	0.24
(1,246)	1:A:9:DT:H1'	1:A:9:DT:H4'	2	0.24
(1,212)	1:A:21:DA:H8	1:A:20:DG:H5'	5	0.24
(1,205)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H5'	3	0.24
(1,201)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H5'	3	0.24
(1,18)	1:A:27:DG:H8	1:A:28:DG:H8	7	0.24
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	1	0.24
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	1	0.24
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	10	0.24
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	10	0.24
(1,143)	1:A:4:DG:H1	1:A:31:DG:H5"	10	0.24
(1,137)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H5'	10	0.24
(1,136)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5"	1	0.24
(1,135)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H4'	9	0.24
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	2	0.24
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	3	0.23
(1,96)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	8	0.23
(1,94)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	1	0.23
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5'	7	0.23
(1,872)	1:A:32:DG:H1'	1:A:9:DT:H5"	7	0.23
(1,841)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H1'	5	0.23
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	5	0.23
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	4	0.23
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	9	0.23
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	10	0.23
(1,818)	1:A:13:DG:H5"	1:A:14:DA:H2	7	0.23
(1,80)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H1'	3	0.23
(1,773)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H4'	1	0.23
(1,760)	1:A:29:DG:H5'	1:A:29:DG:H4'	3	0.23
(1,760)	1:A:29:DG:H5"	1:A:29:DG:H4'	3	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,760)	1:A:29:DG:H5'	1:A:29:DG:H4'	5	0.23
(1,760)	1:A:29:DG:H5"	1:A:29:DG:H4'	5	0.23
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	4	0.23
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	7	0.23
(1,750)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H3'	5	0.23
(1,744)	1:A:3:DG:H2"	1:A:3:DG:H3'	5	0.23
(1,735)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H2'	1	0.23
(1,735)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H2'	7	0.23
(1,729)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	1	0.23
(1,724)	1:A:21:DA:H5"	1:A:21:DA:H2"	7	0.23
(1,700)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H2'	4	0.23
(1,697)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H3'	9	0.23
(1,696)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H3'	9	0.23
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2'	3	0.23
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2"	3	0.23
(1,673)	1:A:20:DG:H5"	1:A:19:DG:H1'	3	0.23
(1,626)	1:A:11:DG:H8	1:A:10:DT:H6	1	0.23
(1,603)	1:A:16:DG:H8	1:A:16:DG:H5"	7	0.23
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	3	0.23
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	3	0.23
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	3	0.23
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	3	0.23
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	8	0.23
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	8	0.23
(1,568)	1:A:25:DG:H1	1:A:1:DA:H1'	10	0.23
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	5	0.23
(1,558)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H8	9	0.23
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	7	0.23
(1,527)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H1'	2	0.23
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	8	0.23
(1,517)	1:A:12:DG:H1	1:A:12:DG:H1'	1	0.23
(1,483)	1:A:2:DG:H2"	1:A:1:DA:H8	1	0.23
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	10	0.23
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	2	0.23
(1,457)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H3'	3	0.23
(1,394)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H2'	8	0.23
(1,390)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2"	10	0.23
(1,381)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5'	2	0.23
(1,370)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H3'	6	0.23
(1,363)	1:A:25:DG:H5'	1:A:25:DG:H3'	7	0.23
(1,363)	1:A:25:DG:H5"	1:A:25:DG:H3'	7	0.23
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	9	0.23

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,342)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H2'	1	0.23
(1,341)	1:A:30:DA:H2'	1:A:30:DA:H2"	4	0.23
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	1	0.23
(1,333)	1:A:6:DG:H1	1:A:9:DT:H1'	10	0.23
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5'	10	0.23
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5"	10	0.23
(1,304)	1:A:2:DG:H1'	1:A:2:DG:H4'	10	0.23
(1,294)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	5	0.23
(1,285)	1:A:29:DG:H2"	1:A:29:DG:H2'	9	0.23
(1,26)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H3'	5	0.23
(1,239)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2"	10	0.23
(1,238)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5"	7	0.23
(1,222)	1:A:22:DA:H8	1:A:22:DA:H2'	4	0.23
(1,215)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2'	2	0.23
(1,213)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2"	3	0.23
(1,213)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2"	6	0.23
(1,210)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H5"	7	0.23
(1,202)	1:A:20:DG:H1'	1:A:20:DG:H5"	3	0.23
(1,201)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H5'	5	0.23
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	10	0.23
(1,190)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2'	7	0.23
(1,184)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H4'	9	0.23
(1,170)	1:A:4:DG:H3'	1:A:30:DA:H1'	3	0.23
(1,169)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H1'	10	0.23
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	3	0.23
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	3	0.23
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	8	0.23
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	8	0.23
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	5	0.23
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	5	0.23
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H21	5	0.23
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H22	5	0.23
(1,134)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H2"	4	0.23
(1,131)	1:A:6:DG:H1	1:A:7:DG:H2'	5	0.23
(1,114)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H4'	7	0.23
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	8	0.23
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	3	0.23
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	3	0.23
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	3	0.23
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	3	0.23
(1,855)	1:A:30:DA:H4'	1:A:29:DG:H4'	4	0.22
(1,847)	1:A:31:DG:H1'	1:A:13:DG:H1'	3	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,847)	1:A:31:DG:H1'	1:A:13:DG:H1'	4	0.22
(1,847)	1:A:31:DG:H1'	1:A:13:DG:H1'	7	0.22
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	2	0.22
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	7	0.22
(1,823)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H6	7	0.22
(1,815)	1:A:23:DG:H1'	1:A:24:DA:H4'	5	0.22
(1,813)	1:A:4:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	3	0.22
(1,812)	1:A:4:DG:H2'	1:A:30:DA:H2	6	0.22
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	8	0.22
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	8	0.22
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	1	0.22
(1,810)	1:A:31:DG:H8	1:A:31:DG:H3'	5	0.22
(1,760)	1:A:29:DG:H5'	1:A:29:DG:H4'	1	0.22
(1,760)	1:A:29:DG:H5"	1:A:29:DG:H4'	1	0.22
(1,760)	1:A:29:DG:H5'	1:A:29:DG:H4'	7	0.22
(1,760)	1:A:29:DG:H5"	1:A:29:DG:H4'	7	0.22
(1,752)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H2"	3	0.22
(1,739)	1:A:16:DG:H8	1:A:17:DA:H8	2	0.22
(1,739)	1:A:16:DG:H8	1:A:17:DA:H8	5	0.22
(1,735)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H2'	6	0.22
(1,733)	1:A:11:DG:H1	1:A:24:DA:H2"	6	0.22
(1,729)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	4	0.22
(1,726)	1:A:31:DG:H5"	1:A:31:DG:H4'	3	0.22
(1,704)	1:A:5:DC:H3'	1:A:6:DG:H4'	5	0.22
(1,686)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H5"	9	0.22
(1,68)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2'	1	0.22
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	2	0.22
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2'	10	0.22
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2"	10	0.22
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	7	0.22
(1,631)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H4'	8	0.22
(1,628)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H3'	4	0.22
(1,626)	1:A:11:DG:H8	1:A:10:DT:H6	10	0.22
(1,618)	1:A:11:DG:H8	1:A:12:DG:H8	7	0.22
(1,60)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H2"	7	0.22
(1,60)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H2"	9	0.22
(1,578)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2"	10	0.22
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	9	0.22
(1,551)	1:A:28:DG:H1	1:A:27:DG:H8	5	0.22
(1,548)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H8	6	0.22
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	5	0.22
(1,519)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H1'	9	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,517)	1:A:12:DG:H1	1:A:12:DG:H1'	4	0.22
(1,516)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	3	0.22
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	6	0.22
(1,506)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H1	1	0.22
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	2	0.22
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	5	0.22
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	8	0.22
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	3	0.22
(1,477)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H1'	7	0.22
(1,470)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H5'	2	0.22
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5'	9	0.22
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5"	9	0.22
(1,393)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H2"	1	0.22
(1,385)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H3'	8	0.22
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	5	0.22
(1,364)	1:A:25:DG:H2'	1:A:25:DG:H3'	6	0.22
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5'	4	0.22
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5"	4	0.22
(1,342)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H2'	3	0.22
(1,340)	1:A:31:DG:H5"	1:A:31:DG:H2"	5	0.22
(1,336)	1:A:3:DG:H1	1:A:5:DC:H4'	8	0.22
(1,321)	1:A:27:DG:H1	1:A:28:DG:H1'	7	0.22
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5'	1	0.22
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5"	1	0.22
(1,277)	1:A:29:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	7	0.22
(1,275)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	2	0.22
(1,273)	1:A:28:DG:H1'	1:A:28:DG:H2"	8	0.22
(1,273)	1:A:28:DG:H1'	1:A:28:DG:H2"	9	0.22
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	9	0.22
(1,269)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H1'	1	0.22
(1,238)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5"	8	0.22
(1,195)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	2	0.22
(1,191)	1:A:6:DG:H1'	1:A:6:DG:H2'	8	0.22
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	6	0.22
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	8	0.22
(1,184)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H4'	6	0.22
(1,170)	1:A:4:DG:H3'	1:A:30:DA:H1'	10	0.22
(1,153)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H1'	4	0.22
(1,143)	1:A:4:DG:H1	1:A:31:DG:H5"	8	0.22
(1,129)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H2"	10	0.22
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	10	0.22
(1,119)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2"	7	0.22

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,118)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H2"	3	0.22
(1,112)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H3'	2	0.22
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2'	8	0.22
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H2"	8	0.22
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H21	8	0.22
(1,105)	1:A:4:DG:H1	1:A:4:DG:H22	8	0.22
(1,98)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2"	10	0.21
(1,96)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	7	0.21
(1,94)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	7	0.21
(1,94)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	9	0.21
(1,93)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	6	0.21
(1,93)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	10	0.21
(1,868)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2"	5	0.21
(1,841)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H1'	4	0.21
(1,838)	1:A:11:DG:H1'	1:A:12:DG:H1'	1	0.21
(1,802)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H2"	1	0.21
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	6	0.21
(1,750)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H3'	1	0.21
(1,724)	1:A:21:DA:H5"	1:A:21:DA:H2"	8	0.21
(1,71)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H3'	4	0.21
(1,71)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H3'	10	0.21
(1,707)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H5"	3	0.21
(1,703)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H4'	9	0.21
(1,671)	1:A:19:DG:H1'	1:A:19:DG:H3'	6	0.21
(1,663)	1:A:26:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	3	0.21
(1,663)	1:A:26:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	7	0.21
(1,663)	1:A:26:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	8	0.21
(1,655)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H4'	4	0.21
(1,651)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H5'	3	0.21
(1,651)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H5"	3	0.21
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5'	5	0.21
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5"	5	0.21
(1,62)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H8	1	0.21
(1,615)	1:A:7:DG:H1	1:A:12:DG:H8	8	0.21
(1,614)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H2'	3	0.21
(1,603)	1:A:16:DG:H8	1:A:16:DG:H5"	6	0.21
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2'	1	0.21
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H2"	1	0.21
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H21	1	0.21
(1,583)	1:A:13:DG:H8	1:A:32:DG:H22	1	0.21
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	2	0.21
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	10	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,568)	1:A:25:DG:H1	1:A:1:DA:H1'	7	0.21
(1,567)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1	7	0.21
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	5	0.21
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	4	0.21
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	5	0.21
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	7	0.21
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	10	0.21
(1,548)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H8	1	0.21
(1,548)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H8	3	0.21
(1,520)	1:A:6:DG:H1	1:A:6:DG:H1'	5	0.21
(1,517)	1:A:12:DG:H1	1:A:12:DG:H1'	2	0.21
(1,506)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H1	5	0.21
(1,505)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	6	0.21
(1,492)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H1'	8	0.21
(1,482)	1:A:2:DG:H2'	1:A:1:DA:H8	8	0.21
(1,466)	1:A:2:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	8	0.21
(1,457)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H3'	7	0.21
(1,45)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H8	4	0.21
(1,449)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H3'	10	0.21
(1,431)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H1'	3	0.21
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5'	9	0.21
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5"	9	0.21
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	1	0.21
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	7	0.21
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	3	0.21
(1,385)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H3'	5	0.21
(1,385)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H3'	9	0.21
(1,363)	1:A:25:DG:H5'	1:A:25:DG:H3'	1	0.21
(1,363)	1:A:25:DG:H5"	1:A:25:DG:H3'	1	0.21
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5'	9	0.21
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5"	9	0.21
(1,349)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	3	0.21
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	4	0.21
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	6	0.21
(1,341)	1:A:30:DA:H2'	1:A:30:DA:H2"	2	0.21
(1,340)	1:A:31:DG:H5"	1:A:31:DG:H2"	3	0.21
(1,340)	1:A:31:DG:H5"	1:A:31:DG:H2"	6	0.21
(1,34)	1:A:31:DG:H8	1:A:30:DA:H3'	3	0.21
(1,333)	1:A:6:DG:H1	1:A:9:DT:H1'	6	0.21
(1,310)	1:A:2:DG:H2'	1:A:2:DG:H3'	4	0.21
(1,296)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H6	1	0.21
(1,294)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	6	0.21

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,293)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	2	0.21
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	1	0.21
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	4	0.21
(1,273)	1:A:28:DG:H1'	1:A:28:DG:H2"	6	0.21
(1,27)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H4'	1	0.21
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5'	5	0.21
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5"	5	0.21
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	4	0.21
(1,229)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	1	0.21
(1,229)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	3	0.21
(1,229)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	9	0.21
(1,212)	1:A:21:DA:H8	1:A:20:DG:H5'	6	0.21
(1,201)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H5'	6	0.21
(1,197)	1:A:20:DG:H1'	1:A:21:DA:H8	9	0.21
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	8	0.21
(1,18)	1:A:27:DG:H8	1:A:28:DG:H8	4	0.21
(1,172)	1:A:31:DG:H8	1:A:30:DA:H2'	8	0.21
(1,143)	1:A:4:DG:H1	1:A:31:DG:H5"	5	0.21
(1,129)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H2"	5	0.21
(1,129)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H2"	6	0.21
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	3	0.21
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	4	0.21
(1,114)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H4'	10	0.21
(1,870)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H2'	2	0.2
(1,870)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H2'	3	0.2
(1,869)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2'	6	0.2
(1,863)	1:A:24:DA:H4'	1:A:14:DA:H2	10	0.2
(1,841)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H1'	9	0.2
(1,828)	1:A:3:DG:H8	1:A:1:DA:H2'	10	0.2
(1,824)	1:A:11:DG:H1	1:A:24:DA:H8	4	0.2
(1,80)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H1'	8	0.2
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	7	0.2
(1,777)	1:A:30:DA:H5'	1:A:30:DA:H5"	8	0.2
(1,744)	1:A:3:DG:H2"	1:A:3:DG:H3'	6	0.2
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	4	0.2
(1,733)	1:A:11:DG:H1	1:A:24:DA:H2"	7	0.2
(1,72)	1:A:7:DG:H3'	1:A:8:DT:H6	5	0.2
(1,715)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H5"	5	0.2
(1,713)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H5"	8	0.2
(1,704)	1:A:5:DC:H3'	1:A:6:DG:H4'	8	0.2
(1,703)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H4'	10	0.2
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2'	9	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2"	9	0.2
(1,68)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2'	7	0.2
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2'	7	0.2
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2"	7	0.2
(1,590)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H8	10	0.2
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	2	0.2
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	4	0.2
(1,558)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H8	7	0.2
(1,546)	1:A:11:DG:H1	1:A:12:DG:H8	6	0.2
(1,521)	1:A:26:DG:H1	1:A:2:DG:H1'	10	0.2
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	3	0.2
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	2	0.2
(1,451)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H4'	6	0.2
(1,45)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H8	2	0.2
(1,45)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H8	5	0.2
(1,426)	1:A:29:DG:H2'	1:A:29:DG:H3'	9	0.2
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5'	5	0.2
(1,419)	1:A:7:DG:H3'	1:A:7:DG:H5"	5	0.2
(1,394)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H2'	4	0.2
(1,393)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H2"	3	0.2
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	9	0.2
(1,386)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H4'	7	0.2
(1,373)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H5'	9	0.2
(1,363)	1:A:25:DG:H5'	1:A:25:DG:H3'	8	0.2
(1,363)	1:A:25:DG:H5"	1:A:25:DG:H3'	8	0.2
(1,349)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	6	0.2
(1,324)	1:A:3:DG:H1	1:A:30:DA:H1'	4	0.2
(1,320)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H1'	2	0.2
(1,308)	1:A:2:DG:H5'	1:A:2:DG:H3'	4	0.2
(1,308)	1:A:2:DG:H5"	1:A:2:DG:H3'	4	0.2
(1,306)	1:A:2:DG:H1'	1:A:2:DG:H3'	7	0.2
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	5	0.2
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	5	0.2
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	6	0.2
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	6	0.2
(1,27)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H4'	4	0.2
(1,257)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H8	3	0.2
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	3	0.2
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5'	10	0.2
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5"	10	0.2
(1,242)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H2"	1	0.2
(1,239)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2"	2	0.2

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,230)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H2'	6	0.2
(1,222)	1:A:22:DA:H8	1:A:22:DA:H2'	6	0.2
(1,217)	1:A:21:DA:H2"	1:A:21:DA:H2'	10	0.2
(1,200)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H3'	8	0.2
(1,191)	1:A:6:DG:H1'	1:A:6:DG:H2'	9	0.2
(1,18)	1:A:27:DG:H8	1:A:28:DG:H8	6	0.2
(1,177)	1:A:4:DG:H2'	1:A:4:DG:H3'	5	0.2
(1,170)	1:A:4:DG:H3'	1:A:30:DA:H1'	6	0.2
(1,169)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H1'	4	0.2
(1,169)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H1'	7	0.2
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	10	0.2
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	4	0.2
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	4	0.2
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H21	4	0.2
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H22	4	0.2
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	6	0.2
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	6	0.2
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H21	6	0.2
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H22	6	0.2
(1,144)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H4'	6	0.2
(1,143)	1:A:4:DG:H1	1:A:31:DG:H5"	7	0.2
(1,136)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5"	8	0.2
(1,123)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	2	0.2
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5'	2	0.2
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5"	2	0.2
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	10	0.2
(1,98)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2"	9	0.19
(1,869)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2'	4	0.19
(1,866)	1:A:12:DG:H2"	1:A:14:DA:H2	2	0.19
(1,846)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H1'	4	0.19
(1,823)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H6	1	0.19
(1,815)	1:A:23:DG:H1'	1:A:24:DA:H4'	7	0.19
(1,79)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	7	0.19
(1,749)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H3'	7	0.19
(1,744)	1:A:3:DG:H2"	1:A:3:DG:H3'	1	0.19
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	8	0.19
(1,711)	1:A:24:DA:H2'	1:A:24:DA:H2"	3	0.19
(1,711)	1:A:24:DA:H2'	1:A:24:DA:H2"	4	0.19
(1,71)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H3'	6	0.19
(1,706)	1:A:24:DA:H1'	1:A:24:DA:H5"	6	0.19
(1,703)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H4'	1	0.19
(1,700)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H2'	6	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2'	2	0.19
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2"	2	0.19
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2'	8	0.19
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2"	8	0.19
(1,673)	1:A:20:DG:H5"	1:A:19:DG:H1'	9	0.19
(1,663)	1:A:26:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	6	0.19
(1,624)	1:A:11:DG:H2"	1:A:12:DG:H8	2	0.19
(1,624)	1:A:11:DG:H2"	1:A:12:DG:H8	9	0.19
(1,616)	1:A:32:DG:H1	1:A:12:DG:H8	1	0.19
(1,60)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H2"	2	0.19
(1,60)	1:A:8:DT:H1'	1:A:8:DT:H2"	5	0.19
(1,599)	1:A:16:DG:H1'	1:A:16:DG:H4'	8	0.19
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	9	0.19
(1,535)	1:A:32:DG:H1	1:A:13:DG:H8	1	0.19
(1,505)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	4	0.19
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	9	0.19
(1,495)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H2'	8	0.19
(1,492)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H1'	6	0.19
(1,467)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H3'	5	0.19
(1,467)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H3'	8	0.19
(1,452)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H5'	6	0.19
(1,452)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H5"	6	0.19
(1,45)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H8	3	0.19
(1,449)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H3'	5	0.19
(1,439)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H4'	10	0.19
(1,426)	1:A:29:DG:H2'	1:A:29:DG:H3'	8	0.19
(1,393)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H2"	4	0.19
(1,393)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H2"	5	0.19
(1,378)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H2'	9	0.19
(1,370)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H3'	2	0.19
(1,370)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H3'	3	0.19
(1,370)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H3'	8	0.19
(1,353)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	6	0.19
(1,347)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H5'	3	0.19
(1,331)	1:A:11:DG:H1	1:A:25:DG:H1'	10	0.19
(1,327)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H1'	5	0.19
(1,298)	1:A:2:DG:H8	1:A:2:DG:H2'	10	0.19
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5'	4	0.19
(1,290)	1:A:28:DG:H2'	1:A:29:DG:H5"	4	0.19
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	7	0.19
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	9	0.19
(1,281)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H3'	7	0.19

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	1	0.19
(1,273)	1:A:28:DG:H1'	1:A:28:DG:H2"	7	0.19
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5'	4	0.19
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5"	4	0.19
(1,257)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H8	7	0.19
(1,256)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	2	0.19
(1,256)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	9	0.19
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5'	3	0.19
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5"	3	0.19
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5'	9	0.19
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5"	9	0.19
(1,248)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H1'	5	0.19
(1,237)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5'	6	0.19
(1,231)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H4'	8	0.19
(1,230)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H2'	8	0.19
(1,207)	1:A:20:DG:H1'	1:A:20:DG:H2'	4	0.19
(1,207)	1:A:20:DG:H1'	1:A:20:DG:H2"	4	0.19
(1,201)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H5'	2	0.19
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	2	0.19
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	8	0.19
(1,180)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H1'	7	0.19
(1,177)	1:A:4:DG:H2'	1:A:4:DG:H3'	1	0.19
(1,160)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H8	9	0.19
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H2'	9	0.19
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H2"	9	0.19
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H21	9	0.19
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H22	9	0.19
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	6	0.19
(1,135)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H4'	1	0.19
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	9	0.19
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5'	1	0.19
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5"	1	0.19
(1,119)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2"	2	0.19
(1,114)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H4'	1	0.19
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	3	0.19
(1,112)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H3'	9	0.19
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	2	0.18
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	7	0.18
(1,870)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H2'	6	0.18
(1,856)	1:A:10:DT:H6	1:A:1:DA:H2	9	0.18
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5'	1	0.18
(1,811)	1:A:30:DA:H2	1:A:29:DG:H5"	1	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,81)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H3'	7	0.18
(1,81)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H3'	10	0.18
(1,800)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H2'	10	0.18
(1,79)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	4	0.18
(1,773)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H4'	6	0.18
(1,768)	1:A:23:DG:H8	1:A:24:DA:H8	2	0.18
(1,750)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H3'	2	0.18
(1,750)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H3'	4	0.18
(1,750)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H3'	10	0.18
(1,748)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H3'	9	0.18
(1,745)	1:A:14:DA:H1'	1:A:15:DA:H8	10	0.18
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	6	0.18
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	10	0.18
(1,724)	1:A:21:DA:H5"	1:A:21:DA:H2"	1	0.18
(1,72)	1:A:7:DG:H3'	1:A:8:DT:H6	4	0.18
(1,711)	1:A:24:DA:H2'	1:A:24:DA:H2"	10	0.18
(1,71)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H3'	9	0.18
(1,706)	1:A:24:DA:H1'	1:A:24:DA:H5"	4	0.18
(1,704)	1:A:5:DC:H3'	1:A:6:DG:H4'	1	0.18
(1,703)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H4'	2	0.18
(1,700)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H2'	5	0.18
(1,700)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H2'	7	0.18
(1,697)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H3'	7	0.18
(1,678)	1:A:18:DG:H8	1:A:19:DG:H2"	6	0.18
(1,668)	1:A:20:DG:H8	1:A:19:DG:H1'	3	0.18
(1,653)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H5"	5	0.18
(1,626)	1:A:11:DG:H8	1:A:10:DT:H6	6	0.18
(1,626)	1:A:11:DG:H8	1:A:10:DT:H6	9	0.18
(1,625)	1:A:12:DG:H2"	1:A:12:DG:H2'	8	0.18
(1,624)	1:A:11:DG:H2"	1:A:12:DG:H8	6	0.18
(1,590)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H8	3	0.18
(1,578)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2"	6	0.18
(1,574)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H1	2	0.18
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	10	0.18
(1,568)	1:A:25:DG:H1	1:A:1:DA:H1'	8	0.18
(1,558)	1:A:12:DG:H1	1:A:13:DG:H8	10	0.18
(1,548)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H8	9	0.18
(1,524)	1:A:4:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	10	0.18
(1,516)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	5	0.18
(1,484)	1:A:27:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	3	0.18
(1,484)	1:A:27:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	10	0.18
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	3	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,466)	1:A:2:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	2	0.18
(1,454)	1:A:13:DG:H5'	1:A:14:DA:H8	7	0.18
(1,45)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H8	1	0.18
(1,439)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H4'	7	0.18
(1,432)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H2"	1	0.18
(1,432)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H2"	3	0.18
(1,426)	1:A:29:DG:H2'	1:A:29:DG:H3'	1	0.18
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	8	0.18
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	2	0.18
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	7	0.18
(1,385)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H3'	1	0.18
(1,385)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H3'	3	0.18
(1,384)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H3'	9	0.18
(1,384)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H3'	10	0.18
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	1	0.18
(1,341)	1:A:30:DA:H2'	1:A:30:DA:H2"	1	0.18
(1,341)	1:A:30:DA:H2'	1:A:30:DA:H2"	8	0.18
(1,341)	1:A:30:DA:H2'	1:A:30:DA:H2"	10	0.18
(1,334)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H3'	1	0.18
(1,327)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H1'	2	0.18
(1,320)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H1'	4	0.18
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5'	8	0.18
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5"	8	0.18
(1,293)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	1	0.18
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	5	0.18
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	1	0.18
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	8	0.18
(1,281)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H3'	9	0.18
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	6	0.18
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	1	0.18
(1,27)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H4'	5	0.18
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5'	9	0.18
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5"	9	0.18
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	8	0.18
(1,252)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H3'	7	0.18
(1,238)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5"	6	0.18
(1,233)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	4	0.18
(1,222)	1:A:22:DA:H8	1:A:22:DA:H2'	1	0.18
(1,215)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2'	6	0.18
(1,205)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H5'	2	0.18
(1,195)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	10	0.18
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	9	0.18

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,184)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H4'	2	0.18
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	4	0.18
(1,180)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H1'	2	0.18
(1,18)	1:A:27:DG:H8	1:A:28:DG:H8	9	0.18
(1,18)	1:A:27:DG:H8	1:A:28:DG:H8	10	0.18
(1,177)	1:A:4:DG:H2'	1:A:4:DG:H3'	4	0.18
(1,172)	1:A:31:DG:H8	1:A:30:DA:H2'	6	0.18
(1,170)	1:A:4:DG:H3'	1:A:30:DA:H1'	2	0.18
(1,170)	1:A:4:DG:H3'	1:A:30:DA:H1'	5	0.18
(1,161)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H8	10	0.18
(1,153)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H1'	9	0.18
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H2'	8	0.18
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H2"	8	0.18
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H21	8	0.18
(1,149)	1:A:27:DG:H1	1:A:27:DG:H22	8	0.18
(1,148)	1:A:13:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	5	0.18
(1,148)	1:A:13:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	5	0.18
(1,148)	1:A:13:DG:H1	1:A:28:DG:H21	5	0.18
(1,148)	1:A:13:DG:H1	1:A:28:DG:H22	5	0.18
(1,144)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H4'	2	0.18
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	3	0.18
(1,129)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H2"	2	0.18
(1,129)	1:A:13:DG:H1	1:A:26:DG:H2"	4	0.18
(1,119)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2"	3	0.18
(1,112)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H3'	8	0.18
(1,11)	1:A:27:DG:H1	1:A:26:DG:H1	4	0.18
(1,870)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H2'	5	0.17
(1,870)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H2'	8	0.17
(1,856)	1:A:10:DT:H6	1:A:1:DA:H2	3	0.17
(1,830)	1:A:27:DG:H8	1:A:25:DG:H1'	6	0.17
(1,823)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H6	5	0.17
(1,823)	1:A:2:DG:H1	1:A:10:DT:H6	6	0.17
(1,795)	1:A:9:DT:H5'	1:A:32:DG:H2'	3	0.17
(1,795)	1:A:9:DT:H5"	1:A:32:DG:H2'	3	0.17
(1,787)	1:A:27:DG:H3'	1:A:27:DG:H2'	8	0.17
(1,773)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H4'	3	0.17
(1,760)	1:A:29:DG:H5'	1:A:29:DG:H4'	8	0.17
(1,760)	1:A:29:DG:H5"	1:A:29:DG:H4'	8	0.17
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	10	0.17
(1,750)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H3'	3	0.17
(1,749)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H3'	4	0.17
(1,749)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H3'	6	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,749)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H3'	9	0.17
(1,748)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H3'	1	0.17
(1,748)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H3'	4	0.17
(1,737)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H4'	1	0.17
(1,720)	1:A:30:DA:H5"	1:A:29:DG:H2'	1	0.17
(1,715)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H5"	6	0.17
(1,713)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H5"	5	0.17
(1,711)	1:A:24:DA:H2'	1:A:24:DA:H2"	8	0.17
(1,700)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H2'	2	0.17
(1,700)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H2'	9	0.17
(1,700)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H2'	10	0.17
(1,696)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H3'	5	0.17
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2'	8	0.17
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2"	8	0.17
(1,68)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2'	6	0.17
(1,673)	1:A:20:DG:H5"	1:A:19:DG:H1'	7	0.17
(1,669)	1:A:22:DA:H1'	1:A:23:DG:H8	4	0.17
(1,653)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H5"	3	0.17
(1,653)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H5"	4	0.17
(1,62)	1:A:31:DG:H5"	1:A:32:DG:H8	2	0.17
(1,615)	1:A:7:DG:H1	1:A:12:DG:H8	9	0.17
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	1	0.17
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	5	0.17
(1,590)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H8	8	0.17
(1,574)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H1	10	0.17
(1,565)	1:A:2:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	9	0.17
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	8	0.17
(1,548)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H8	4	0.17
(1,543)	1:A:12:DG:H1	1:A:32:DG:H1	4	0.17
(1,530)	1:A:11:DG:H1	1:A:25:DG:H8	5	0.17
(1,525)	1:A:7:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	1	0.17
(1,517)	1:A:12:DG:H1	1:A:12:DG:H1'	5	0.17
(1,482)	1:A:2:DG:H2'	1:A:1:DA:H8	4	0.17
(1,479)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	7	0.17
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	7	0.17
(1,406)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	3	0.17
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5'	2	0.17
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5"	2	0.17
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5'	10	0.17
(1,404)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H5"	10	0.17
(1,385)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H3'	6	0.17
(1,373)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H5'	7	0.17

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,363)	1:A:25:DG:H5'	1:A:25:DG:H3'	2	0.17
(1,363)	1:A:25:DG:H5"	1:A:25:DG:H3'	2	0.17
(1,359)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H4'	8	0.17
(1,349)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	1	0.17
(1,342)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H2'	4	0.17
(1,342)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H2'	7	0.17
(1,320)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H1'	1	0.17
(1,304)	1:A:2:DG:H1'	1:A:2:DG:H4'	1	0.17
(1,30)	1:A:4:DG:H2"	1:A:4:DG:H2'	1	0.17
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	6	0.17
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	5	0.17
(1,281)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H3'	2	0.17
(1,273)	1:A:28:DG:H1'	1:A:28:DG:H2"	4	0.17
(1,257)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H8	8	0.17
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	7	0.17
(1,248)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H1'	4	0.17
(1,241)	1:A:10:DT:H2"	1:A:10:DT:H2'	6	0.17
(1,240)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2'	9	0.17
(1,210)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H5"	8	0.17
(1,201)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H5'	7	0.17
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	5	0.17
(1,189)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	7	0.17
(1,187)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2'	4	0.17
(1,177)	1:A:4:DG:H2'	1:A:4:DG:H3'	9	0.17
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2'	2	0.17
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H2"	2	0.17
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H21	2	0.17
(1,146)	1:A:28:DG:H1	1:A:28:DG:H22	2	0.17
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	10	0.17
(1,135)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H4'	4	0.17
(1,131)	1:A:6:DG:H1	1:A:7:DG:H2'	7	0.17
(1,114)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H4'	5	0.17
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	4	0.16
(1,93)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	2	0.16
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5'	9	0.16
(1,87)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H5"	9	0.16
(1,868)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2"	7	0.16
(1,856)	1:A:10:DT:H6	1:A:1:DA:H2	6	0.16
(1,855)	1:A:30:DA:H4'	1:A:29:DG:H4'	2	0.16
(1,838)	1:A:11:DG:H1'	1:A:12:DG:H1'	7	0.16
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	3	0.16
(1,824)	1:A:11:DG:H1	1:A:24:DA:H8	9	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,81)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H3'	2	0.16
(1,797)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H2'	8	0.16
(1,797)	1:A:10:DT:H5"	1:A:10:DT:H2'	8	0.16
(1,779)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H5'	5	0.16
(1,779)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H5"	5	0.16
(1,773)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H4'	8	0.16
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	6	0.16
(1,750)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H3'	7	0.16
(1,744)	1:A:3:DG:H2"	1:A:3:DG:H3'	4	0.16
(1,739)	1:A:16:DG:H8	1:A:17:DA:H8	4	0.16
(1,733)	1:A:11:DG:H1	1:A:24:DA:H2"	9	0.16
(1,729)	1:A:4:DG:H8	1:A:3:DG:H3'	10	0.16
(1,715)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H5"	10	0.16
(1,711)	1:A:24:DA:H2'	1:A:24:DA:H2"	7	0.16
(1,692)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H5'	2	0.16
(1,678)	1:A:18:DG:H8	1:A:19:DG:H2"	4	0.16
(1,649)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H2'	5	0.16
(1,649)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H2"	5	0.16
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5'	3	0.16
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5"	3	0.16
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5'	4	0.16
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5"	4	0.16
(1,616)	1:A:32:DG:H1	1:A:12:DG:H8	3	0.16
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	3	0.16
(1,590)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H8	9	0.16
(1,568)	1:A:25:DG:H1	1:A:1:DA:H1'	9	0.16
(1,551)	1:A:28:DG:H1	1:A:27:DG:H8	1	0.16
(1,551)	1:A:28:DG:H1	1:A:27:DG:H8	2	0.16
(1,549)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H8	5	0.16
(1,482)	1:A:2:DG:H2'	1:A:1:DA:H8	1	0.16
(1,478)	1:A:2:DG:H1'	1:A:3:DG:H8	5	0.16
(1,452)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H5'	4	0.16
(1,452)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H5"	4	0.16
(1,452)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H5'	5	0.16
(1,452)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H5"	5	0.16
(1,45)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H8	6	0.16
(1,406)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	7	0.16
(1,395)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H2'	7	0.16
(1,393)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H2"	7	0.16
(1,391)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	4	0.16
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	6	0.16
(1,387)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H4'	8	0.16

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,384)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H3'	2	0.16
(1,381)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5'	6	0.16
(1,373)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H5'	2	0.16
(1,359)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H4'	4	0.16
(1,341)	1:A:30:DA:H2'	1:A:30:DA:H2"	9	0.16
(1,340)	1:A:31:DG:H5"	1:A:31:DG:H2"	9	0.16
(1,329)	1:A:7:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	1	0.16
(1,327)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H1'	10	0.16
(1,30)	1:A:4:DG:H2"	1:A:4:DG:H2'	7	0.16
(1,277)	1:A:29:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	10	0.16
(1,273)	1:A:28:DG:H1'	1:A:28:DG:H2"	2	0.16
(1,27)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H4'	3	0.16
(1,27)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H4'	7	0.16
(1,265)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H3'	5	0.16
(1,26)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H3'	3	0.16
(1,239)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2"	8	0.16
(1,237)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5'	2	0.16
(1,234)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	2	0.16
(1,231)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H4'	7	0.16
(1,217)	1:A:21:DA:H2"	1:A:21:DA:H2'	8	0.16
(1,213)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2"	2	0.16
(1,211)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H5'	5	0.16
(1,21)	1:A:4:DG:H1'	1:A:4:DG:H2"	10	0.16
(1,191)	1:A:6:DG:H1'	1:A:6:DG:H2'	5	0.16
(1,191)	1:A:6:DG:H1'	1:A:6:DG:H2'	7	0.16
(1,184)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H4'	3	0.16
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	9	0.16
(1,162)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5"	9	0.16
(1,137)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H5'	4	0.16
(1,137)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H5'	6	0.16
(1,137)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H5'	9	0.16
(1,136)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5"	6	0.16
(1,136)	1:A:30:DA:H8	1:A:31:DG:H5"	9	0.16
(1,118)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H2"	7	0.16
(1,118)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H2"	10	0.16
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	10	0.16
(1,107)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	10	0.16
(1,98)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2"	1	0.15
(1,98)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2"	6	0.15
(1,94)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2'	8	0.15
(1,870)	1:A:16:DG:H8	1:A:15:DA:H2'	9	0.15
(1,835)	1:A:20:DG:H1'	1:A:21:DA:H2	1	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,828)	1:A:3:DG:H8	1:A:1:DA:H2'	1	0.15
(1,828)	1:A:3:DG:H8	1:A:1:DA:H2'	3	0.15
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	9	0.15
(1,813)	1:A:4:DG:H2"	1:A:30:DA:H2	5	0.15
(1,80)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H1'	6	0.15
(1,773)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H4'	5	0.15
(1,767)	1:A:22:DA:H8	1:A:23:DG:H8	2	0.15
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	1	0.15
(1,72)	1:A:7:DG:H3'	1:A:8:DT:H6	6	0.15
(1,707)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H5"	4	0.15
(1,703)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H4'	4	0.15
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2'	1	0.15
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2"	1	0.15
(1,678)	1:A:18:DG:H8	1:A:19:DG:H2"	3	0.15
(1,677)	1:A:19:DG:H8	1:A:19:DG:H2'	2	0.15
(1,65)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H6	5	0.15
(1,649)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H2'	2	0.15
(1,649)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H2"	2	0.15
(1,648)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2'	10	0.15
(1,647)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2"	6	0.15
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5'	7	0.15
(1,642)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H5"	7	0.15
(1,625)	1:A:12:DG:H2"	1:A:12:DG:H2'	5	0.15
(1,625)	1:A:12:DG:H2"	1:A:12:DG:H2'	6	0.15
(1,625)	1:A:12:DG:H2"	1:A:12:DG:H2'	9	0.15
(1,616)	1:A:32:DG:H1	1:A:12:DG:H8	5	0.15
(1,615)	1:A:7:DG:H1	1:A:12:DG:H8	3	0.15
(1,614)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H2'	2	0.15
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	9	0.15
(1,574)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H1	4	0.15
(1,574)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H1	9	0.15
(1,57)	1:A:7:DG:H4'	1:A:7:DG:H3'	1	0.15
(1,551)	1:A:28:DG:H1	1:A:27:DG:H8	3	0.15
(1,549)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H8	7	0.15
(1,518)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	2	0.15
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	3	0.15
(1,484)	1:A:27:DG:H2"	1:A:28:DG:H2"	8	0.15
(1,481)	1:A:2:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	6	0.15
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	6	0.15
(1,480)	1:A:2:DG:H3'	1:A:3:DG:H8	10	0.15
(1,449)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H3'	8	0.15
(1,431)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H1'	2	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,430)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H1'	2	0.15
(1,426)	1:A:29:DG:H2'	1:A:29:DG:H3'	4	0.15
(1,424)	1:A:31:DG:H5"	1:A:30:DA:H2'	3	0.15
(1,406)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	1	0.15
(1,385)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H3'	4	0.15
(1,384)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H3'	5	0.15
(1,370)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H3'	9	0.15
(1,363)	1:A:25:DG:H5'	1:A:25:DG:H3'	5	0.15
(1,363)	1:A:25:DG:H5"	1:A:25:DG:H3'	5	0.15
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	3	0.15
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	8	0.15
(1,353)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	4	0.15
(1,341)	1:A:30:DA:H2'	1:A:30:DA:H2"	3	0.15
(1,333)	1:A:6:DG:H1	1:A:9:DT:H1'	4	0.15
(1,320)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H1'	6	0.15
(1,304)	1:A:2:DG:H1'	1:A:2:DG:H4'	4	0.15
(1,30)	1:A:4:DG:H2"	1:A:4:DG:H2'	2	0.15
(1,30)	1:A:4:DG:H2"	1:A:4:DG:H2'	10	0.15
(1,294)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	8	0.15
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	6	0.15
(1,277)	1:A:29:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	5	0.15
(1,273)	1:A:28:DG:H1'	1:A:28:DG:H2"	5	0.15
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	6	0.15
(1,271)	1:A:29:DG:H1'	1:A:29:DG:H2"	7	0.15
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5'	7	0.15
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5"	7	0.15
(1,253)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2"	10	0.15
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5'	7	0.15
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5"	7	0.15
(1,248)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H1'	6	0.15
(1,229)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H2"	5	0.15
(1,223)	1:A:22:DA:H8	1:A:22:DA:H2"	9	0.15
(1,217)	1:A:21:DA:H2"	1:A:21:DA:H2'	9	0.15
(1,212)	1:A:21:DA:H8	1:A:20:DG:H5'	4	0.15
(1,205)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H5'	8	0.15
(1,204)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H5"	4	0.15
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	6	0.15
(1,191)	1:A:6:DG:H1'	1:A:6:DG:H2'	2	0.15
(1,18)	1:A:27:DG:H8	1:A:28:DG:H8	1	0.15
(1,177)	1:A:4:DG:H2'	1:A:4:DG:H3'	3	0.15
(1,177)	1:A:4:DG:H2'	1:A:4:DG:H3'	8	0.15
(1,170)	1:A:4:DG:H3'	1:A:30:DA:H1'	8	0.15

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	9	0.15
(1,119)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2"	4	0.15
(1,114)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H4'	4	0.15
(1,112)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H3'	10	0.15
(1,11)	1:A:27:DG:H1	1:A:26:DG:H1	8	0.15
(1,868)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2"	6	0.14
(1,857)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H8	5	0.14
(1,846)	1:A:16:DG:H1'	1:A:17:DA:H1'	6	0.14
(1,841)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H1'	6	0.14
(1,838)	1:A:11:DG:H1'	1:A:12:DG:H1'	8	0.14
(1,826)	1:A:28:DG:H1'	1:A:30:DA:H2	9	0.14
(1,824)	1:A:11:DG:H1	1:A:24:DA:H8	2	0.14
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	6	0.14
(1,81)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H3'	3	0.14
(1,802)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H2"	4	0.14
(1,802)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H2"	5	0.14
(1,802)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H2"	7	0.14
(1,80)	1:A:27:DG:H8	1:A:26:DG:H1'	9	0.14
(1,791)	1:A:4:DG:H2"	1:A:30:DA:H1'	2	0.14
(1,79)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	8	0.14
(1,79)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	10	0.14
(1,782)	1:A:32:DG:H8	1:A:30:DA:H5'	6	0.14
(1,780)	1:A:28:DG:H8	1:A:29:DG:H5'	4	0.14
(1,780)	1:A:28:DG:H8	1:A:29:DG:H5"	4	0.14
(1,755)	1:A:15:DA:H3'	1:A:15:DA:H2'	5	0.14
(1,752)	1:A:15:DA:H1'	1:A:15:DA:H2"	10	0.14
(1,75)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H2'	4	0.14
(1,739)	1:A:16:DG:H8	1:A:17:DA:H8	9	0.14
(1,704)	1:A:5:DC:H3'	1:A:6:DG:H4'	9	0.14
(1,703)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H4'	7	0.14
(1,691)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H5"	3	0.14
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2'	10	0.14
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2"	10	0.14
(1,68)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H2'	3	0.14
(1,672)	1:A:19:DG:H1'	1:A:19:DG:H4'	8	0.14
(1,655)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H4'	8	0.14
(1,65)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H6	6	0.14
(1,647)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2"	10	0.14
(1,618)	1:A:11:DG:H8	1:A:12:DG:H8	6	0.14
(1,614)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H2'	6	0.14
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	7	0.14
(1,592)	1:A:13:DG:H5'	1:A:12:DG:H1'	10	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,591)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H1'	7	0.14
(1,590)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H8	5	0.14
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	8	0.14
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	2	0.14
(1,541)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H8	6	0.14
(1,524)	1:A:4:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	6	0.14
(1,514)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H1'	8	0.14
(1,505)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	8	0.14
(1,505)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	10	0.14
(1,483)	1:A:2:DG:H2"	1:A:1:DA:H8	10	0.14
(1,466)	1:A:2:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	5	0.14
(1,466)	1:A:2:DG:H2'	1:A:3:DG:H8	9	0.14
(1,464)	1:A:14:DA:H5'	1:A:14:DA:H2'	4	0.14
(1,464)	1:A:14:DA:H5"	1:A:14:DA:H2'	4	0.14
(1,460)	1:A:13:DG:H5'	1:A:14:DA:H1'	1	0.14
(1,460)	1:A:13:DG:H5'	1:A:14:DA:H1'	7	0.14
(1,457)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H3'	4	0.14
(1,452)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H5'	7	0.14
(1,452)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H5"	7	0.14
(1,440)	1:A:1:DA:H5'	1:A:1:DA:H4'	4	0.14
(1,440)	1:A:1:DA:H5"	1:A:1:DA:H4'	4	0.14
(1,432)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H2"	2	0.14
(1,432)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H2"	7	0.14
(1,394)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H2'	10	0.14
(1,393)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H2"	9	0.14
(1,381)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5'	4	0.14
(1,381)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5'	9	0.14
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5'	3	0.14
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5"	3	0.14
(1,349)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	10	0.14
(1,331)	1:A:11:DG:H1	1:A:25:DG:H1'	1	0.14
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5'	7	0.14
(1,312)	1:A:2:DG:H2"	1:A:2:DG:H5"	7	0.14
(1,30)	1:A:4:DG:H2"	1:A:4:DG:H2'	4	0.14
(1,281)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H3'	5	0.14
(1,28)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H2"	2	0.14
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	4	0.14
(1,27)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H4'	8	0.14
(1,262)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H3'	10	0.14
(1,26)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H3'	2	0.14
(1,257)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H8	10	0.14
(1,246)	1:A:9:DT:H1'	1:A:9:DT:H4'	7	0.14

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,245)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H4'	5	0.14
(1,241)	1:A:10:DT:H2"	1:A:10:DT:H2'	2	0.14
(1,224)	1:A:22:DA:H1'	1:A:22:DA:H2'	9	0.14
(1,223)	1:A:22:DA:H8	1:A:22:DA:H2"	5	0.14
(1,215)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2'	1	0.14
(1,215)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2'	3	0.14
(1,210)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H5"	10	0.14
(1,195)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	1	0.14
(1,195)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	9	0.14
(1,191)	1:A:6:DG:H1'	1:A:6:DG:H2'	1	0.14
(1,188)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2"	3	0.14
(1,18)	1:A:27:DG:H8	1:A:28:DG:H8	5	0.14
(1,169)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H1'	1	0.14
(1,153)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H1'	8	0.14
(1,137)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H5'	7	0.14
(1,137)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H5'	8	0.14
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5'	9	0.14
(1,122)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H5"	9	0.14
(1,119)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2"	1	0.14
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	9	0.13
(1,869)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2'	5	0.13
(1,867)	1:A:14:DA:H2	1:A:15:DA:H2	8	0.13
(1,866)	1:A:12:DG:H2"	1:A:14:DA:H2	5	0.13
(1,86)	1:A:26:DG:H1'	1:A:26:DG:H4'	9	0.13
(1,856)	1:A:10:DT:H6	1:A:1:DA:H2	7	0.13
(1,855)	1:A:30:DA:H4'	1:A:29:DG:H4'	6	0.13
(1,847)	1:A:31:DG:H1'	1:A:13:DG:H1'	9	0.13
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	7	0.13
(1,825)	1:A:13:DG:H1'	1:A:13:DG:H3'	5	0.13
(1,81)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H3'	1	0.13
(1,800)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H2'	9	0.13
(1,773)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H4'	9	0.13
(1,773)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H4'	10	0.13
(1,748)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H3'	3	0.13
(1,742)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H3'	4	0.13
(1,724)	1:A:21:DA:H5"	1:A:21:DA:H2"	9	0.13
(1,713)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H5"	4	0.13
(1,71)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H3'	1	0.13
(1,703)	1:A:24:DA:H3'	1:A:24:DA:H4'	3	0.13
(1,700)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H2'	1	0.13
(1,686)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H5"	4	0.13
(1,679)	1:A:19:DG:H5'	1:A:19:DG:H1'	2	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,672)	1:A:19:DG:H1'	1:A:19:DG:H4'	10	0.13
(1,663)	1:A:26:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	2	0.13
(1,655)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H4'	10	0.13
(1,647)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2"	9	0.13
(1,626)	1:A:11:DG:H8	1:A:10:DT:H6	2	0.13
(1,615)	1:A:7:DG:H1	1:A:12:DG:H8	1	0.13
(1,603)	1:A:16:DG:H8	1:A:16:DG:H5"	2	0.13
(1,602)	1:A:16:DG:H8	1:A:16:DG:H4'	10	0.13
(1,591)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H1'	6	0.13
(1,590)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H8	1	0.13
(1,58)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H3'	7	0.13
(1,578)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2"	3	0.13
(1,569)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H3'	2	0.13
(1,568)	1:A:25:DG:H1	1:A:1:DA:H1'	4	0.13
(1,567)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1	1	0.13
(1,554)	1:A:13:DG:H1	1:A:31:DG:H8	10	0.13
(1,541)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H8	2	0.13
(1,534)	1:A:32:DG:H1	1:A:32:DG:H2'	1	0.13
(1,534)	1:A:32:DG:H1	1:A:32:DG:H2"	1	0.13
(1,534)	1:A:32:DG:H1	1:A:32:DG:H21	1	0.13
(1,534)	1:A:32:DG:H1	1:A:32:DG:H22	1	0.13
(1,524)	1:A:4:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	2	0.13
(1,524)	1:A:4:DG:H1	1:A:32:DG:H1'	9	0.13
(1,514)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H1'	4	0.13
(1,512)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H3'	10	0.13
(1,499)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2"	6	0.13
(1,481)	1:A:2:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	1	0.13
(1,481)	1:A:2:DG:H2"	1:A:3:DG:H8	5	0.13
(1,473)	1:A:3:DG:H5'	1:A:3:DG:H3'	1	0.13
(1,467)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H3'	1	0.13
(1,467)	1:A:3:DG:H1'	1:A:3:DG:H3'	7	0.13
(1,463)	1:A:14:DA:H1'	1:A:14:DA:H2'	3	0.13
(1,454)	1:A:13:DG:H5'	1:A:14:DA:H8	6	0.13
(1,45)	1:A:7:DG:H2'	1:A:7:DG:H8	7	0.13
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	3	0.13
(1,406)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	9	0.13
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5'	8	0.13
(1,401)	1:A:8:DT:H6	1:A:8:DT:H5"	8	0.13
(1,398)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H6	1	0.13
(1,393)	1:A:12:DG:H1'	1:A:12:DG:H2"	6	0.13
(1,384)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H3'	4	0.13
(1,384)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H3'	8	0.13

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,381)	1:A:13:DG:H4'	1:A:13:DG:H5'	5	0.13
(1,373)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H5'	6	0.13
(1,369)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H1'	10	0.13
(1,349)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	9	0.13
(1,340)	1:A:31:DG:H5"	1:A:31:DG:H2"	7	0.13
(1,304)	1:A:2:DG:H1'	1:A:2:DG:H4'	2	0.13
(1,30)	1:A:4:DG:H2"	1:A:4:DG:H2'	9	0.13
(1,296)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H6	5	0.13
(1,287)	1:A:29:DG:H2'	1:A:28:DG:H2"	7	0.13
(1,281)	1:A:28:DG:H2'	1:A:28:DG:H3'	3	0.13
(1,279)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H4'	1	0.13
(1,26)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H3'	7	0.13
(1,26)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H3'	10	0.13
(1,257)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H8	9	0.13
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	5	0.13
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	10	0.13
(1,252)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H3'	1	0.13
(1,252)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H3'	5	0.13
(1,245)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H4'	10	0.13
(1,240)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2'	5	0.13
(1,237)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5'	5	0.13
(1,232)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H5'	9	0.13
(1,23)	1:A:4:DG:H1'	1:A:4:DG:H4'	6	0.13
(1,224)	1:A:22:DA:H1'	1:A:22:DA:H2'	5	0.13
(1,215)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H2'	4	0.13
(1,200)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H3'	7	0.13
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	1	0.13
(1,187)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H2'	8	0.13
(1,184)	1:A:6:DG:H8	1:A:6:DG:H4'	10	0.13
(1,180)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H1'	8	0.13
(1,172)	1:A:31:DG:H8	1:A:30:DA:H2'	1	0.13
(1,161)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H8	2	0.13
(1,161)	1:A:11:DG:H2'	1:A:11:DG:H8	8	0.13
(1,137)	1:A:30:DA:H8	1:A:30:DA:H5'	1	0.13
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	1	0.13
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	7	0.13
(1,119)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2"	10	0.13
(1,98)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2"	4	0.12
(1,858)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H4'	3	0.12
(1,841)	1:A:20:DG:H1'	1:A:19:DG:H1'	8	0.12
(1,838)	1:A:11:DG:H1'	1:A:12:DG:H1'	6	0.12
(1,81)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H3'	4	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,802)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H2"	8	0.12
(1,800)	1:A:30:DA:H8	1:A:29:DG:H2'	5	0.12
(1,759)	1:A:29:DG:H3'	1:A:29:DG:H4'	7	0.12
(1,742)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H3'	2	0.12
(1,715)	1:A:10:DT:H5'	1:A:10:DT:H5"	8	0.12
(1,713)	1:A:24:DA:H8	1:A:24:DA:H5"	1	0.12
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2'	4	0.12
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2"	4	0.12
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2'	7	0.12
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2"	7	0.12
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2'	2	0.12
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2"	2	0.12
(1,653)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H5"	8	0.12
(1,648)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2'	8	0.12
(1,647)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2"	5	0.12
(1,646)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H2"	10	0.12
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2'	5	0.12
(1,644)	1:A:18:DG:H1'	1:A:18:DG:H2"	5	0.12
(1,625)	1:A:12:DG:H2"	1:A:12:DG:H2'	4	0.12
(1,614)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H2'	7	0.12
(1,614)	1:A:8:DT:H2"	1:A:8:DT:H2'	8	0.12
(1,598)	1:A:16:DG:H8	1:A:16:DG:H3'	1	0.12
(1,593)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H1'	6	0.12
(1,591)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H1'	1	0.12
(1,590)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H8	2	0.12
(1,586)	1:A:13:DG:H8	1:A:12:DG:H2'	9	0.12
(1,572)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H4'	4	0.12
(1,567)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H1	6	0.12
(1,564)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H8	9	0.12
(1,56)	1:A:32:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	3	0.12
(1,535)	1:A:32:DG:H1	1:A:13:DG:H8	3	0.12
(1,535)	1:A:32:DG:H1	1:A:13:DG:H8	8	0.12
(1,530)	1:A:11:DG:H1	1:A:25:DG:H8	1	0.12
(1,516)	1:A:27:DG:H1	1:A:3:DG:H1'	7	0.12
(1,505)	1:A:3:DG:H1	1:A:3:DG:H2'	2	0.12
(1,482)	1:A:2:DG:H2'	1:A:1:DA:H8	2	0.12
(1,482)	1:A:2:DG:H2'	1:A:1:DA:H8	3	0.12
(1,456)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2'	8	0.12
(1,451)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H4'	5	0.12
(1,449)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H3'	7	0.12
(1,44)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H8	7	0.12
(1,44)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H8	8	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,431)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H1'	7	0.12
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	2	0.12
(1,394)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H2'	5	0.12
(1,384)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H3'	1	0.12
(1,378)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H2'	10	0.12
(1,374)	1:A:13:DG:H8	1:A:13:DG:H5"	1	0.12
(1,360)	1:A:25:DG:H1'	1:A:25:DG:H3'	9	0.12
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5'	5	0.12
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5"	5	0.12
(1,353)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H2'	8	0.12
(1,349)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H2"	5	0.12
(1,342)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H2'	5	0.12
(1,342)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H2'	9	0.12
(1,341)	1:A:30:DA:H2'	1:A:30:DA:H2"	6	0.12
(1,331)	1:A:11:DG:H1	1:A:25:DG:H1'	4	0.12
(1,327)	1:A:12:DG:H1	1:A:26:DG:H1'	1	0.12
(1,326)	1:A:3:DG:H1	1:A:7:DG:H1'	7	0.12
(1,321)	1:A:27:DG:H1	1:A:28:DG:H1'	6	0.12
(1,320)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H1'	10	0.12
(1,304)	1:A:2:DG:H1'	1:A:2:DG:H4'	8	0.12
(1,304)	1:A:2:DG:H1'	1:A:2:DG:H4'	9	0.12
(1,30)	1:A:4:DG:H2"	1:A:4:DG:H2'	5	0.12
(1,296)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H6	9	0.12
(1,277)	1:A:29:DG:H8	1:A:28:DG:H2"	9	0.12
(1,27)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H4'	6	0.12
(1,254)	1:A:29:DG:H8	1:A:29:DG:H2'	9	0.12
(1,248)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H1'	1	0.12
(1,241)	1:A:10:DT:H2"	1:A:10:DT:H2'	4	0.12
(1,240)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2'	8	0.12
(1,234)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	9	0.12
(1,222)	1:A:22:DA:H8	1:A:22:DA:H2'	5	0.12
(1,211)	1:A:21:DA:H8	1:A:21:DA:H5'	2	0.12
(1,21)	1:A:4:DG:H1'	1:A:4:DG:H2"	6	0.12
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	2	0.12
(1,193)	1:A:6:DG:H3'	1:A:6:DG:H2'	7	0.12
(1,191)	1:A:6:DG:H1'	1:A:6:DG:H2'	4	0.12
(1,182)	1:A:7:DG:H8	1:A:6:DG:H3'	2	0.12
(1,18)	1:A:27:DG:H8	1:A:28:DG:H8	8	0.12
(1,170)	1:A:4:DG:H3'	1:A:30:DA:H1'	1	0.12
(1,153)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H1'	5	0.12
(1,141)	1:A:30:DA:H1'	1:A:30:DA:H5"	7	0.12
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	5	0.12

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,113)	1:A:5:DC:H1'	1:A:5:DC:H4'	5	0.12
(1,97)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H2'	1	0.11
(1,93)	1:A:26:DG:H8	1:A:26:DG:H2"	5	0.11
(1,869)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2'	7	0.11
(1,868)	1:A:15:DA:H8	1:A:15:DA:H2"	4	0.11
(1,867)	1:A:14:DA:H2	1:A:15:DA:H2	3	0.11
(1,858)	1:A:20:DG:H8	1:A:20:DG:H4'	2	0.11
(1,832)	1:A:7:DG:H8	1:A:7:DG:H4'	8	0.11
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	7	0.11
(1,816)	1:A:13:DG:H4'	1:A:14:DA:H4'	8	0.11
(1,79)	1:A:27:DG:H8	1:A:27:DG:H1'	2	0.11
(1,782)	1:A:32:DG:H8	1:A:30:DA:H5'	2	0.11
(1,782)	1:A:32:DG:H8	1:A:30:DA:H5'	3	0.11
(1,745)	1:A:14:DA:H1'	1:A:15:DA:H8	7	0.11
(1,723)	1:A:19:DG:H5'	1:A:20:DG:H2'	2	0.11
(1,723)	1:A:19:DG:H5'	1:A:20:DG:H2"	2	0.11
(1,716)	1:A:31:DG:H2'	1:A:30:DA:H2"	10	0.11
(1,71)	1:A:9:DT:H6	1:A:9:DT:H3'	7	0.11
(1,706)	1:A:24:DA:H1'	1:A:24:DA:H5"	3	0.11
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2'	6	0.11
(1,689)	1:A:23:DG:H8	1:A:23:DG:H2"	6	0.11
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2'	5	0.11
(1,688)	1:A:23:DG:H1'	1:A:23:DG:H2"	5	0.11
(1,656)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H4'	9	0.11
(1,651)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H5'	9	0.11
(1,651)	1:A:18:DG:H8	1:A:18:DG:H5"	9	0.11
(1,650)	1:A:17:DA:H8	1:A:17:DA:H5'	6	0.11
(1,648)	1:A:17:DA:H1'	1:A:17:DA:H2'	7	0.11
(1,625)	1:A:12:DG:H2"	1:A:12:DG:H2'	1	0.11
(1,625)	1:A:12:DG:H2"	1:A:12:DG:H2'	2	0.11
(1,603)	1:A:16:DG:H8	1:A:16:DG:H5"	1	0.11
(1,603)	1:A:16:DG:H8	1:A:16:DG:H5"	9	0.11
(1,578)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2"	2	0.11
(1,578)	1:A:7:DG:H1	1:A:9:DT:H2"	8	0.11
(1,564)	1:A:7:DG:H1	1:A:11:DG:H8	8	0.11
(1,550)	1:A:28:DG:H1	1:A:30:DA:H8	6	0.11
(1,542)	1:A:3:DG:H1	1:A:6:DG:H8	7	0.11
(1,541)	1:A:4:DG:H1	1:A:7:DG:H8	3	0.11
(1,535)	1:A:32:DG:H1	1:A:13:DG:H8	5	0.11
(1,52)	1:A:32:DG:H4'	1:A:32:DG:H8	2	0.11
(1,517)	1:A:12:DG:H1	1:A:12:DG:H1'	3	0.11
(1,517)	1:A:12:DG:H1	1:A:12:DG:H1'	8	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,514)	1:A:6:DG:H1	1:A:10:DT:H1'	9	0.11
(1,455)	1:A:14:DA:H8	1:A:14:DA:H2"	7	0.11
(1,444)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H3'	2	0.11
(1,44)	1:A:7:DG:H2"	1:A:7:DG:H8	10	0.11
(1,439)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H4'	1	0.11
(1,439)	1:A:1:DA:H1'	1:A:1:DA:H4'	8	0.11
(1,431)	1:A:2:DG:H8	1:A:1:DA:H1'	6	0.11
(1,430)	1:A:1:DA:H8	1:A:1:DA:H1'	8	0.11
(1,426)	1:A:29:DG:H2'	1:A:29:DG:H3'	7	0.11
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	6	0.11
(1,412)	1:A:7:DG:H2"	1:A:32:DG:H8	10	0.11
(1,406)	1:A:7:DG:H1'	1:A:32:DG:H8	4	0.11
(1,398)	1:A:8:DT:H2'	1:A:8:DT:H6	8	0.11
(1,394)	1:A:13:DG:H5"	1:A:12:DG:H2'	3	0.11
(1,384)	1:A:12:DG:H8	1:A:12:DG:H3'	7	0.11
(1,359)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H4'	1	0.11
(1,359)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H4'	5	0.11
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5'	8	0.11
(1,357)	1:A:25:DG:H8	1:A:25:DG:H5"	8	0.11
(1,345)	1:A:3:DG:H8	1:A:3:DG:H4'	7	0.11
(1,342)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H2'	2	0.11
(1,342)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H2'	6	0.11
(1,342)	1:A:31:DG:H2"	1:A:31:DG:H2'	10	0.11
(1,333)	1:A:6:DG:H1	1:A:9:DT:H1'	7	0.11
(1,321)	1:A:27:DG:H1	1:A:28:DG:H1'	8	0.11
(1,304)	1:A:2:DG:H1'	1:A:2:DG:H4'	6	0.11
(1,30)	1:A:4:DG:H2"	1:A:4:DG:H2'	8	0.11
(1,293)	1:A:9:DT:H1'	1:A:10:DT:H3'	7	0.11
(1,284)	1:A:28:DG:H2"	1:A:28:DG:H2'	2	0.11
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5'	10	0.11
(1,267)	1:A:28:DG:H1'	1:A:29:DG:H5"	10	0.11
(1,262)	1:A:28:DG:H8	1:A:27:DG:H3'	4	0.11
(1,26)	1:A:4:DG:H8	1:A:4:DG:H3'	8	0.11
(1,256)	1:A:28:DG:H8	1:A:28:DG:H2'	7	0.11
(1,252)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H3'	2	0.11
(1,252)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H3'	6	0.11
(1,252)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H3'	8	0.11
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5'	5	0.11
(1,250)	1:A:9:DT:H3'	1:A:9:DT:H5"	5	0.11
(1,248)	1:A:9:DT:H2"	1:A:9:DT:H1'	7	0.11
(1,241)	1:A:10:DT:H2"	1:A:10:DT:H2'	8	0.11
(1,241)	1:A:10:DT:H2"	1:A:10:DT:H2'	10	0.11

Continued on next page...

Continued from previous page...

Key	Atom-1	Atom-2	Model ID	Violation (Å)
(1,239)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H2"	4	0.11
(1,238)	1:A:10:DT:H6	1:A:10:DT:H5"	1	0.11
(1,230)	1:A:10:DT:H1'	1:A:10:DT:H2'	2	0.11
(1,217)	1:A:21:DA:H2"	1:A:21:DA:H2'	1	0.11
(1,217)	1:A:21:DA:H2"	1:A:21:DA:H2'	7	0.11
(1,191)	1:A:6:DG:H1'	1:A:6:DG:H2'	10	0.11
(1,186)	1:A:6:DG:H1'	1:A:6:DG:H2"	9	0.11
(1,18)	1:A:27:DG:H8	1:A:28:DG:H8	2	0.11
(1,153)	1:A:11:DG:H2"	1:A:11:DG:H1'	1	0.11
(1,126)	1:A:4:DG:H1	1:A:30:DA:H2'	8	0.11
(1,119)	1:A:5:DC:H3'	1:A:5:DC:H2"	5	0.11
(1,114)	1:A:5:DC:H6	1:A:5:DC:H4'	9	0.11

10 Dihedral-angle violation analysis (i)

No dihedral-angle restraints found