



# Full wwPDB NMR Structure Validation Report ⓘ

Mar 28, 2026 – 06:14 PM UTC

PDB ID : 6VVJ / pdb\_00006vvj  
BMRB ID : 30724  
Title : Cap1G-TPUA  
Authors : Summers, M.F.; Brown, J.D.  
Deposited on : 2020-02-18

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

We welcome your comments at [validation@mail.wwpdb.org](mailto: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 ⓘ 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 ⓘ](#)) were used in the production of this report:

MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0  
Mogul : 2022.3.0, CSD as543be (2022)  
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)  
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) : 2.49

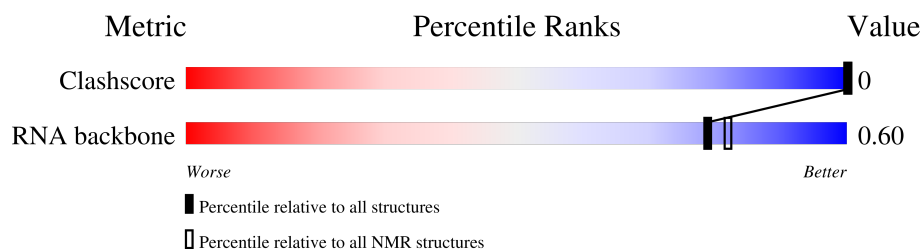
# 1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

*SOLUTION NMR*

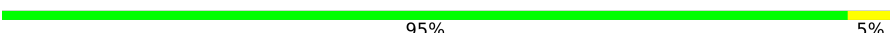
The overall completeness of chemical shifts assignment is 24%.

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<br>(#Entries) | NMR archive<br>(#Entries) |
|--------------|-----------------------------|---------------------------|
| Clashscore   | 229148                      | 14424                     |
| RNA backbone | 8273                        | 777                       |

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  $\geq 3$ , 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  $\leq 5\%$

| Mol | Chain | Length | Quality of chain                                                                            |
|-----|-------|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1   | A     | 130    |  95% 5% |

## 2 Ensemble composition and analysis ⓘ

This entry contains 20 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 is only 1 type of molecule in this entry. The entry contains 4179 atoms, of which 1405 are hydrogens and 0 are deuteriums.

- Molecule 1 is a RNA chain called RNA (130-MER).

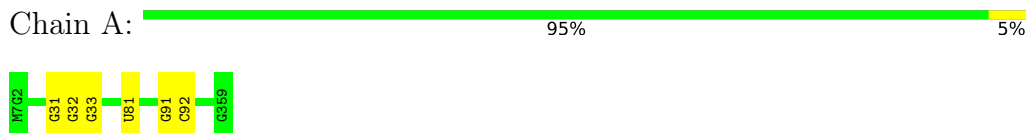
| Mol | Chain | Residues | Atoms |      |      |     |     |     | Trace |
|-----|-------|----------|-------|------|------|-----|-----|-----|-------|
| 1   | A     | 130      | Total | C    | H    | N   | O   | P   | 0     |
|     |       |          | 4179  | 1236 | 1405 | 490 | 917 | 131 |       |

## 4 Residue-property plots

### 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: RNA (130-MER)

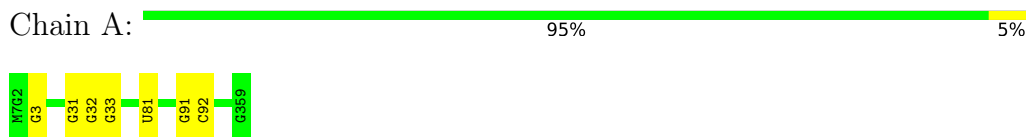


### 4.2 Scores per residue for each member of the ensemble

Colouring as in section 4.1 above.

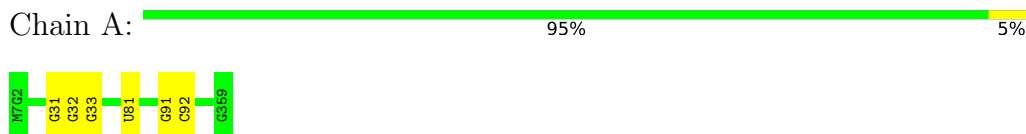
#### 4.2.1 Score per residue for model 1

- Molecule 1: RNA (130-MER)



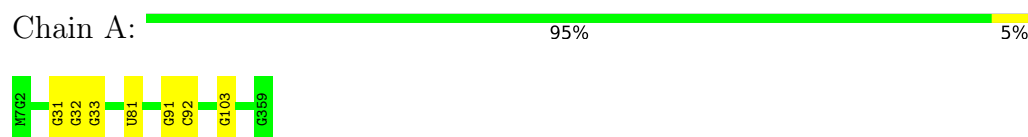
#### 4.2.2 Score per residue for model 2

- Molecule 1: RNA (130-MER)



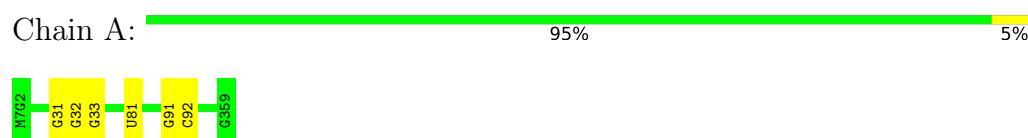
### 4.2.3 Score per residue for model 3

- Molecule 1: RNA (130-MER)



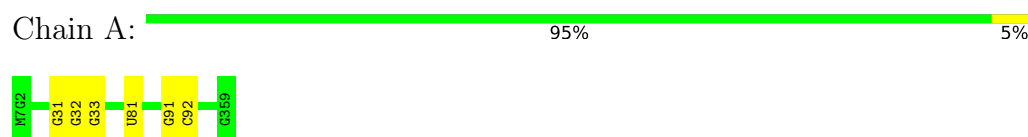
### 4.2.4 Score per residue for model 4

- Molecule 1: RNA (130-MER)



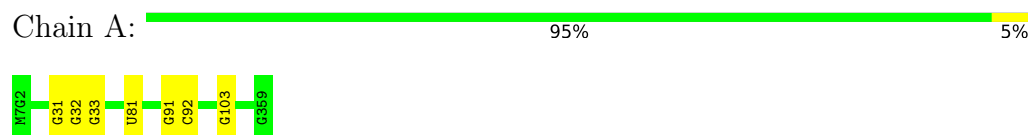
### 4.2.5 Score per residue for model 5

- Molecule 1: RNA (130-MER)



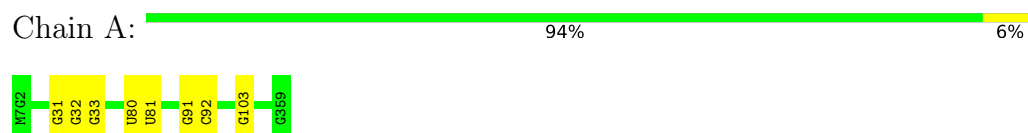
### 4.2.6 Score per residue for model 6

- Molecule 1: RNA (130-MER)



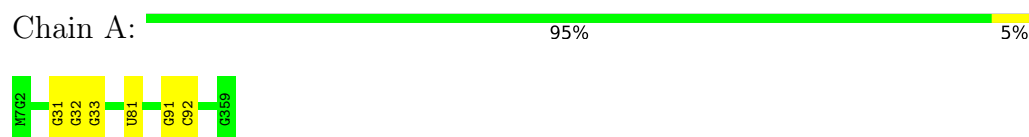
### 4.2.7 Score per residue for model 7

- Molecule 1: RNA (130-MER)



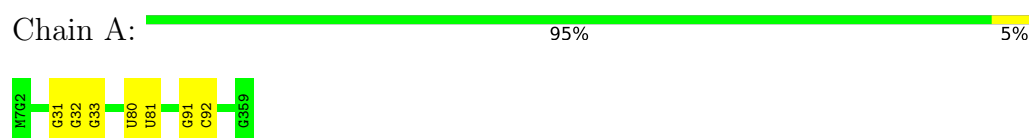
#### 4.2.8 Score per residue for model 8

- Molecule 1: RNA (130-MER)



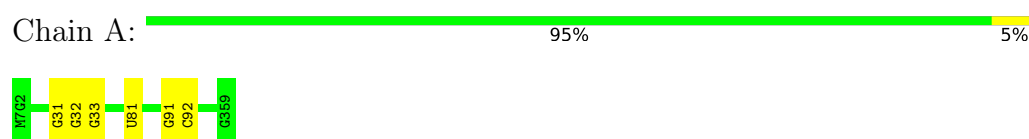
#### 4.2.9 Score per residue for model 9

- Molecule 1: RNA (130-MER)



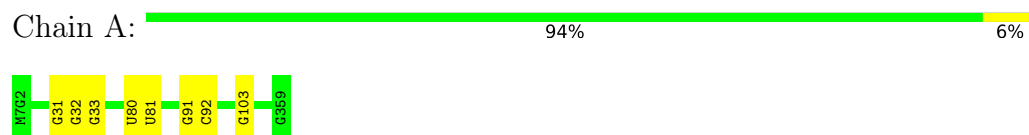
#### 4.2.10 Score per residue for model 10

- Molecule 1: RNA (130-MER)



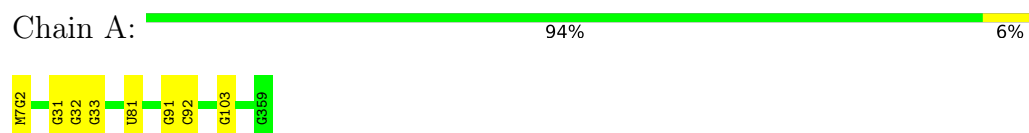
#### 4.2.11 Score per residue for model 11

- Molecule 1: RNA (130-MER)



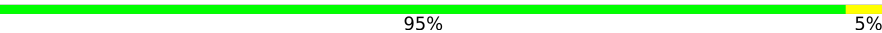
#### 4.2.12 Score per residue for model 12

- Molecule 1: RNA (130-MER)



#### 4.2.13 Score per residue for model 13

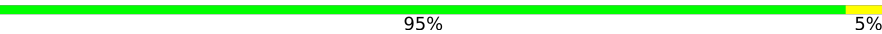
- Molecule 1: RNA (130-MER)

Chain A:  95% 5%



#### 4.2.14 Score per residue for model 14

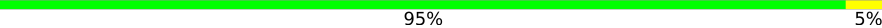
- Molecule 1: RNA (130-MER)

Chain A:  95% 5%



#### 4.2.15 Score per residue for model 15

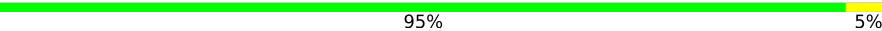
- Molecule 1: RNA (130-MER)

Chain A:  95% 5%



#### 4.2.16 Score per residue for model 16

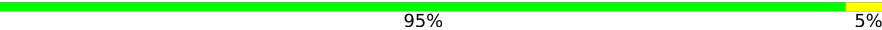
- Molecule 1: RNA (130-MER)

Chain A:  95% 5%



#### 4.2.17 Score per residue for model 17

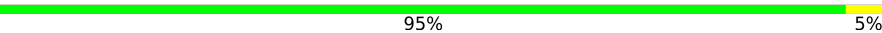
- Molecule 1: RNA (130-MER)

Chain A:  95% 5%



#### 4.2.18 Score per residue for model 18

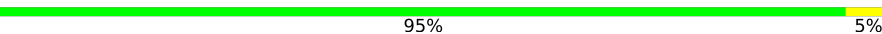
- Molecule 1: RNA (130-MER)

Chain A:  95% 5%



#### 4.2.19 Score per residue for model 19

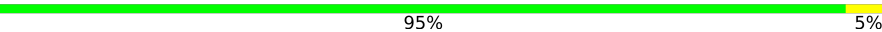
- Molecule 1: RNA (130-MER)

Chain A:  95% 5%



#### 4.2.20 Score per residue for model 20

- Molecule 1: RNA (130-MER)

Chain A:  95% 5%



## 5 Refinement protocol and experimental data overview

The models were refined using the following method: *simulated annealing*.

Of the 20 calculated structures, 20 were deposited, based on the following criterion: *target function*.

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

| Software name | Classification        | Version |
|---------------|-----------------------|---------|
| CYANA         | geometry optimization |         |
| CYANA         | structure calculation |         |
| Amber         | structure calculation |         |
| Amber         | refinement            |         |
| CYANA         | refinement            |         |

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                       | 613            |
| Number of shifts mapped to atoms             | 613            |
| Number of unparsed shifts                    | 0              |
| Number of shifts with mapping errors         | 0              |
| Number of shifts with mapping warnings       | 0              |
| Assignment completeness (well-defined parts) | 24%            |

## 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: M7G

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     | 0.82±0.00    | 0±0/3066 ( 0.0± 0.0%) | 0.94±0.00   | 0±0/4776 ( 0.0± 0.0%) |
| All | All   | 0.82         | 0/61320 ( 0.0%)       | 0.94        | 3/95520 ( 0.0%)       |

There are no bond-length outliers.

All unique angle outliers are listed below.

| Mol | Chain | Res | Type | Atoms       | Z     | Observed(°) | Ideal(°) | Models |       |
|-----|-------|-----|------|-------------|-------|-------------|----------|--------|-------|
|     |       |     |      |             |       |             |          | Worst  | Total |
| 1   | A     | 103 | G    | C2'-C3'-O3' | -5.18 | 105.93      | 113.70   | 12     | 3     |

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

### 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     | 2774  | 1405     | 1406     | 0±0     |
| All | All   | 55480 | 28100    | 28120    | 1       |

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 0.

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

| Atom-1        | Atom-2        | Clash(Å) | Distance(Å) | Models |       |
|---------------|---------------|----------|-------------|--------|-------|
|               |               |          |             | Worst  | Total |
| 1:A:2:M7G:H81 | 1:A:2:M7G:O1A | 0.52     | 2.05        | 12     | 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](#)

| Mol | Chain | Analysed        | Backbone Outliers | Pucker Outliers | Suiteness |
|-----|-------|-----------------|-------------------|-----------------|-----------|
| 1   | A     | 128/130 (98%)   | 6±0 (5±0%)        | 1±1 (0±1%)      | 0.62±0.00 |
| All | All   | 2561/2600 (98%) | 120 (5%)          | 12 (0%)         | 0.62      |

The overall RNA backbone suiteness is 0.60.

All unique RNA backbone outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 31  | G    | 20             |
| 1   | A     | 32  | G    | 20             |
| 1   | A     | 33  | G    | 20             |
| 1   | A     | 81  | U    | 20             |
| 1   | A     | 91  | G    | 20             |
| 1   | A     | 92  | C    | 20             |

All unique RNA pucker outliers are listed below:

| Mol | Chain | Res | Type | Models (Total) |
|-----|-------|-----|------|----------------|
| 1   | A     | 80  | U    | 4              |
| 1   | A     | 103 | G    | 3              |
| 1   | A     | 92  | C    | 2              |
| 1   | A     | 3   | G    | 1              |
| 1   | A     | 32  | G    | 1              |
| 1   | A     | 31  | G    | 1              |

## 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 oligosaccharides in this entry.

## 6.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

## 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 24% for the well-defined parts and 24% for the entire structure.

### 7.1 Chemical shift list 1

File name: working\_cs.cif

Chemical shift list name: *assigned\_chem\_shift\_list\_1*

#### 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                  | 613 |
| Number of shifts mapped to atoms        | 613 |
| Number of unparsed shifts               | 0   |
| Number of shifts with mapping errors    | 0   |
| Number of shifts with mapping warnings  | 0   |
| Number of shift outliers (ShiftChecker) | 0   |

#### 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 24%, i.e. 578 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2428. 0 out of 0 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|         | Total          | <sup>1</sup> H | <sup>13</sup> C | <sup>15</sup> N |
|---------|----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Sugar   | 387/1419 (27%) | 387/774 (50%)  | 0/645 (0%)      | 0/0 (—%)        |
| Base    | 191/1009 (19%) | 191/622 (31%)  | 0/221 (0%)      | 0/166 (0%)      |
| Overall | 578/2428 (24%) | 578/1396 (41%) | 0/866 (0%)      | 0/166 (0%)      |

The following table shows the completeness of the chemical shift assignments for the full structure. The overall completeness is 24%, i.e. 578 atoms were assigned a chemical shift out of a possible 2428. 0 out of 0 assigned methyl groups (LEU and VAL) were assigned stereospecifically.

|         | Total          | <sup>1</sup> H | <sup>13</sup> C | <sup>15</sup> N |
|---------|----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| Sugar   | 387/1419 (27%) | 387/774 (50%)  | 0/645 (0%)      | 0/0 (—%)        |
| Base    | 191/1009 (19%) | 191/622 (31%)  | 0/221 (0%)      | 0/166 (0%)      |
| Overall | 578/2428 (24%) | 578/1396 (41%) | 0/866 (0%)      | 0/166 (0%)      |

#### 7.1.4 Statistically unusual chemical shifts ⓘ

There are no statistically unusual chemical shifts.

#### 7.1.5 Random Coil Index (RCI) plots ⓘ

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

### 8.1 Conformationally restricting restraints

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                                | 2499  |
| Intra-residue ( $ i-j =0$ )                              | 1421  |
| Sequential ( $ i-j =1$ )                                 | 778   |
| Medium range ( $ i-j >1$ and $ i-j <5$ )                 | 0     |
| Long range ( $ i-j \geq 5$ )                             | 33    |
| Inter-chain                                              | 0     |
| Hydrogen bond restraints                                 | 267   |
| Disulfide bond restraints                                | 0     |
| Total dihedral-angle restraints                          | 2286  |
| Number of unmapped restraints                            | 0     |
| Number of restraints per residue                         | 36.8  |
| Number of long range restraints per residue <sup>1</sup> | 2.2   |

<sup>1</sup>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

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

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)  | 11.4                                   | 0.18    |
| 0.2-0.5 (Medium) | None                                   | None    |
| >0.5 (Large)     | 3.0                                    | 6.37    |

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

Dihedral-angle violations less than 1° are not included in the calculation.

| Bins (°)           | Average number of violations per model | Max (°) |
|--------------------|----------------------------------------|---------|
| 1.0-10.0 (Small)   | 147.1                                  | 4.7     |
| 10.0-20.0 (Medium) | None                                   | None    |
| >20.0 (Large)      | 4.0                                    | 179.99  |

## 9 Distance violation analysis ⓘ

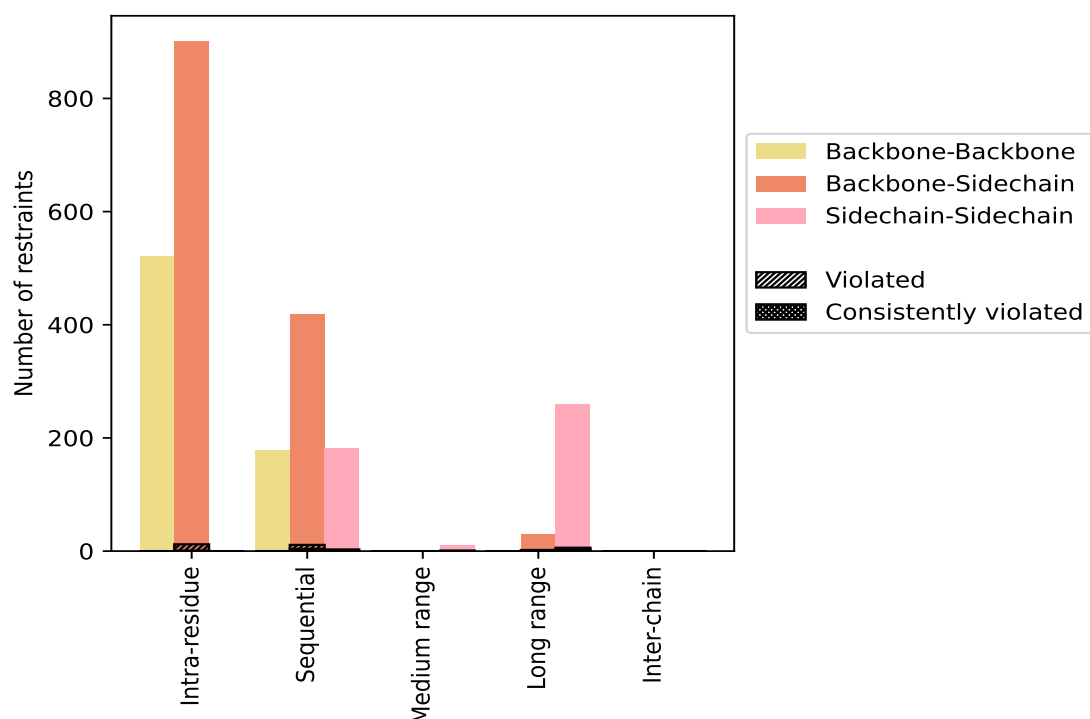
### 9.1 Summary of distance violations ⓘ

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.

| Restrains type                                             | Count                | % <sup>1</sup>        | Violated <sup>3</sup> |                     |                     | Consistently Violated <sup>4</sup> |                     |                     |
|------------------------------------------------------------|----------------------|-----------------------|-----------------------|---------------------|---------------------|------------------------------------|---------------------|---------------------|
|                                                            |                      |                       | Count                 | % <sup>2</sup>      | % <sup>1</sup>      | Count                              | % <sup>2</sup>      | % <sup>1</sup>      |
| <a href="#">Intra-residue ( i-j =0)</a>                    | <a href="#">1421</a> | <a href="#">56.9</a>  | <a href="#">12</a>    | <a href="#">0.8</a> | <a href="#">0.5</a> | <a href="#">1</a>                  | <a href="#">0.1</a> | <a href="#">0.0</a> |
| Backbone-Backbone                                          | 520                  | 20.8                  | 0                     | 0.0                 | 0.0                 | 0                                  | 0.0                 | 0.0                 |
| Backbone-Sidechain                                         | 901                  | 36.1                  | 12                    | 1.3                 | 0.5                 | 1                                  | 0.1                 | 0.0                 |
| Sidechain-Sidechain                                        | 0                    | 0.0                   | 0                     | 0.0                 | 0.0                 | 0                                  | 0.0                 | 0.0                 |
| <a href="#">Sequential ( i-j =1)</a>                       | <a href="#">778</a>  | <a href="#">31.1</a>  | <a href="#">14</a>    | <a href="#">1.8</a> | <a href="#">0.6</a> | <a href="#">4</a>                  | <a href="#">0.5</a> | <a href="#">0.2</a> |
| Backbone-Backbone                                          | 178                  | 7.1                   | 0                     | 0.0                 | 0.0                 | 0                                  | 0.0                 | 0.0                 |
| Backbone-Sidechain                                         | 418                  | 16.7                  | 11                    | 2.6                 | 0.4                 | 4                                  | 1.0                 | 0.2                 |
| Sidechain-Sidechain                                        | 182                  | 7.3                   | 3                     | 1.6                 | 0.1                 | 0                                  | 0.0                 | 0.0                 |
| <a href="#">Medium range ( i-j &gt;1 &amp;  i-j &lt;5)</a> | <a href="#">0</a>    | <a href="#">0.0</a>   | <a href="#">0</a>     | <a href="#">0.0</a> | <a href="#">0.0</a> | <a href="#">0</a>                  | <a href="#">0.0</a> | <a href="#">0.0</a> |
| 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                 |
| <a href="#">Long range ( i-j ≥5)</a>                       | <a href="#">33</a>   | <a href="#">1.3</a>   | <a href="#">2</a>     | <a href="#">6.1</a> | <a href="#">0.1</a> | <a href="#">0</a>                  | <a href="#">0.0</a> | <a href="#">0.0</a> |
| Backbone-Backbone                                          | 1                    | 0.0                   | 0                     | 0.0                 | 0.0                 | 0                                  | 0.0                 | 0.0                 |
| Backbone-Sidechain                                         | 29                   | 1.2                   | 1                     | 3.4                 | 0.0                 | 0                                  | 0.0                 | 0.0                 |
| Sidechain-Sidechain                                        | 3                    | 0.1                   | 1                     | 33.3                | 0.0                 | 0                                  | 0.0                 | 0.0                 |
| <a href="#">Inter-chain</a>                                | <a href="#">0</a>    | <a href="#">0.0</a>   | <a href="#">0</a>     | <a href="#">0.0</a> | <a href="#">0.0</a> | <a href="#">0</a>                  | <a href="#">0.0</a> | <a href="#">0.0</a> |
| 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                 |
| <a href="#">Hydrogen bond</a>                              | <a href="#">267</a>  | <a href="#">10.7</a>  | <a href="#">7</a>     | <a href="#">2.6</a> | <a href="#">0.3</a> | <a href="#">4</a>                  | <a href="#">1.5</a> | <a href="#">0.2</a> |
| <a href="#">Disulfide bond</a>                             | <a href="#">0</a>    | <a href="#">0.0</a>   | <a href="#">0</a>     | <a href="#">0.0</a> | <a href="#">0.0</a> | <a href="#">0</a>                  | <a href="#">0.0</a> | <a href="#">0.0</a> |
| <a href="#">Total</a>                                      | <a href="#">2499</a> | <a href="#">100.0</a> | <a href="#">35</a>    | <a href="#">1.4</a> | <a href="#">1.4</a> | <a href="#">9</a>                  | <a href="#">0.4</a> | <a href="#">0.4</a> |
| Backbone-Backbone                                          | 699                  | 28.0                  | 0                     | 0.0                 | 0.0                 | 0                                  | 0.0                 | 0.0                 |
| Backbone-Sidechain                                         | 1349                 | 54.0                  | 25                    | 1.9                 | 1.0                 | 6                                  | 0.4                 | 0.2                 |
| Sidechain-Sidechain                                        | 451                  | 18.0                  | 10                    | 2.2                 | 0.4                 | 3                                  | 0.7                 | 0.1                 |

<sup>1</sup> percentage calculated with respect to the total number of distance restraints, <sup>2</sup> percentage calculated with respect to the number of restraints in a particular restraint category, <sup>3</sup> violated in at least one model, <sup>4</sup> 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 <sup>6</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
|          | IR <sup>1</sup>      | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> | Total |          |         |                     |            |
| 1        | 3                    | 7               | 0               | 6               | 0               | 16    | 0.89     | 6.37    | 1.85                | 0.12       |
| 2        | 1                    | 8               | 0               | 6               | 0               | 15    | 0.96     | 6.29    | 1.92                | 0.13       |
| 3        | 3                    | 6               | 0               | 6               | 0               | 15    | 0.95     | 6.25    | 1.91                | 0.13       |
| 4        | 3                    | 9               | 0               | 6               | 0               | 18    | 0.82     | 6.25    | 1.77                | 0.13       |
| 5        | 3                    | 7               | 0               | 6               | 0               | 16    | 0.9      | 6.31    | 1.87                | 0.12       |
| 6        | 4                    | 9               | 0               | 5               | 0               | 18    | 0.81     | 6.3     | 1.76                | 0.13       |
| 7        | 3                    | 6               | 0               | 5               | 0               | 14    | 1.0      | 6.25    | 1.96                | 0.12       |
| 8        | 3                    | 9               | 1               | 6               | 0               | 19    | 0.77     | 6.31    | 1.73                | 0.12       |
| 9        | 3                    | 7               | 0               | 5               | 0               | 15    | 0.95     | 6.27    | 1.91                | 0.13       |
| 10       | 2                    | 7               | 0               | 6               | 0               | 15    | 0.95     | 6.29    | 1.9                 | 0.13       |

*Continued on next page...*

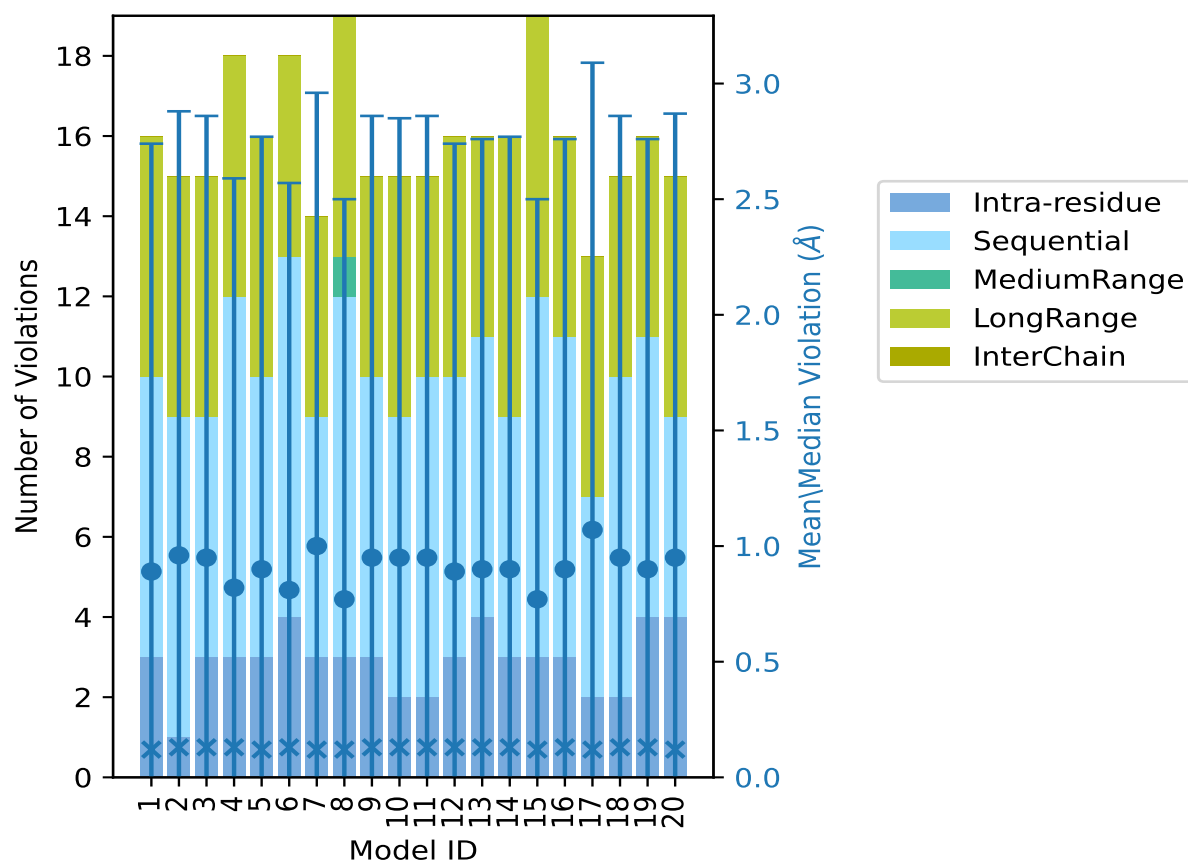
Continued from previous page...

| Model ID | Number of violations |                 |                 |                 |                 |       | Mean (Å) | Max (Å) | SD <sup>6</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|----------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|----------|---------|---------------------|------------|
|          | IR <sup>1</sup>      | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> | Total |          |         |                     |            |
| 11       | 2                    | 8               | 0               | 5               | 0               | 15    | 0.95     | 6.27    | 1.91                | 0.13       |
| 12       | 3                    | 7               | 0               | 6               | 0               | 16    | 0.89     | 6.25    | 1.85                | 0.13       |
| 13       | 4                    | 7               | 0               | 5               | 0               | 16    | 0.9      | 6.3     | 1.86                | 0.13       |
| 14       | 3                    | 6               | 0               | 7               | 0               | 16    | 0.9      | 6.36    | 1.87                | 0.13       |
| 15       | 3                    | 9               | 0               | 7               | 0               | 19    | 0.77     | 6.31    | 1.73                | 0.12       |
| 16       | 3                    | 8               | 0               | 5               | 0               | 16    | 0.9      | 6.25    | 1.86                | 0.13       |
| 17       | 2                    | 5               | 0               | 6               | 0               | 13    | 1.07     | 6.27    | 2.02                | 0.12       |
| 18       | 2                    | 8               | 0               | 5               | 0               | 15    | 0.95     | 6.26    | 1.91                | 0.13       |
| 19       | 4                    | 7               | 0               | 5               | 0               | 16    | 0.9      | 6.27    | 1.86                | 0.13       |
| 20       | 4                    | 5               | 0               | 6               | 0               | 15    | 0.95     | 6.32    | 1.92                | 0.12       |

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints,

<sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup>Standard deviation

### 9.2.1 Bar graph : Distance Violation statistics for each model ⓘ



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

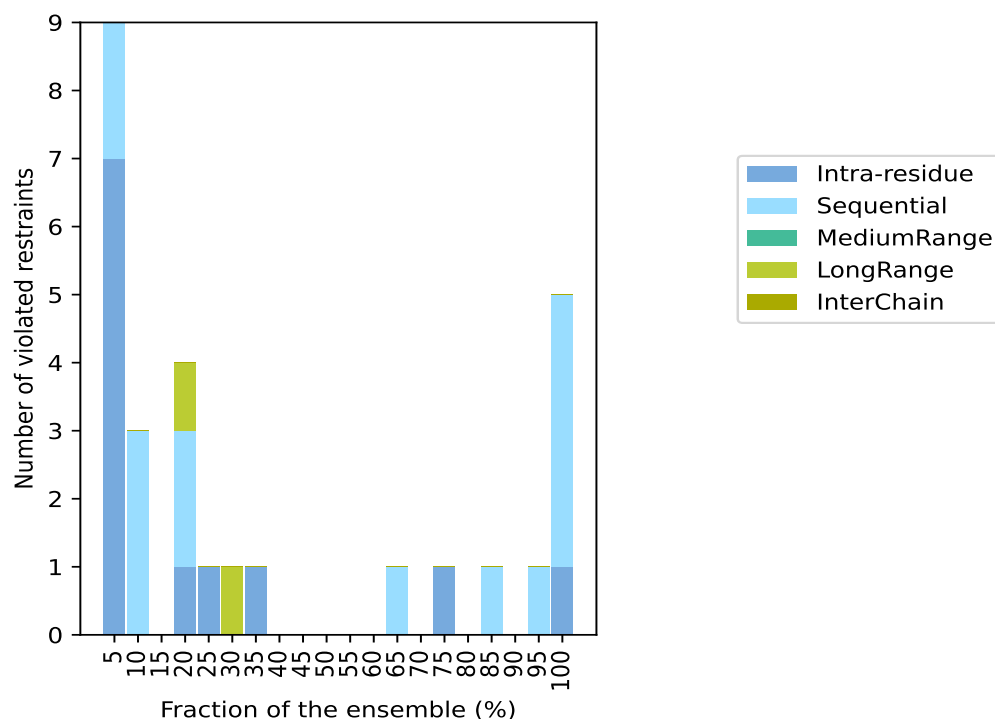
Violation analysis may find that some restraints are violated in few models and some are violated in most of models. The following table provides this information as number of violated restraints for a given fraction of the ensemble. In total, 2204(IR:1409, SQ:764, MR:0, LR:31, IC:0) restraints are not violated in the ensemble.

| Number of violated restraints |                 |                 |                 |                 |       | Fraction of the ensemble |       |
|-------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------|--------------------------|-------|
| IR <sup>1</sup>               | SQ <sup>2</sup> | MR <sup>3</sup> | LR <sup>4</sup> | IC <sup>5</sup> | Total | Count <sup>6</sup>       | %     |
| 7                             | 2               | 0               | 0               | 0               | 9     | 1                        | 5.0   |
| 0                             | 3               | 0               | 0               | 0               | 3     | 2                        | 10.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 3                        | 15.0  |
| 1                             | 2               | 0               | 1               | 0               | 4     | 4                        | 20.0  |
| 1                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 1     | 5                        | 25.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 1               | 0               | 1     | 6                        | 30.0  |
| 1                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 1     | 7                        | 35.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 8                        | 40.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 9                        | 45.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 10                       | 50.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 11                       | 55.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 12                       | 60.0  |
| 0                             | 1               | 0               | 0               | 0               | 1     | 13                       | 65.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 14                       | 70.0  |
| 1                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 1     | 15                       | 75.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 16                       | 80.0  |
| 0                             | 1               | 0               | 0               | 0               | 1     | 17                       | 85.0  |
| 0                             | 0               | 0               | 0               | 0               | 0     | 18                       | 90.0  |
| 0                             | 1               | 0               | 0               | 0               | 1     | 19                       | 95.0  |
| 1                             | 4               | 0               | 0               | 0               | 5     | 20                       | 100.0 |

<sup>1</sup>Intra-residue restraints, <sup>2</sup>Sequential restraints, <sup>3</sup>Medium range restraints, <sup>4</sup>Long range restraints,

<sup>5</sup>Inter-chain restraints, <sup>6</sup> Number of models with violations

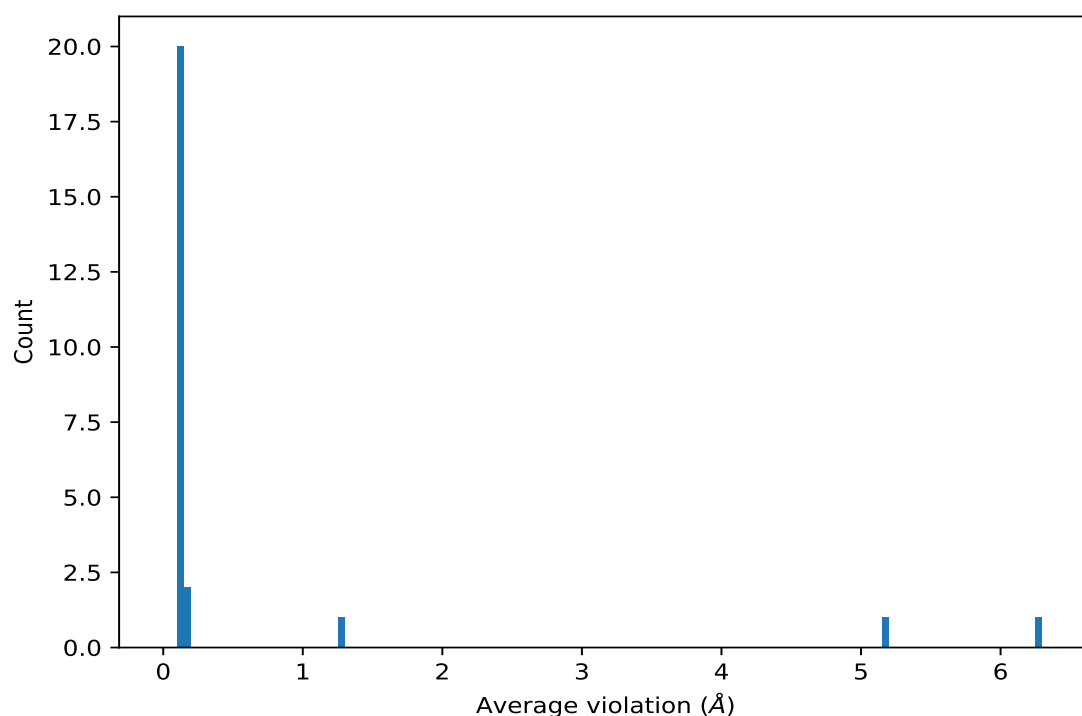
### 9.3.1 Bar graph : Distance violation statistics for the ensemble [i](#)



## 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 <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|----------|---------------|---------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 20                  | 6.29     | 0.03                | 6.28       |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 20                  | 5.19     | 0.05                | 5.19       |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P     | 1:2:A:M7G:O3' | 20                  | 1.26     | 0.02                | 1.26       |
| (2,13)   | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 20                  | 0.13     | 0.01                | 0.14       |
| (1,913)  | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 20                  | 0.13     | 0.01                | 0.13       |
| (1,754)  | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 20                  | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (2,19)   | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 20                  | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (1,384)  | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 20                  | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (1,42)   | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6    | 20                  | 0.12     | 0.01                | 0.11       |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6    | 1:5:A:C:H6    | 19                  | 0.15     | 0.01                | 0.16       |
| (2,161)  | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 18                  | 0.11     | 0.01                | 0.11       |
| (1,182)  | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 17                  | 0.13     | 0.01                | 0.13       |
| (1,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 15                  | 0.13     | 0.01                | 0.12       |
| (1,260)  | 1:33:A:G:H3'  | 1:34:A:A:H8   | 13                  | 0.14     | 0.01                | 0.14       |
| (1,379)  | 1:51:A:G:H8   | 1:51:A:G:H2'  | 7                   | 0.11     | 0.01                | 0.1        |
| (1,271)  | 1:34:A:A:H2   | 1:29:A:C:H1'  | 6                   | 0.13     | 0.02                | 0.12       |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

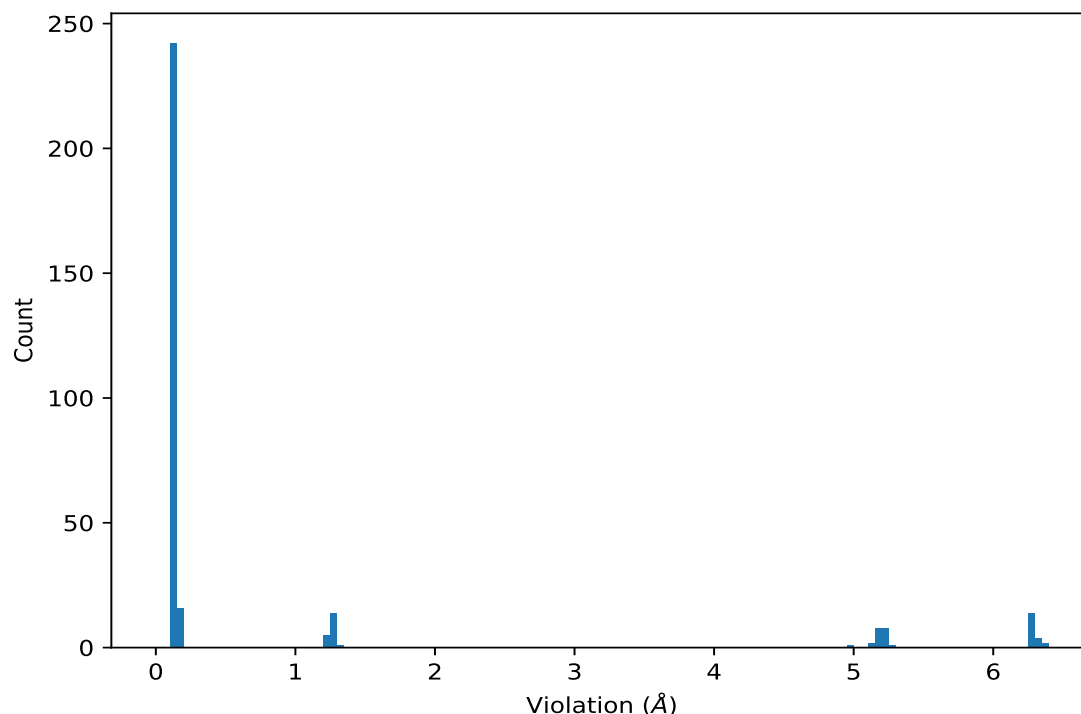
| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Models <sup>1</sup> | Mean (Å) | SD <sup>1</sup> (Å) | Median (Å) |
|---------|---------------|---------------|---------------------|----------|---------------------|------------|
| (2,113) | 1:29:A:C:N3   | 1:34:A:A:H61  | 6                   | 0.1      | 0.0                 | 0.1        |
| (1,2)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H3' | 5                   | 0.13     | 0.0                 | 0.13       |
| (1,12)  | 1:3:A:G:H3'   | 1:4:A:U:H6    | 4                   | 0.12     | 0.02                | 0.11       |
| (1,929) | 1:2:A:M7G:H81 | 1:103:A:G:H8  | 4                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (1,10)  | 1:3:A:G:H8    | 1:4:A:U:H6    | 4                   | 0.1      | 0.0                 | 0.1        |
| (1,601) | 1:78:A:G:H8   | 1:78:A:G:H2'  | 4                   | 0.1      | 0.0                 | 0.1        |
| (1,614) | 1:82:A:G:H3'  | 1:83:A:C:H6   | 2                   | 0.18     | 0.0                 | 0.18       |
| (1,561) | 1:73:A:A:H3'  | 1:74:A:U:H6   | 2                   | 0.12     | 0.01                | 0.12       |
| (1,925) | 1:358:A:C:H3' | 1:359:A:G:H8  | 2                   | 0.1      | 0.0                 | 0.1        |

<sup>1</sup>Number of violated models, <sup>2</sup>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) |
|----------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 1        | 6.37          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 14       | 6.36          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 20       | 6.32          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 5        | 6.31          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 8        | 6.31          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 15       | 6.31          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 6        | 6.3           |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 13       | 6.3           |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 2        | 6.29          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 10       | 6.29          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 9        | 6.27          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 11       | 6.27          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 17       | 6.27          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 19       | 6.27          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 18       | 6.26          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 3        | 6.25          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 4        | 6.25          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 7        | 6.25          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 12       | 6.25          |
| (2,1)    | 1:2:A:M7G:H81 | 1:56:A:C:N3   | 16       | 6.25          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 2        | 5.28          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 5        | 5.23          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 4        | 5.22          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 16       | 5.22          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 19       | 5.22          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 3        | 5.21          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 11       | 5.21          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 18       | 5.21          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 7        | 5.2           |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 8        | 5.19          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 9        | 5.19          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 15       | 5.19          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 20       | 5.19          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 13       | 5.18          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 17       | 5.18          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 12       | 5.17          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 14       | 5.17          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 6        | 5.14          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 10       | 5.13          |
| (2,3)    | 1:2:A:M7G:H2' | 1:56:A:C:O2   | 1        | 4.99          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P     | 1:2:A:M7G:O3' | 1        | 1.34          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1       | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|----------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 2        | 1.29          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 9        | 1.28          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 3        | 1.27          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 4        | 1.27          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 7        | 1.27          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 12       | 1.27          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 18       | 1.27          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 19       | 1.27          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 6        | 1.26          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 10       | 1.26          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 11       | 1.26          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 16       | 1.26          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 17       | 1.26          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 5        | 1.25          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 8        | 1.24          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 13       | 1.24          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 14       | 1.24          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 15       | 1.24          |
| (1,2104) | 1:3:A:G:P    | 1:2:A:M7G:O3' | 20       | 1.24          |
| (1,614)  | 1:82:A:G:H3' | 1:83:A:C:H6   | 4        | 0.18          |
| (1,614)  | 1:82:A:G:H3' | 1:83:A:C:H6   | 6        | 0.18          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 14       | 0.17          |
| (1,260)  | 1:33:A:G:H3' | 1:34:A:A:H8   | 2        | 0.16          |
| (1,182)  | 1:22:A:G:H8  | 1:23:A:U:H6   | 16       | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 1        | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 2        | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 4        | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 5        | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 10       | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 11       | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 12       | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 13       | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 15       | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 18       | 0.16          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 20       | 0.16          |
| (1,271)  | 1:34:A:A:H2  | 1:29:A:C:H1'  | 4        | 0.15          |
| (1,271)  | 1:34:A:A:H2  | 1:29:A:C:H1'  | 5        | 0.15          |
| (1,260)  | 1:33:A:G:H3' | 1:34:A:A:H8   | 15       | 0.15          |
| (1,260)  | 1:33:A:G:H3' | 1:34:A:A:H8   | 16       | 0.15          |
| (1,260)  | 1:33:A:G:H3' | 1:34:A:A:H8   | 18       | 0.15          |
| (1,260)  | 1:33:A:G:H3' | 1:34:A:A:H8   | 19       | 0.15          |
| (1,18)   | 1:4:A:U:H6   | 1:5:A:C:H6    | 6        | 0.15          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,18)  | 1:4:A:U:H6    | 1:5:A:C:H6    | 8        | 0.15          |
| (1,18)  | 1:4:A:U:H6    | 1:5:A:C:H6    | 9        | 0.15          |
| (1,18)  | 1:4:A:U:H6    | 1:5:A:C:H6    | 16       | 0.15          |
| (1,18)  | 1:4:A:U:H6    | 1:5:A:C:H6    | 19       | 0.15          |
| (1,12)  | 1:3:A:G:H3'   | 1:4:A:U:H6    | 14       | 0.15          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 1        | 0.14          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 2        | 0.14          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 5        | 0.14          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 10       | 0.14          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 11       | 0.14          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 12       | 0.14          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 13       | 0.14          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 15       | 0.14          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 18       | 0.14          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 20       | 0.14          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 8        | 0.14          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 20       | 0.14          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 14       | 0.14          |
| (1,260) | 1:33:A:G:H3'  | 1:34:A:A:H8   | 8        | 0.14          |
| (1,260) | 1:33:A:G:H3'  | 1:34:A:A:H8   | 13       | 0.14          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 3        | 0.14          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6    | 3        | 0.14          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6    | 4        | 0.14          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6    | 6        | 0.14          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6    | 9        | 0.14          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6    | 14       | 0.14          |
| (1,18)  | 1:4:A:U:H6    | 1:5:A:C:H6    | 3        | 0.14          |
| (1,9)   | 1:3:A:G:H8    | 1:3:A:G:H3'   | 1        | 0.14          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 6        | 0.14          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 10       | 0.14          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 11       | 0.14          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 16       | 0.14          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 17       | 0.14          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 3        | 0.13          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 4        | 0.13          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 6        | 0.13          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 9        | 0.13          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 14       | 0.13          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 3        | 0.13          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 4        | 0.13          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 6        | 0.13          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 8        | 0.13          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 9        | 0.13          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 14       | 0.13          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 16       | 0.13          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 19       | 0.13          |
| (1,929) | 1:2:A:M7G:H81 | 1:103:A:G:H8  | 14       | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 2        | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 3        | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 6        | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 7        | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 9        | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 11       | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 12       | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 13       | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 14       | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 15       | 0.13          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 19       | 0.13          |
| (1,858) | 1:120:A:G:H8  | 1:120:A:G:H2' | 5        | 0.13          |
| (1,856) | 1:119:A:A:H8  | 1:119:A:A:H2' | 12       | 0.13          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 2        | 0.13          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 3        | 0.13          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 6        | 0.13          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 9        | 0.13          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 12       | 0.13          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 13       | 0.13          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 18       | 0.13          |
| (1,734) | 1:103:A:G:H8  | 1:103:A:G:H3' | 16       | 0.13          |
| (1,666) | 1:91:A:G:H8   | 1:91:A:G:H2'  | 4        | 0.13          |
| (1,561) | 1:73:A:A:H3'  | 1:74:A:U:H6   | 6        | 0.13          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 10       | 0.13          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 13       | 0.13          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 16       | 0.13          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 19       | 0.13          |
| (1,260) | 1:33:A:G:H3'  | 1:34:A:A:H8   | 4        | 0.13          |
| (1,260) | 1:33:A:G:H3'  | 1:34:A:A:H8   | 9        | 0.13          |
| (1,260) | 1:33:A:G:H3'  | 1:34:A:A:H8   | 12       | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 2        | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 5        | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 6        | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 7        | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 8        | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 9        | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 10       | 0.13          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 11       | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 12       | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 13       | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 15       | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 18       | 0.13          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 19       | 0.13          |
| (1,2)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H3' | 8        | 0.13          |
| (1,2)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H3' | 15       | 0.13          |
| (1,2)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H3' | 20       | 0.13          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 7        | 0.13          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 9        | 0.13          |
| (2,204) | 1:77:A:A:N1   | 1:81:A:U:H3   | 8        | 0.12          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 1        | 0.12          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 2        | 0.12          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 13       | 0.12          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 15       | 0.12          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 17       | 0.12          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 19       | 0.12          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 20       | 0.12          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 1        | 0.12          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 2        | 0.12          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 5        | 0.12          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 8        | 0.12          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 10       | 0.12          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 13       | 0.12          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 17       | 0.12          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 18       | 0.12          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 19       | 0.12          |
| (1,929) | 1:2:A:M7G:H81 | 1:103:A:G:H8  | 8        | 0.12          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 4        | 0.12          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 5        | 0.12          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 16       | 0.12          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 17       | 0.12          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8  | 18       | 0.12          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 4        | 0.12          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 7        | 0.12          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 8        | 0.12          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 10       | 0.12          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 16       | 0.12          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 17       | 0.12          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 19       | 0.12          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 20       | 0.12          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (1,561) | 1:73:A:A:H3'  | 1:74:A:U:H6   | 4        | 0.12          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 1        | 0.12          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 2        | 0.12          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 4        | 0.12          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 5        | 0.12          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 6        | 0.12          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 8        | 0.12          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 9        | 0.12          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 15       | 0.12          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 18       | 0.12          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 20       | 0.12          |
| (1,379) | 1:51:A:G:H8   | 1:51:A:G:H2'  | 20       | 0.12          |
| (1,271) | 1:34:A:A:H2   | 1:29:A:C:H1'  | 1        | 0.12          |
| (1,271) | 1:34:A:A:H2   | 1:29:A:C:H1'  | 10       | 0.12          |
| (1,271) | 1:34:A:A:H2   | 1:29:A:C:H1'  | 17       | 0.12          |
| (1,260) | 1:33:A:G:H3'  | 1:34:A:A:H8   | 5        | 0.12          |
| (1,260) | 1:33:A:G:H3'  | 1:34:A:A:H8   | 11       | 0.12          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6    | 16       | 0.12          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6    | 20       | 0.12          |
| (1,2)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H3' | 13       | 0.12          |
| (1,2)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H3' | 14       | 0.12          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 1        | 0.12          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 3        | 0.12          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 4        | 0.12          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 5        | 0.12          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 12       | 0.12          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 18       | 0.12          |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 19       | 0.12          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 3        | 0.11          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 5        | 0.11          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 6        | 0.11          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 7        | 0.11          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 8        | 0.11          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 9        | 0.11          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 10       | 0.11          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 11       | 0.11          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 12       | 0.11          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2   | 14       | 0.11          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 7        | 0.11          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 11       | 0.11          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 12       | 0.11          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61  | 15       | 0.11          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2       | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|--------------|----------|---------------|
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61 | 16       | 0.11          |
| (2,19)  | 1:6:A:U:O4    | 1:53:A:A:H61 | 20       | 0.11          |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1  | 17       | 0.11          |
| (1,929) | 1:2:A:M7G:H81 | 1:103:A:G:H8 | 15       | 0.11          |
| (1,929) | 1:2:A:M7G:H81 | 1:103:A:G:H8 | 20       | 0.11          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8 | 1        | 0.11          |
| (1,913) | 1:356:A:U:H3' | 1:357:A:G:H8 | 10       | 0.11          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8 | 1        | 0.11          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8 | 11       | 0.11          |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8 | 15       | 0.11          |
| (1,601) | 1:78:A:G:H8   | 1:78:A:G:H2' | 3        | 0.11          |
| (1,506) | 1:67:A:G:H3'  | 1:68:A:C:H6  | 8        | 0.11          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2' | 7        | 0.11          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2' | 12       | 0.11          |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2' | 14       | 0.11          |
| (1,379) | 1:51:A:G:H8   | 1:51:A:G:H2' | 8        | 0.11          |
| (1,379) | 1:51:A:G:H8   | 1:51:A:G:H2' | 15       | 0.11          |
| (1,271) | 1:34:A:A:H2   | 1:29:A:C:H1' | 3        | 0.11          |
| (1,260) | 1:33:A:G:H3'  | 1:34:A:A:H8  | 6        | 0.11          |
| (1,250) | 1:30:A:C:H6   | 1:30:A:C:H2' | 20       | 0.11          |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6  | 1        | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 1        | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 2        | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 5        | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 8        | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 10       | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 11       | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 12       | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 13       | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 15       | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 18       | 0.11          |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6   | 19       | 0.11          |
| (1,18)  | 1:4:A:U:H6    | 1:5:A:C:H6   | 7        | 0.11          |
| (1,12)  | 1:3:A:G:H3'   | 1:4:A:U:H6   | 1        | 0.11          |
| (1,12)  | 1:3:A:G:H3'   | 1:4:A:U:H6   | 15       | 0.11          |
| (1,10)  | 1:3:A:G:H8    | 1:4:A:U:H6   | 10       | 0.11          |
| (1,8)   | 1:3:A:G:H8    | 1:3:A:G:H2'  | 7        | 0.11          |
| (2,161) | 1:65:A:A:N1   | 1:95:A:C:O2  | 4        | 0.1           |
| (2,113) | 1:29:A:C:N3   | 1:34:A:A:H61 | 2        | 0.1           |
| (2,113) | 1:29:A:C:N3   | 1:34:A:A:H61 | 12       | 0.1           |
| (2,113) | 1:29:A:C:N3   | 1:34:A:A:H61 | 14       | 0.1           |
| (2,113) | 1:29:A:C:N3   | 1:34:A:A:H61 | 15       | 0.1           |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key     | Atom-1        | Atom-2        | Model ID | Violation (Å) |
|---------|---------------|---------------|----------|---------------|
| (2,113) | 1:29:A:C:N3   | 1:34:A:A:H61  | 16       | 0.1           |
| (2,113) | 1:29:A:C:N3   | 1:34:A:A:H61  | 18       | 0.1           |
| (2,13)  | 1:4:A:U:H3    | 1:54:A:A:N1   | 7        | 0.1           |
| (1,925) | 1:358:A:C:H3' | 1:359:A:G:H8  | 11       | 0.1           |
| (1,925) | 1:358:A:C:H3' | 1:359:A:G:H8  | 17       | 0.1           |
| (1,754) | 1:106:A:U:H3' | 1:107:A:G:H8  | 5        | 0.1           |
| (1,601) | 1:78:A:G:H8   | 1:78:A:G:H2'  | 6        | 0.1           |
| (1,601) | 1:78:A:G:H8   | 1:78:A:G:H2'  | 14       | 0.1           |
| (1,601) | 1:78:A:G:H8   | 1:78:A:G:H2'  | 19       | 0.1           |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 3        | 0.1           |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 11       | 0.1           |
| (1,384) | 1:52:A:G:H8   | 1:52:A:G:H2'  | 17       | 0.1           |
| (1,379) | 1:51:A:G:H8   | 1:51:A:G:H2'  | 6        | 0.1           |
| (1,379) | 1:51:A:G:H8   | 1:51:A:G:H2'  | 9        | 0.1           |
| (1,379) | 1:51:A:G:H8   | 1:51:A:G:H2'  | 13       | 0.1           |
| (1,379) | 1:51:A:G:H8   | 1:51:A:G:H2'  | 19       | 0.1           |
| (1,182) | 1:22:A:G:H8   | 1:23:A:U:H6   | 4        | 0.1           |
| (1,177) | 1:21:A:G:H3'  | 1:22:A:G:H8   | 16       | 0.1           |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6    | 7        | 0.1           |
| (1,42)  | 1:6:A:U:H3'   | 1:7:A:C:H6    | 17       | 0.1           |
| (1,12)  | 1:3:A:G:H3'   | 1:4:A:U:H6    | 8        | 0.1           |
| (1,10)  | 1:3:A:G:H8    | 1:4:A:U:H6    | 2        | 0.1           |
| (1,10)  | 1:3:A:G:H8    | 1:4:A:U:H6    | 15       | 0.1           |
| (1,10)  | 1:3:A:G:H8    | 1:4:A:U:H6    | 18       | 0.1           |
| (1,1)   | 1:2:A:M7G:H81 | 1:2:A:M7G:H2' | 13       | 0.1           |

## 10 Dihedral-angle violation analysis ⓘ

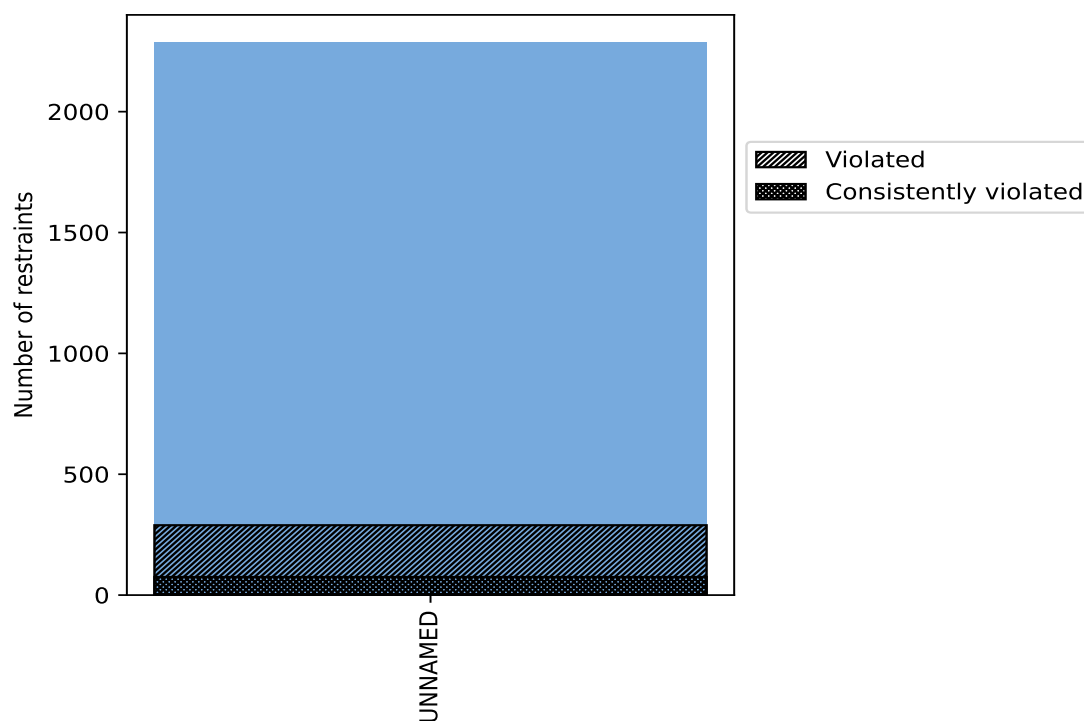
### 10.1 Summary of dihedral-angle violations ⓘ

The following table provides the summary of dihedral-angle violations in different dihedral-angle types. Violations less than 1° are not included in the calculation.

| Angle type | Count | % <sup>1</sup> | Violated <sup>3</sup> |                |                | Consistently Violated <sup>4</sup> |                |                |
|------------|-------|----------------|-----------------------|----------------|----------------|------------------------------------|----------------|----------------|
|            |       |                | Count                 | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> | Count                              | % <sup>2</sup> | % <sup>1</sup> |
| UNNAMED    | 2286  | 100.0          | 289                   | 12.6           | 12.6           | 75                                 | 3.3            | 3.3            |
| Total      | 2286  | 100.0          | 289                   | 12.6           | 12.6           | 75                                 | 3.3            | 3.3            |

<sup>1</sup> percentage calculated with respect to total number of dihedral-angle restraints, <sup>2</sup> percentage calculated with respect to number of restraints in a particular dihedral-angle type, <sup>3</sup> violated in at least one model, <sup>4</sup> violated in all the models

#### 10.1.1 Bar chart : Distribution of dihedral-angles and violations ⓘ



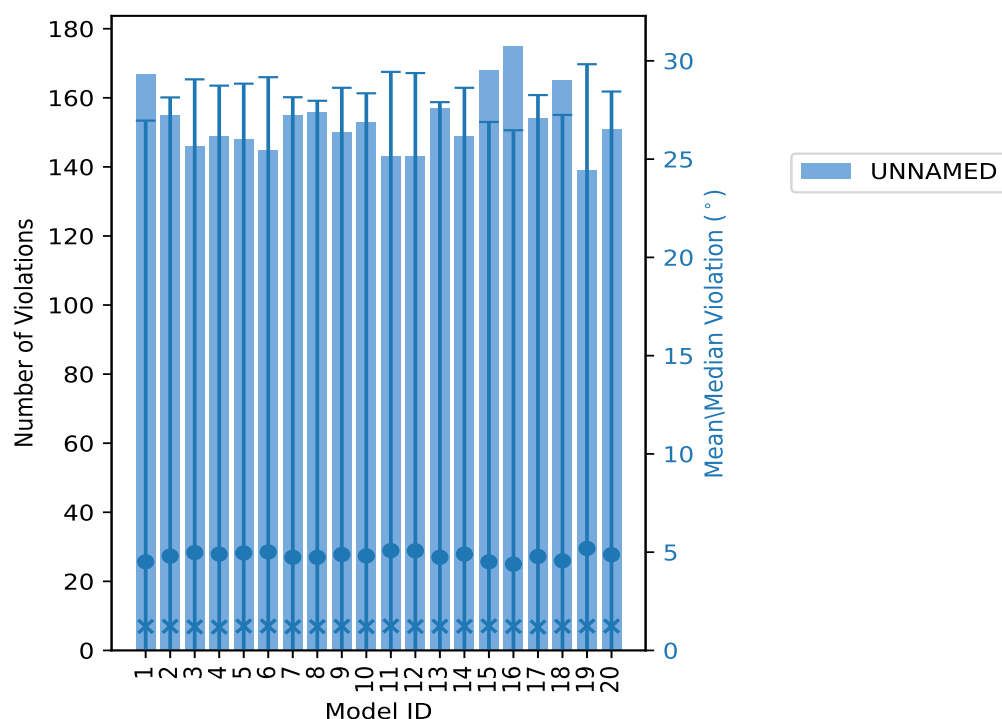
Violated and consistently violated restraints are shown using different hatch patterns in their respective categories

## 10.2 Dihedral-angle violation statistics for each model

The following table provides the dihedral-angle violation statistics for each model in the ensemble. Violations less than 1° are not included in the statistics.

| Model ID | Number of violations |       | Mean (°) | Max (°) | SD (°) | Median (°) |
|----------|----------------------|-------|----------|---------|--------|------------|
|          | UNNAMED              | Total |          |         |        |            |
| 1        | 167                  | 167   | 4.51     | 179.03  | 22.45  | 1.22       |
| 2        | 155                  | 155   | 4.8      | 179.52  | 23.34  | 1.23       |
| 3        | 146                  | 146   | 4.98     | 179.72  | 24.08  | 1.2        |
| 4        | 149                  | 149   | 4.9      | 179.65  | 23.84  | 1.19       |
| 5        | 148                  | 148   | 4.96     | 179.5   | 23.88  | 1.24       |
| 6        | 145                  | 145   | 5.01     | 179.75  | 24.16  | 1.24       |
| 7        | 155                  | 155   | 4.74     | 179.8   | 23.41  | 1.2        |
| 8        | 156                  | 156   | 4.74     | 179.25  | 23.23  | 1.21       |
| 9        | 150                  | 150   | 4.88     | 179.59  | 23.75  | 1.23       |
| 10       | 153                  | 153   | 4.81     | 179.7   | 23.54  | 1.21       |
| 11       | 143                  | 143   | 5.08     | 179.99  | 24.36  | 1.25       |
| 12       | 143                  | 143   | 5.07     | 179.55  | 24.31  | 1.22       |
| 13       | 157                  | 157   | 4.74     | 179.28  | 23.16  | 1.23       |
| 14       | 149                  | 149   | 4.9      | 179.23  | 23.73  | 1.23       |
| 15       | 168                  | 168   | 4.51     | 179.22  | 22.38  | 1.25       |
| 16       | 175                  | 175   | 4.39     | 179.97  | 22.08  | 1.22       |
| 17       | 154                  | 154   | 4.78     | 179.8   | 23.48  | 1.19       |
| 18       | 165                  | 165   | 4.56     | 179.66  | 22.69  | 1.23       |
| 19       | 139                  | 139   | 5.19     | 179.73  | 24.64  | 1.24       |
| 20       | 151                  | 151   | 4.87     | 179.21  | 23.57  | 1.24       |

### 10.2.1 Bar graph : Dihedral 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

### 10.3 Dihedral-angle violation statistics for the ensemble [i](#)

Violation analysis may find that some restraints are violated in very 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 ensemble.

| Number of violated restraints |       | Fraction of the ensemble |      |
|-------------------------------|-------|--------------------------|------|
| UNNAMED                       | Total | Count <sup>1</sup>       | %    |
| 34                            | 34    | 1                        | 5.0  |
| 31                            | 31    | 2                        | 10.0 |
| 14                            | 14    | 3                        | 15.0 |
| 13                            | 13    | 4                        | 20.0 |
| 20                            | 20    | 5                        | 25.0 |
| 9                             | 9     | 6                        | 30.0 |
| 11                            | 11    | 7                        | 35.0 |
| 10                            | 10    | 8                        | 40.0 |
| 6                             | 6     | 9                        | 45.0 |
| 5                             | 5     | 10                       | 50.0 |
| 7                             | 7     | 11                       | 55.0 |

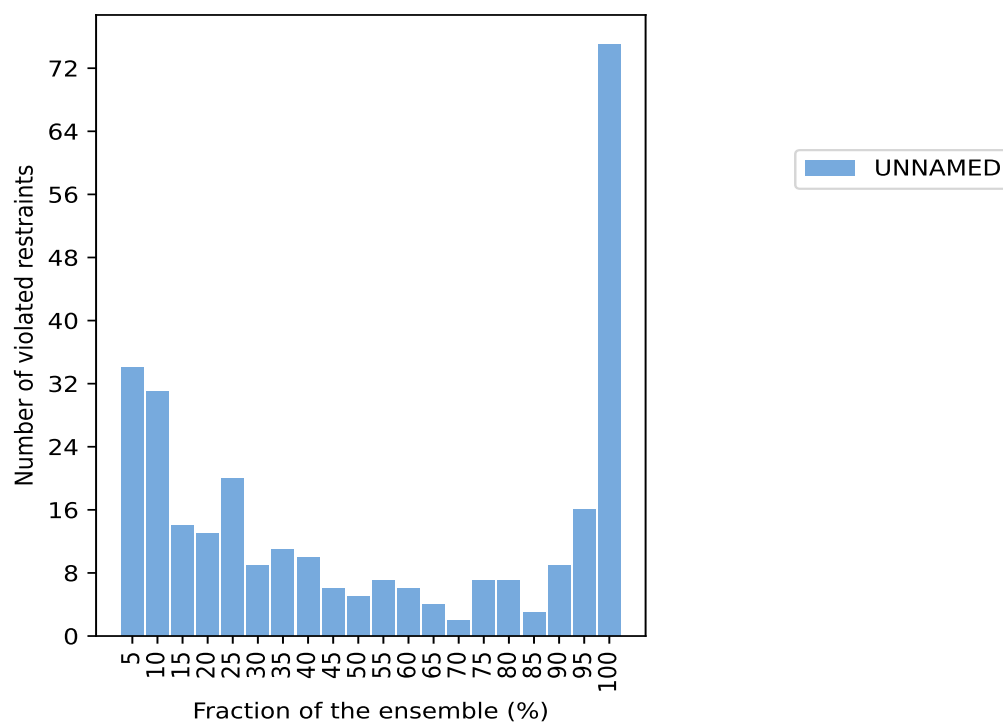
*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Number of violated restraints |       | Fraction of the ensemble |       |
|-------------------------------|-------|--------------------------|-------|
| UNNAMED                       | Total | Count <sup>1</sup>       | %     |
| 6                             | 6     | 12                       | 60.0  |
| 4                             | 4     | 13                       | 65.0  |
| 2                             | 2     | 14                       | 70.0  |
| 7                             | 7     | 15                       | 75.0  |
| 7                             | 7     | 16                       | 80.0  |
| 3                             | 3     | 17                       | 85.0  |
| 9                             | 9     | 18                       | 90.0  |
| 16                            | 16    | 19                       | 95.0  |
| 75                            | 75    | 20                       | 100.0 |

<sup>1</sup> Number of models with violations

### 10.3.1 Bar graph : Dihedral-angle Violation statistics for the ensemble [i](#)

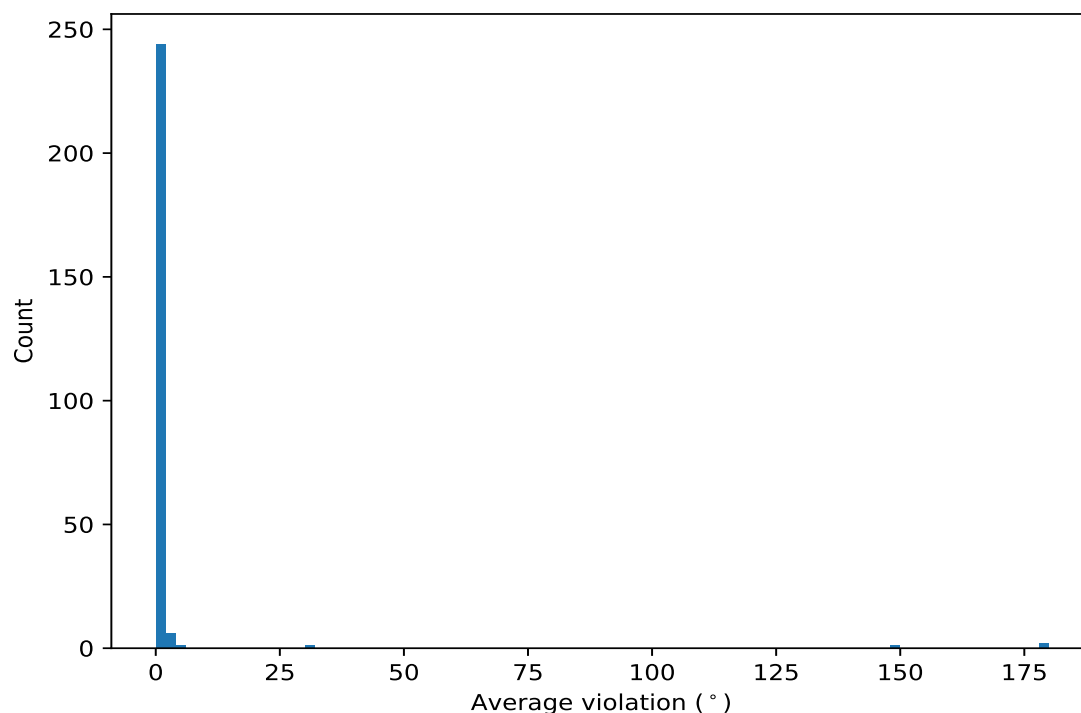


## 10.4 Most violated dihedral-angle restraints in the ensemble [i](#)

### 10.4.1 Histogram : Distribution of mean dihedral-angle 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



#### 10.4.2 Table: Most violated dihedral-angle 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.

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean   | SD <sup>2</sup> | Median |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|---------------------|--------|-----------------|--------|
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 20                  | 179.56 | 0.26            | 179.62 |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3  | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 20                  | 179.14 | 0.52            | 179.3  |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3  | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 20                  | 149.95 | 0.47            | 149.95 |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1  | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 20                  | 31.26  | 0.52            | 31.34  |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 20                  | 4.52   | 0.16            | 4.55   |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41   | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 20                  | 2.76   | 0.17            | 2.8    |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8   | 20                  | 2.45   | 0.12            | 2.47   |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8    | 20                  | 2.04   | 0.15            | 2.08   |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8   | 20                  | 1.97   | 0.11            | 2.0    |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61  | 20                  | 1.85   | 0.05            | 1.86   |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3  | 20                  | 1.83   | 0.3             | 1.84   |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61  | 20                  | 1.76   | 0.17            | 1.78   |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 20                  | 1.75   | 0.06            | 1.76   |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 20                  | 1.68   | 0.11            | 1.68   |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 20                  | 1.67   | 0.05            | 1.66   |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 20                  | 1.67   | 0.11            | 1.65   |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 20                  | 1.64   | 0.09            | 1.65   |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61  | 20                  | 1.64   | 0.13            | 1.61   |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 20                  | 1.6    | 0.62            | 1.36   |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21   | 20                  | 1.6    | 0.08            | 1.61   |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean | SD <sup>2</sup> | Median |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3    | 20                  | 1.6  | 0.15            | 1.62   |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 20                  | 1.56 | 0.1             | 1.58   |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 20                  | 1.55 | 0.09            | 1.54   |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8   | 20                  | 1.54 | 0.12            | 1.54   |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6   | 20                  | 1.53 | 0.09            | 1.54   |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 20                  | 1.53 | 0.07            | 1.52   |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 20                  | 1.52 | 0.09            | 1.54   |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 20                  | 1.49 | 0.06            | 1.48   |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 20                  | 1.49 | 0.08            | 1.48   |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 20                  | 1.48 | 0.19            | 1.46   |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 20                  | 1.48 | 0.08            | 1.5    |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 20                  | 1.46 | 0.11            | 1.48   |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 20                  | 1.46 | 0.07            | 1.46   |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 20                  | 1.44 | 0.27            | 1.44   |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 20                  | 1.44 | 0.1             | 1.45   |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 20                  | 1.4  | 0.12            | 1.39   |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 20                  | 1.4  | 0.09            | 1.42   |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 20                  | 1.37 | 0.08            | 1.38   |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5  | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 20                  | 1.37 | 0.06            | 1.37   |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 20                  | 1.36 | 0.06            | 1.34   |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 20                  | 1.35 | 0.09            | 1.34   |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 20                  | 1.34 | 0.09            | 1.34   |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1'  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 20                  | 1.34 | 0.09            | 1.35   |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 20                  | 1.32 | 0.09            | 1.32   |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 20                  | 1.32 | 0.08            | 1.33   |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 20                  | 1.3  | 0.13            | 1.27   |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 20                  | 1.3  | 0.07            | 1.31   |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 20                  | 1.3  | 0.12            | 1.28   |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 20                  | 1.29 | 0.1             | 1.32   |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 20                  | 1.29 | 0.14            | 1.27   |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 20                  | 1.29 | 0.13            | 1.27   |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 20                  | 1.28 | 0.07            | 1.28   |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 20                  | 1.28 | 0.08            | 1.26   |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 20                  | 1.27 | 0.12            | 1.27   |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 20                  | 1.24 | 0.07            | 1.26   |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 20                  | 1.24 | 0.07            | 1.23   |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 20                  | 1.24 | 0.09            | 1.25   |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 20                  | 1.23 | 0.04            | 1.24   |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 20                  | 1.23 | 0.08            | 1.23   |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 20                  | 1.23 | 0.04            | 1.24   |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 20                  | 1.23 | 0.09            | 1.22   |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 20                  | 1.23 | 0.1             | 1.25   |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 20                  | 1.22 | 0.05            | 1.22   |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 20                  | 1.22 | 0.06            | 1.2    |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 20                  | 1.21 | 0.09            | 1.23   |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 20                  | 1.2  | 0.08            | 1.19   |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 20                  | 1.2  | 0.08            | 1.19   |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 20                  | 1.2  | 0.09            | 1.18   |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 20                  | 1.19 | 0.07            | 1.21   |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 20                  | 1.18 | 0.1             | 1.17   |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 20                  | 1.18 | 0.1             | 1.15   |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean | SD <sup>2</sup> | Median |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 20                  | 1.17 | 0.17            | 1.11   |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 20                  | 1.14 | 0.07            | 1.12   |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 20                  | 1.14 | 0.06            | 1.13   |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 20                  | 1.07 | 0.04            | 1.06   |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 19                  | 1.76 | 0.46            | 1.72   |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 19                  | 1.25 | 0.08            | 1.26   |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 19                  | 1.25 | 0.1             | 1.26   |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 19                  | 1.18 | 0.07            | 1.19   |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 19                  | 1.17 | 0.08            | 1.16   |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 19                  | 1.15 | 0.08            | 1.17   |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 19                  | 1.15 | 0.08            | 1.15   |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 19                  | 1.15 | 0.05            | 1.15   |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 19                  | 1.15 | 0.05            | 1.15   |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 19                  | 1.14 | 0.05            | 1.14   |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 19                  | 1.13 | 0.05            | 1.12   |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 19                  | 1.12 | 0.05            | 1.13   |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 19                  | 1.1  | 0.05            | 1.11   |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 19                  | 1.1  | 0.07            | 1.09   |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5   | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 19                  | 1.1  | 0.09            | 1.06   |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 19                  | 1.09 | 0.05            | 1.09   |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5   | 18                  | 2.19 | 0.08            | 2.19   |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 18                  | 1.5  | 0.05            | 1.5    |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 18                  | 1.44 | 0.32            | 1.4    |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6   | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 18                  | 1.37 | 0.05            | 1.39   |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 18                  | 1.31 | 0.16            | 1.31   |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 18                  | 1.22 | 0.07            | 1.23   |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 18                  | 1.16 | 0.04            | 1.15   |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 18                  | 1.12 | 0.04            | 1.12   |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41  | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 18                  | 1.07 | 0.06            | 1.06   |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 17                  | 1.41 | 0.14            | 1.4    |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 17                  | 1.32 | 0.24            | 1.25   |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 17                  | 1.13 | 0.06            | 1.12   |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 16                  | 1.33 | 0.3             | 1.25   |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 16                  | 1.25 | 0.12            | 1.25   |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 16                  | 1.22 | 0.1             | 1.2    |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 16                  | 1.2  | 0.08            | 1.18   |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 16                  | 1.07 | 0.05            | 1.06   |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 16                  | 1.07 | 0.05            | 1.05   |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 16                  | 1.07 | 0.05            | 1.06   |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 15                  | 1.56 | 0.41            | 1.5    |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 15                  | 1.35 | 0.56            | 1.11   |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 15                  | 1.24 | 0.13            | 1.22   |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 15                  | 1.09 | 0.04            | 1.09   |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 15                  | 1.08 | 0.04            | 1.08   |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 15                  | 1.07 | 0.04            | 1.06   |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41  | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 15                  | 1.07 | 0.04            | 1.06   |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 14                  | 1.1  | 0.07            | 1.08   |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 14                  | 1.09 | 0.09            | 1.06   |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8  | 13                  | 1.12 | 0.13            | 1.09   |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6   | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 13                  | 1.09 | 0.08            | 1.05   |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3   | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 13                  | 1.07 | 0.08            | 1.04   |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Models <sup>1</sup> | Mean | SD <sup>2</sup> | Median |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41  | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 13                  | 1.06 | 0.05            | 1.06   |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 12                  | 1.35 | 0.08            | 1.35   |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5   | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8   | 12                  | 1.16 | 0.12            | 1.15   |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8   | 12                  | 1.16 | 0.12            | 1.14   |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 12                  | 1.11 | 0.06            | 1.12   |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 12                  | 1.09 | 0.05            | 1.08   |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 12                  | 1.08 | 0.06            | 1.08   |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3   | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1'  | 11                  | 1.14 | 0.07            | 1.16   |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6   | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 11                  | 1.11 | 0.05            | 1.11   |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 11                  | 1.1  | 0.04            | 1.11   |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8  | 11                  | 1.1  | 0.06            | 1.1    |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 11                  | 1.07 | 0.05            | 1.05   |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5   | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 11                  | 1.05 | 0.03            | 1.05   |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4  | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8  | 11                  | 1.04 | 0.04            | 1.01   |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21  | 10                  | 1.09 | 0.04            | 1.08   |
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8   | 10                  | 1.07 | 0.04            | 1.06   |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8   | 10                  | 1.05 | 0.03            | 1.04   |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3   | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 10                  | 1.05 | 0.03            | 1.04   |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3  | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 10                  | 1.04 | 0.01            | 1.04   |
| (1,970)  | 1:33:A:G:N3   | 1:33:A:G:C2  | 1:33:A:G:N2  | 1:33:A:G:H21  | 9                   | 1.37 | 0.25            | 1.31   |
| (1,1130) | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C6  | 1:67:A:G:N1  | 1:67:A:G:H1   | 9                   | 1.11 | 0.06            | 1.12   |
| (1,1041) | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2   | 9                   | 1.09 | 0.07            | 1.09   |
| (1,347)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:C5   | 9                   | 1.07 | 0.04            | 1.08   |
| (1,1152) | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N1  | 1:12:A:G:H1   | 9                   | 1.06 | 0.03            | 1.06   |
| (1,154)  | 1:51:A:G:C4   | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8  | 1:51:A:G:H8   | 9                   | 1.05 | 0.05            | 1.03   |
| (1,131)  | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:H81 | 8                   | 1.41 | 0.22            | 1.42   |
| (1,1685) | 1:93:A:C:N3   | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C1'  | 8                   | 1.33 | 0.19            | 1.3    |
| (1,1867) | 1:69:A:C:C6   | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:O2   | 8                   | 1.29 | 0.14            | 1.29   |
| (1,982)  | 1:89:A:G:N3   | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2  | 1:89:A:G:H21  | 8                   | 1.2  | 0.16            | 1.23   |
| (1,2278) | 1:93:A:C:C2   | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:N4   | 8                   | 1.19 | 0.11            | 1.16   |
| (1,1751) | 1:94:A:U:C5   | 1:94:A:U:C6  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 8                   | 1.14 | 0.11            | 1.11   |
| (1,778)  | 1:355:A:G:C5  | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C8  | 8                   | 1.1  | 0.05            | 1.09   |
| (1,2089) | 1:8:A:U:C2    | 1:8:A:U:N3   | 1:8:A:U:C4   | 1:8:A:U:O4    | 8                   | 1.07 | 0.06            | 1.04   |
| (1,828)  | 1:101:A:G:N9  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2  | 8                   | 1.05 | 0.03            | 1.04   |
| (1,984)  | 1:98:A:G:N3   | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 1:98:A:G:H21  | 8                   | 1.03 | 0.02            | 1.04   |
| (1,1860) | 1:57:A:C:C6   | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:O2   | 7                   | 1.22 | 0.14            | 1.17   |
| (1,2260) | 1:30:A:C:C2   | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:N4   | 7                   | 1.16 | 0.13            | 1.09   |
| (1,374)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:C5  | 7                   | 1.08 | 0.1             | 1.06   |
| (1,419)  | 1:61:A:G:C1'  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3   | 7                   | 1.08 | 0.05            | 1.06   |
| (1,1074) | 1:2:A:M7G:C6  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 7                   | 1.07 | 0.07            | 1.05   |
| (1,151)  | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 1:47:A:G:H8   | 7                   | 1.06 | 0.03            | 1.07   |
| (1,1279) | 1:58:A:A:C4   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:C6  | 1:58:A:A:N6   | 7                   | 1.06 | 0.05            | 1.03   |
| (1,139)  | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8  | 1:22:A:G:H8   | 7                   | 1.05 | 0.04            | 1.04   |
| (1,1889) | 1:110:A:C:C6  | 1:110:A:C:N1 | 1:110:A:C:C2 | 1:110:A:C:O2  | 7                   | 1.04 | 0.04            | 1.02   |
| (1,1723) | 1:40:A:C:C5   | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 7                   | 1.03 | 0.02            | 1.03   |
| (1,368)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:C5   | 7                   | 1.02 | 0.01            | 1.01   |
| (1,983)  | 1:91:A:G:N3   | 1:91:A:G:C2  | 1:91:A:G:N2  | 1:91:A:G:H21  | 6                   | 1.72 | 0.39            | 1.86   |
| (1,179)  | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 1:103:A:G:H8  | 6                   | 1.23 | 0.14            | 1.15   |
| (1,1672) | 1:69:A:C:N3   | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C1'  | 6                   | 1.22 | 0.12            | 1.16   |
| (1,758)  | 1:91:A:G:C5   | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C8   | 6                   | 1.21 | 0.12            | 1.17   |
| (1,1327) | 1:34:A:A:C5   | 1:34:A:A:C6  | 1:34:A:A:N6  | 1:34:A:A:H61  | 6                   | 1.21 | 0.2             | 1.12   |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Models <sup>1</sup> | Mean | SD <sup>2</sup> | Median |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,1738) | 1:70:A:U:C5   | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1' | 6                   | 1.18 | 0.09            | 1.2    |
| (1,975)  | 1:51:A:G:N3   | 1:51:A:G:C2  | 1:51:A:G:N2  | 1:51:A:G:H21 | 6                   | 1.13 | 0.09            | 1.11   |
| (1,723)  | 1:21:A:G:C5   | 1:21:A:G:C4  | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8  | 6                   | 1.12 | 0.07            | 1.12   |
| (1,628)  | 1:91:A:G:C6   | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:N7  | 1:91:A:G:C8  | 6                   | 1.05 | 0.03            | 1.06   |
| (1,2201) | 1:68:A:C:H41  | 1:68:A:C:N4  | 1:68:A:C:C4  | 1:68:A:C:C5  | 5                   | 2.23 | 0.1             | 2.28   |
| (1,907)  | 1:91:A:G:C4   | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:O6  | 5                   | 1.41 | 0.1             | 1.46   |
| (1,757)  | 1:89:A:G:C5   | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C8  | 5                   | 1.39 | 0.08            | 1.43   |
| (1,456)  | 1:2:A:M7G:N9  | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:N7 | 1:2:A:M7G:C5 | 5                   | 1.26 | 0.13            | 1.32   |
| (1,432)  | 1:89:A:G:C1'  | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N3  | 5                   | 1.24 | 0.07            | 1.24   |
| (1,2190) | 1:30:A:C:H41  | 1:30:A:C:N4  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:C5  | 5                   | 1.22 | 0.2             | 1.11   |
| (1,433)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N3  | 5                   | 1.19 | 0.06            | 1.2    |
| (1,1729) | 1:56:A:C:C5   | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1' | 5                   | 1.15 | 0.08            | 1.15   |
| (1,734)  | 1:43:A:G:C5   | 1:43:A:G:C4  | 1:43:A:G:N9  | 1:43:A:G:C8  | 5                   | 1.12 | 0.07            | 1.1    |
| (1,402)  | 1:27:A:G:C1'  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3  | 5                   | 1.11 | 0.06            | 1.14   |
| (1,1881) | 1:94:A:U:C6   | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:O2  | 5                   | 1.1  | 0.04            | 1.07   |
| (1,817)  | 1:77:A:A:N9   | 1:77:A:A:C4  | 1:77:A:A:N3  | 1:77:A:A:C2  | 5                   | 1.08 | 0.03            | 1.08   |
| (1,1136) | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C6  | 1:98:A:G:N1  | 1:98:A:G:H1  | 5                   | 1.07 | 0.03            | 1.06   |
| (1,804)  | 1:51:A:G:N9   | 1:51:A:G:C4  | 1:51:A:G:N3  | 1:51:A:G:C2  | 5                   | 1.07 | 0.04            | 1.07   |
| (1,436)  | 1:98:A:G:C1'  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N3  | 5                   | 1.06 | 0.05            | 1.05   |
| (1,453)  | 1:355:A:G:C1' | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3 | 5                   | 1.06 | 0.05            | 1.04   |
| (1,424)  | 1:73:A:A:C1'  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N3  | 5                   | 1.04 | 0.03            | 1.06   |
| (1,1651) | 1:28:A:C:N3   | 1:28:A:C:C2  | 1:28:A:C:N1  | 1:28:A:C:C1' | 5                   | 1.04 | 0.01            | 1.05   |
| (1,776)  | 1:353:A:G:C5  | 1:353:A:G:C4 | 1:353:A:G:N9 | 1:353:A:G:C8 | 5                   | 1.04 | 0.02            | 1.03   |
| (1,176)  | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8  | 1:98:A:G:H8  | 5                   | 1.03 | 0.02            | 1.02   |
| (1,2138) | 1:90:A:U:N1   | 1:90:A:U:C2  | 1:90:A:U:N3  | 1:90:A:U:H3  | 4                   | 1.15 | 0.06            | 1.17   |
| (1,1122) | 1:33:A:G:C5   | 1:33:A:G:C6  | 1:33:A:G:N1  | 1:33:A:G:H1  | 4                   | 1.12 | 0.06            | 1.12   |
| (1,2258) | 1:28:A:C:C2   | 1:28:A:C:N3  | 1:28:A:C:C4  | 1:28:A:C:N4  | 4                   | 1.08 | 0.07            | 1.07   |
| (1,1176) | 1:103:A:G:N3  | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:H1 | 4                   | 1.07 | 0.05            | 1.06   |
| (1,2279) | 1:95:A:C:C2   | 1:95:A:C:N3  | 1:95:A:C:C4  | 1:95:A:C:N4  | 4                   | 1.07 | 0.05            | 1.06   |
| (1,441)  | 1:107:A:G:C1' | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N3 | 4                   | 1.07 | 0.03            | 1.06   |
| (1,589)  | 1:15:A:A:C6   | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:N7  | 1:15:A:A:C8  | 4                   | 1.06 | 0.02            | 1.06   |
| (1,1650) | 1:24:A:C:N3   | 1:24:A:C:C2  | 1:24:A:C:N1  | 1:24:A:C:C1' | 4                   | 1.06 | 0.02            | 1.06   |
| (1,2135) | 1:81:A:U:N1   | 1:81:A:U:C2  | 1:81:A:U:N3  | 1:81:A:U:H3  | 4                   | 1.06 | 0.01            | 1.06   |
| (1,159)  | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8  | 1:61:A:G:H8  | 4                   | 1.04 | 0.02            | 1.04   |
| (1,454)  | 1:357:A:G:C1' | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N3 | 4                   | 1.04 | 0.04            | 1.02   |
| (1,314)  | 1:117:A:A:C1' | 1:117:A:A:N9 | 1:117:A:A:C8 | 1:117:A:A:N7 | 4                   | 1.03 | 0.01            | 1.02   |
| (1,394)  | 1:15:A:A:C1'  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N3  | 4                   | 1.02 | 0.01            | 1.02   |
| (1,979)  | 1:78:A:G:N3   | 1:78:A:G:C2  | 1:78:A:G:N2  | 1:78:A:G:H21 | 3                   | 1.37 | 0.26            | 1.56   |
| (1,1017) | 1:78:A:G:N1   | 1:78:A:G:C2  | 1:78:A:G:N2  | 1:78:A:G:H22 | 3                   | 1.31 | 0.17            | 1.39   |
| (1,818)  | 1:78:A:G:N9   | 1:78:A:G:C4  | 1:78:A:G:N3  | 1:78:A:G:C2  | 3                   | 1.2  | 0.1             | 1.25   |
| (1,1135) | 1:91:A:G:C5   | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:N1  | 1:91:A:G:H1  | 3                   | 1.17 | 0.21            | 1.02   |
| (1,138)  | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8  | 1:21:A:G:H8  | 3                   | 1.14 | 0.03            | 1.12   |
| (1,411)  | 1:47:A:G:C1'  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 3                   | 1.08 | 0.06            | 1.11   |
| (1,1854) | 1:41:A:U:C6   | 1:41:A:U:N1  | 1:41:A:U:C2  | 1:41:A:U:O2  | 3                   | 1.07 | 0.02            | 1.08   |
| (1,1673) | 1:70:A:U:N3   | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1' | 3                   | 1.07 | 0.05            | 1.1    |
| (1,971)  | 1:35:A:G:N3   | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2  | 1:35:A:G:H21 | 3                   | 1.06 | 0.04            | 1.06   |
| (1,142)  | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8  | 1:27:A:G:H8  | 3                   | 1.06 | 0.02            | 1.06   |
| (1,1671) | 1:68:A:C:N3   | 1:68:A:C:C2  | 1:68:A:C:N1  | 1:68:A:C:C1' | 3                   | 1.05 | 0.01            | 1.06   |
| (1,1326) | 1:26:A:A:C5   | 1:26:A:A:C6  | 1:26:A:A:N6  | 1:26:A:A:H61 | 3                   | 1.03 | 0.02            | 1.03   |
| (1,632)  | 1:100:A:A:C6  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:N7 | 1:100:A:A:C8 | 3                   | 1.03 | 0.02            | 1.01   |
| (1,1843) | 1:19:A:C:C6   | 1:19:A:C:N1  | 1:19:A:C:C2  | 1:19:A:C:O2  | 3                   | 1.02 | 0.02            | 1.01   |

Continued on next page...

Continued from previous page...

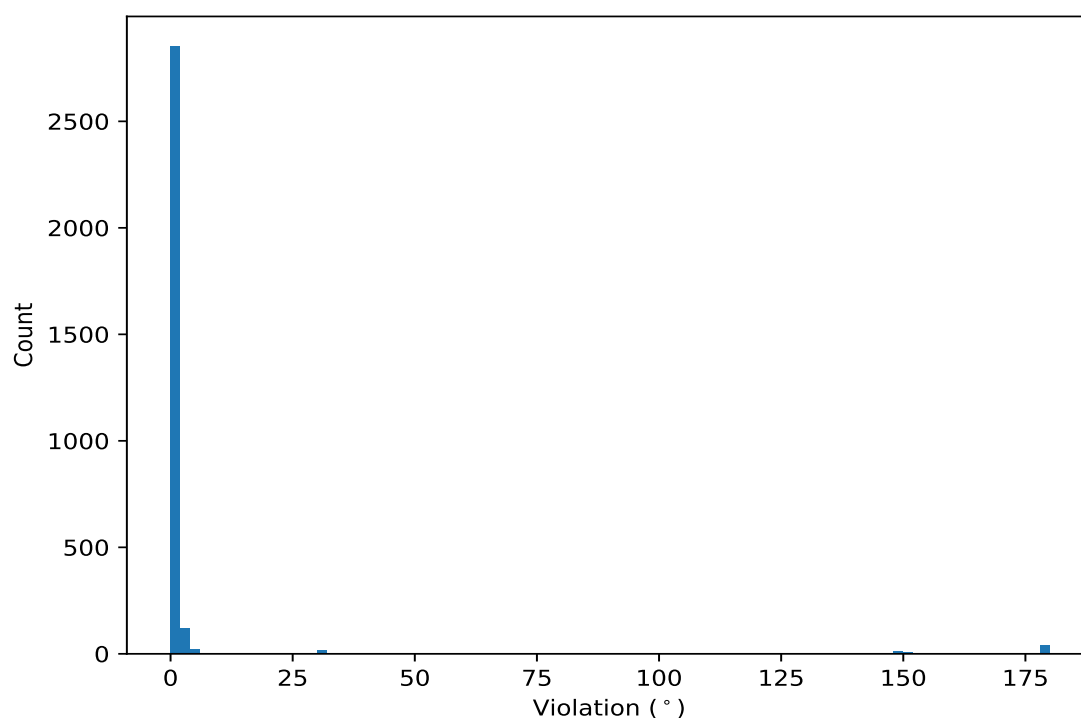
| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Models <sup>1</sup> | Mean | SD <sup>2</sup> | Median |
|----------|--------------|--------------|--------------|--------------|---------------------|------|-----------------|--------|
| (1,1638) | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C2   | 1:5:A:C:N1   | 1:5:A:C:C1'  | 2                   | 2.04 | 0.03            | 2.04   |
| (1,823)  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N3  | 1:91:A:G:C2  | 2                   | 1.42 | 0.01            | 1.42   |
| (1,1703) | 1:5:A:C:C5   | 1:5:A:C:C6   | 1:5:A:C:N1   | 1:5:A:C:C1'  | 2                   | 1.25 | 0.07            | 1.25   |
| (1,616)  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:N7  | 1:66:A:A:C8  | 2                   | 1.22 | 0.02            | 1.22   |
| (1,2207) | 1:92:A:C:H41 | 1:92:A:C:N4  | 1:92:A:C:C4  | 1:92:A:C:C5  | 2                   | 1.22 | 0.03            | 1.22   |
| (1,965)  | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2  | 1:22:A:G:H21 | 2                   | 1.17 | 0.1             | 1.17   |
| (1,812)  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 2                   | 1.14 | 0.14            | 1.14   |
| (1,601)  | 1:34:A:A:C6  | 1:34:A:A:C5  | 1:34:A:A:N7  | 1:34:A:A:C8  | 2                   | 1.13 | 0.01            | 1.13   |
| (1,795)  | 1:33:A:G:N9  | 1:33:A:G:C4  | 1:33:A:G:N3  | 1:33:A:G:C2  | 2                   | 1.12 | 0.02            | 1.12   |
| (1,1858) | 1:55:A:C:C6  | 1:55:A:C:N1  | 1:55:A:C:C2  | 1:55:A:C:O2  | 2                   | 1.12 | 0.12            | 1.12   |
| (1,422)  | 1:67:A:G:C1' | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N3  | 2                   | 1.12 | 0.01            | 1.12   |
| (1,2259) | 1:29:A:C:C2  | 1:29:A:C:N3  | 1:29:A:C:C4  | 1:29:A:C:N4  | 2                   | 1.08 | 0.02            | 1.08   |
| (1,1165) | 1:51:A:G:N3  | 1:51:A:G:C2  | 1:51:A:G:N1  | 1:51:A:G:H1  | 2                   | 1.08 | 0.07            | 1.08   |
| (1,2202) | 1:69:A:C:H41 | 1:69:A:C:N4  | 1:69:A:C:C4  | 1:69:A:C:C5  | 2                   | 1.08 | 0.06            | 1.08   |
| (1,298)  | 1:78:A:G:C1' | 1:78:A:G:N9  | 1:78:A:G:C8  | 1:78:A:G:N7  | 2                   | 1.07 | 0.02            | 1.07   |
| (1,1815) | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5  | 1:93:A:C:H5  | 2                   | 1.06 | 0.06            | 1.06   |
| (1,745)  | 1:65:A:A:C5  | 1:65:A:A:C4  | 1:65:A:A:N9  | 1:65:A:A:C8  | 2                   | 1.06 | 0.01            | 1.06   |
| (1,730)  | 1:33:A:G:C5  | 1:33:A:G:C4  | 1:33:A:G:N9  | 1:33:A:G:C8  | 2                   | 1.05 | 0.02            | 1.05   |
| (1,1652) | 1:29:A:C:N3  | 1:29:A:C:C2  | 1:29:A:C:N1  | 1:29:A:C:C1' | 2                   | 1.05 | 0.01            | 1.05   |
| (1,363)  | 1:78:A:G:C1' | 1:78:A:G:N9  | 1:78:A:G:C4  | 1:78:A:G:C5  | 2                   | 1.04 | 0.01            | 1.04   |
| (1,1113) | 1:3:A:G:C5   | 1:3:A:G:C6   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1   | 2                   | 1.04 | 0.02            | 1.04   |
| (1,430)  | 1:87:A:G:C1' | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N3  | 2                   | 1.04 | 0.04            | 1.04   |
| (1,738)  | 1:50:A:A:C5  | 1:50:A:A:C4  | 1:50:A:A:N9  | 1:50:A:A:C8  | 2                   | 1.04 | 0.01            | 1.04   |
| (1,194)  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8 | 1:357:A:G:H8 | 2                   | 1.03 | 0.01            | 1.03   |
| (1,1058) | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N3  | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2  | 2                   | 1.02 | 0.02            | 1.02   |
| (1,1704) | 1:6:A:U:C5   | 1:6:A:U:C6   | 1:6:A:U:N1   | 1:6:A:U:C1'  | 2                   | 1.02 | 0.02            | 1.02   |
| (1,801)  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 2                   | 1.02 | 0.01            | 1.02   |
| (1,860)  | 1:47:A:G:N7  | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:O6  | 2                   | 1.02 | 0.01            | 1.02   |
| (1,2271) | 1:68:A:C:C2  | 1:68:A:C:N3  | 1:68:A:C:C4  | 1:68:A:C:N4  | 2                   | 1.02 | 0.01            | 1.02   |
| (1,1715) | 1:24:A:C:C5  | 1:24:A:C:C6  | 1:24:A:C:N1  | 1:24:A:C:C1' | 2                   | 1.01 | 0.01            | 1.01   |
| (1,1140) | 1:107:A:G:C5 | 1:107:A:G:C6 | 1:107:A:G:N1 | 1:107:A:G:H1 | 2                   | 1.0  | 0.01            | 1.0    |

<sup>1</sup> Number of violated models, <sup>2</sup>Standard deviation, All angle values are in degree (°)

## 10.5 All violated dihedral-angle restraints ⓘ

### 10.5.1 Histogram : Distribution of violations ⓘ

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



### 10.5.2 Table: All violated dihedral-angle restraints [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.

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 11       | 179.99        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 16       | 179.97        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 16       | 179.81        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 7        | 179.8         |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 17       | 179.8         |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 6        | 179.75        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 19       | 179.73        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 7        | 179.72        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 3        | 179.72        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 11       | 179.71        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 10       | 179.7         |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 18       | 179.66        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 4        | 179.65        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 18       | 179.65        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 4        | 179.59        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 9        | 179.59        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 12       | 179.55        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 3        | 179.54        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 2        | 179.52        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 5        | 179.5         |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 9        | 179.47        |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 17       | 179.4         |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 19       | 179.39        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 2        | 179.37        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 13       | 179.28        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 8        | 179.25        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 12       | 179.24        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 14       | 179.23        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 15       | 179.22        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 20       | 179.21        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 6        | 179.16        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 10       | 179.13        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 5        | 179.04        |
| (1,1112) | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 1        | 179.03        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 13       | 178.72        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 14       | 178.62        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 8        | 178.44        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 1        | 178.27        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 15       | 178.24        |
| (1,1150) | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:H81 | 20       | 178.24        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 10       | 150.68        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 16       | 150.58        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 17       | 150.56        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 6        | 150.51        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 11       | 150.51        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 12       | 150.3         |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 7        | 150.14        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 4        | 150.04        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 5        | 150.0         |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 18       | 149.99        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 3        | 149.91        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 9        | 149.9         |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 1        | 149.75        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 19       | 149.75        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 8        | 149.7         |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 15       | 149.6         |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 13       | 149.55        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 20       | 149.43        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 2        | 149.22        |
| (1,960)  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 14       | 148.88        |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 14       | 32.36         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 2        | 32.19         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 8        | 31.58         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 15       | 31.55         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 20       | 31.55         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 18       | 31.54         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 13       | 31.51         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 4        | 31.39         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 19       | 31.37         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 9        | 31.35         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 3        | 31.32         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 1        | 31.28         |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 7        | 31.23         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 5        | 31.16         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 12       | 30.98         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 16       | 30.95         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 11       | 30.6          |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 17       | 30.54         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 6        | 30.37         |
| (1,998)  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 1:2:A:M7G:H2' | 10       | 30.33         |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 20       | 4.7           |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 4        | 4.66          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 5        | 4.62          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 6        | 4.62          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 10       | 4.62          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 9        | 4.58          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 12       | 4.57          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 15       | 4.57          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 16       | 4.57          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 8        | 4.56          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 2        | 4.54          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 3        | 4.53          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 18       | 4.53          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 1        | 4.52          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 19       | 4.52          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 11       | 4.5           |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 14       | 4.5           |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 13       | 4.49          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 17       | 4.31          |
| (1,1331) | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1:53:A:A:H61  | 7        | 3.9           |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 13       | 3.35          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 2        | 3.25          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 20       | 2.93          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 6        | 2.91          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 10       | 2.86          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41 | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 13       | 2.85          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 9        | 2.84          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 11       | 2.84          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 12       | 2.84          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 5        | 2.83          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 17       | 2.83          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 13       | 2.82          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 3        | 2.82          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 14       | 2.81          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 16       | 2.8           |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 3        | 2.79          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 2        | 2.78          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 8        | 2.77          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 15       | 2.76          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 4        | 2.74          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 19       | 2.74          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41 | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 2        | 2.66          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41  | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5    | 18       | 2.66          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41   | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5   | 1        | 2.63          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 13       | 2.59          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 6        | 2.56          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 20       | 2.56          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1' | 1        | 2.54          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 9        | 2.54          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 11       | 2.54          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 3        | 2.51          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 16       | 2.51          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 1        | 2.48          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 4        | 2.48          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 14       | 2.48          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 5        | 2.46          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 15       | 2.46          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 16       | 2.46          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 18       | 2.45          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 16       | 2.43          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 19       | 2.43          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 8        | 2.42          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 10       | 2.41          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 2        | 2.39          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 17       | 2.39          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 12       | 2.36          |
| (1,2201) | 1:68:A:C:H41  | 1:68:A:C:N4  | 1:68:A:C:C4  | 1:68:A:C:C5  | 16       | 2.33          |
| (1,2201) | 1:68:A:C:H41  | 1:68:A:C:N4  | 1:68:A:C:C4  | 1:68:A:C:C5  | 18       | 2.33          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 3        | 2.3           |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 8        | 2.3           |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1' | 17       | 2.3           |
| (1,2201) | 1:68:A:C:H41  | 1:68:A:C:N4  | 1:68:A:C:C4  | 1:68:A:C:C5  | 15       | 2.28          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 12       | 2.26          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 8        | 2.26          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 9        | 2.25          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 10       | 2.25          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 16       | 2.24          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 19       | 2.24          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1' | 12       | 2.23          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 15       | 2.23          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 14       | 2.22          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 5        | 2.22          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 19       | 2.22          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 19       | 2.21          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 18       | 2.2           |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 20       | 2.18          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 11       | 2.18          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1        | 2.17          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 5        | 2.17          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 15       | 2.17          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61 | 15       | 2.17          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 13       | 2.17          |
| (1,2201) | 1:68:A:C:H41  | 1:68:A:C:N4  | 1:68:A:C:C4  | 1:68:A:C:C5  | 1        | 2.16          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 17       | 2.15          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,983)  | 1:91:A:G:N3   | 1:91:A:G:C2  | 1:91:A:G:N2  | 1:91:A:G:H21 | 2        | 2.15          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 4        | 2.15          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 12       | 2.14          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 2        | 2.13          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 2        | 2.12          |
| (1,2182) | 1:5:A:C:H41   | 1:5:A:C:N4   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:C5   | 7        | 2.11          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 12       | 2.11          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 15       | 2.11          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 4        | 2.11          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 9        | 2.11          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 2        | 2.1           |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 10       | 2.1           |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 7        | 2.09          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 8        | 2.09          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1' | 9        | 2.08          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 3        | 2.08          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 18       | 2.08          |
| (1,2201) | 1:68:A:C:H41  | 1:68:A:C:N4  | 1:68:A:C:C4  | 1:68:A:C:C5  | 5        | 2.07          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1' | 10       | 2.07          |
| (1,1638) | 1:5:A:C:N3    | 1:5:A:C:C2   | 1:5:A:C:N1   | 1:5:A:C:C1'  | 17       | 2.07          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 20       | 2.07          |
| (1,983)  | 1:91:A:G:N3   | 1:91:A:G:C2  | 1:91:A:G:N2  | 1:91:A:G:H21 | 13       | 2.07          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 8        | 2.07          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 13       | 2.06          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1        | 2.06          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 20       | 2.06          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1        | 2.05          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 20       | 2.05          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 11       | 2.04          |
| (1,2206) | 1:84:A:C:H41  | 1:84:A:C:N4  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 13       | 2.04          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 6        | 2.03          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 15       | 2.03          |
| (1,611)  | 1:53:A:A:C6   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:N7  | 1:53:A:A:C8  | 7        | 2.03          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 6        | 2.02          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 16       | 2.02          |
| (1,1638) | 1:5:A:C:N3    | 1:5:A:C:C2   | 1:5:A:C:N1   | 1:5:A:C:C1'  | 7        | 2.01          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 9        | 2.01          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 16       | 2.01          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 19       | 2.01          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 13       | 2.0           |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 10       | 2.0           |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 20       | 2.0           |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 1        | 2.0           |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 11       | 2.0           |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 5        | 1.99          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 11       | 1.98          |
| (1,983)  | 1:91:A:G:N3   | 1:91:A:G:C2  | 1:91:A:G:N2  | 1:91:A:G:H21 | 4        | 1.97          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 18       | 1.97          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 3        | 1.96          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 18       | 1.95          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1' | 4        | 1.94          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 16       | 1.94          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 19       | 1.93          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 2        | 1.93          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 14       | 1.92          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 17       | 1.92          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 5        | 1.91          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 14       | 1.91          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1' | 14       | 1.9           |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 5        | 1.9           |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 2        | 1.9           |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 16       | 1.9           |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 20       | 1.9           |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 5        | 1.9           |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3 | 15       | 1.9           |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 17       | 1.89          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 9        | 1.89          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3 | 8        | 1.89          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61 | 4        | 1.88          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 3        | 1.88          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 18       | 1.88          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 17       | 1.88          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 9        | 1.88          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 17       | 1.88          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 14       | 1.87          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 11       | 1.87          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 10       | 1.86          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 11       | 1.86          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 12       | 1.86          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 13       | 1.86          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 15       | 1.86          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5  | 9        | 1.85          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 10       | 1.85          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 4        | 1.85          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 8        | 1.85          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5  | 16       | 1.84          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5  | 20       | 1.84          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 9        | 1.84          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5  | 5        | 1.83          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3 | 20       | 1.83          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1' | 5        | 1.82          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 12       | 1.82          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 4        | 1.82          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3 | 19       | 1.82          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 8        | 1.81          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 19       | 1.81          |
| (1,970)  | 1:33:A:G:N3   | 1:33:A:G:C2  | 1:33:A:G:N2  | 1:33:A:G:H21 | 2        | 1.81          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 7        | 1.81          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 19       | 1.81          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 17       | 1.8           |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 7        | 1.8           |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 1        | 1.8           |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 2        | 1.79          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 11       | 1.79          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 15       | 1.79          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61  | 1        | 1.79          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61  | 3        | 1.79          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61  | 6        | 1.79          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 1        | 1.79          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3  | 3        | 1.79          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 14       | 1.78          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 15       | 1.78          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61  | 7        | 1.78          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 15       | 1.78          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 17       | 1.78          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 17       | 1.77          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 20       | 1.77          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 2        | 1.77          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61  | 16       | 1.77          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61  | 15       | 1.77          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 7        | 1.77          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 2        | 1.77          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 20       | 1.77          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 1        | 1.76          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 10       | 1.76          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 12       | 1.76          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61  | 15       | 1.76          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21   | 20       | 1.76          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 7        | 1.76          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 17       | 1.75          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61  | 11       | 1.75          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 4        | 1.75          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 6        | 1.75          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 8        | 1.75          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 10       | 1.75          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3    | 20       | 1.75          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 11       | 1.75          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 19       | 1.74          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61  | 1        | 1.74          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61  | 9        | 1.74          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61  | 2        | 1.74          |
| (1,983)  | 1:91:A:G:N3   | 1:91:A:G:C2  | 1:91:A:G:N2  | 1:91:A:G:H21  | 5        | 1.74          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 15       | 1.74          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 13       | 1.74          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8    | 1        | 1.74          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3  | 6        | 1.74          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3    | 18       | 1.74          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 6        | 1.74          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 15       | 1.74          |
| (1,131)  | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:H81 | 1        | 1.74          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 17       | 1.73          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 18       | 1.73          |
| (1,1685) | 1:93:A:C:N3   | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C1'  | 15       | 1.73          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1' | 15       | 1.73          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61 | 18       | 1.73          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 2        | 1.73          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 7        | 1.73          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 8        | 1.73          |
| (1,970)  | 1:33:A:G:N3   | 1:33:A:G:C2  | 1:33:A:G:N2  | 1:33:A:G:H21 | 11       | 1.73          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8 | 11       | 1.73          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 14       | 1.73          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 10       | 1.73          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 10       | 1.73          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1' | 5        | 1.72          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1' | 18       | 1.72          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 18       | 1.72          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 15       | 1.72          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8 | 6        | 1.72          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 13       | 1.72          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 5        | 1.72          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 11       | 1.72          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61 | 5        | 1.71          |
| (1,1324) | 1:17:A:A:C5   | 1:17:A:A:C6  | 1:17:A:A:N6  | 1:17:A:A:H61 | 7        | 1.71          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 13       | 1.71          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8 | 5        | 1.71          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8 | 12       | 1.71          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 12       | 1.71          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 12       | 1.71          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5  | 3        | 1.7           |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8  | 6        | 1.7           |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 2        | 1.7           |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 14       | 1.7           |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 19       | 1.7           |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8  | 11       | 1.7           |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8  | 16       | 1.7           |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 2        | 1.7           |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 19       | 1.7           |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 20       | 1.7           |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 1        | 1.69          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 12       | 1.69          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8 | 3        | 1.69          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8 | 8        | 1.69          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 15       | 1.69          |
| (1,741)  | 1:53:A:A:C5   | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 7        | 1.69          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 13       | 1.69          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 20       | 1.69          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 3        | 1.69          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5  | 7        | 1.68          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5  | 13       | 1.68          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8 | 4        | 1.68          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 5        | 1.68          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 10       | 1.68          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5  | 4        | 1.67          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5  | 6        | 1.67          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 10       | 1.67          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61  | 16       | 1.67          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61  | 17       | 1.67          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61  | 18       | 1.67          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 13       | 1.67          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 18       | 1.67          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 11       | 1.67          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 13       | 1.67          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 3        | 1.67          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 9        | 1.67          |
| (1,2185) | 1:18:A:C:H41  | 1:18:A:C:N4  | 1:18:A:C:C4  | 1:18:A:C:C5   | 8        | 1.66          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 8        | 1.66          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 20       | 1.66          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 9        | 1.66          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 16       | 1.66          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 20       | 1.66          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 4        | 1.66          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 12       | 1.66          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 14       | 1.66          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 10       | 1.66          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 15       | 1.66          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 8        | 1.66          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 1        | 1.65          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61  | 20       | 1.65          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61  | 5        | 1.65          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21   | 8        | 1.65          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 2        | 1.65          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 14       | 1.65          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 18       | 1.65          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8  | 19       | 1.65          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 4        | 1.65          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 10       | 1.65          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 2        | 1.65          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 12       | 1.65          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 16       | 1.65          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3    | 13       | 1.65          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 1        | 1.65          |
| (1,131)  | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:H81 | 15       | 1.65          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 20       | 1.64          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21   | 16       | 1.64          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 4        | 1.64          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8   | 5        | 1.64          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 12       | 1.64          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 3        | 1.64          |
| (1,717)  | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8    | 7        | 1.64          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 4        | 1.64          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3    | 6        | 1.64          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3    | 19       | 1.64          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 4        | 1.64          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 10       | 1.63          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 1        | 1.63          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1  | 9        | 1.63          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1  | 15       | 1.63          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1  | 3        | 1.63          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 19       | 1.63          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 1        | 1.63          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 2        | 1.63          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 5        | 1.63          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8 | 17       | 1.63          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 5        | 1.63          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 14       | 1.63          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 6        | 1.63          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 11       | 1.63          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 3        | 1.63          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 16       | 1.63          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 6        | 1.62          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 20       | 1.62          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 3        | 1.62          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3 | 14       | 1.62          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3 | 16       | 1.62          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3 | 17       | 1.62          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 13       | 1.62          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8   | 5        | 1.62          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1' | 8        | 1.61          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1' | 10       | 1.61          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1' | 20       | 1.61          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 8        | 1.61          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 11       | 1.61          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 19       | 1.61          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 8        | 1.61          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 11       | 1.61          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1  | 13       | 1.61          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 15       | 1.61          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5  | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8 | 1        | 1.61          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 8        | 1.61          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8  | 5        | 1.61          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8  | 18       | 1.61          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 10       | 1.61          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3 | 3        | 1.61          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 14       | 1.61          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 5        | 1.61          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1' | 11       | 1.6           |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 4        | 1.6           |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 4        | 1.6           |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 7        | 1.6           |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 6        | 1.6           |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 20       | 1.6           |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8  | 8        | 1.6           |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 19       | 1.6           |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3 | 12       | 1.6           |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3  | 13       | 1.6           |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1' | 12       | 1.59          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61 | 8        | 1.59          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 4        | 1.59          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 10       | 1.59          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 9        | 1.59          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1  | 2        | 1.59          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 20       | 1.59          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 18       | 1.59          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8  | 13       | 1.59          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8  | 19       | 1.59          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3 | 5        | 1.59          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 17       | 1.59          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1' | 5        | 1.58          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61 | 4        | 1.58          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 10       | 1.58          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 13       | 1.58          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 19       | 1.58          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 4        | 1.58          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 15       | 1.58          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8  | 10       | 1.58          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8  | 15       | 1.58          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8  | 13       | 1.58          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8  | 1        | 1.58          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8  | 2        | 1.58          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8  | 17       | 1.58          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 13       | 1.58          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3 | 13       | 1.58          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3 | 18       | 1.58          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3  | 7        | 1.58          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 9        | 1.58          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 13       | 1.58          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 12       | 1.58          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 2        | 1.58          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 17       | 1.58          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3  | 18       | 1.58          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1' | 10       | 1.57          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1' | 7        | 1.57          |
| (1,1327) | 1:34:A:A:C5   | 1:34:A:A:C6  | 1:34:A:A:N6  | 1:34:A:A:H61 | 3        | 1.57          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1  | 10       | 1.57          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 12       | 1.57          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 14       | 1.57          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 9        | 1.57          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 2        | 1.57          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 12       | 1.57          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8  | 20       | 1.57          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8  | 13       | 1.57          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 18       | 1.57          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3  | 3        | 1.57          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1' | 13       | 1.56          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1' | 2        | 1.56          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 6        | 1.56          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 5        | 1.56          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 19       | 1.56          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 5        | 1.56          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 11       | 1.56          |
| (1,979)  | 1:78:A:G:N3  | 1:78:A:G:C2  | 1:78:A:G:N2  | 1:78:A:G:H21 | 9        | 1.56          |
| (1,979)  | 1:78:A:G:N3  | 1:78:A:G:C2  | 1:78:A:G:N2  | 1:78:A:G:H21 | 18       | 1.56          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 19       | 1.56          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 10       | 1.56          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8  | 16       | 1.56          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8  | 2        | 1.56          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8  | 13       | 1.56          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 2        | 1.56          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 20       | 1.56          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 15       | 1.56          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8   | 4        | 1.56          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1' | 1        | 1.55          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1' | 18       | 1.55          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61 | 16       | 1.55          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5  | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 12       | 1.55          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 12       | 1.55          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1  | 17       | 1.55          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1  | 12       | 1.55          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 7        | 1.55          |
| (1,767)  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C8 | 10       | 1.55          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8  | 12       | 1.55          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8  | 14       | 1.55          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3  | 6        | 1.55          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8   | 12       | 1.55          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1' | 3        | 1.54          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1' | 20       | 1.54          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1' | 13       | 1.54          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1' | 4        | 1.54          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5  | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61 | 16       | 1.54          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5  | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61 | 20       | 1.54          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5  | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61 | 3        | 1.54          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 3        | 1.54          |
| (1,970)  | 1:33:A:G:N3  | 1:33:A:G:C2  | 1:33:A:G:N2  | 1:33:A:G:H21 | 19       | 1.54          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21  | 11       | 1.54          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 14       | 1.54          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8  | 20       | 1.54          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8  | 10       | 1.54          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 15       | 1.54          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8  | 1        | 1.54          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8  | 11       | 1.54          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8  | 18       | 1.54          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 4        | 1.54          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 5        | 1.54          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 8        | 1.54          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2   | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4   | 7        | 1.53          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1' | 2        | 1.53          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1' | 13       | 1.53          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 1        | 1.53          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 5        | 1.53          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 18       | 1.53          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 16       | 1.53          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21   | 14       | 1.53          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8   | 1        | 1.53          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8   | 19       | 1.53          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 3        | 1.53          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 8        | 1.53          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 17       | 1.53          |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 9        | 1.53          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 17       | 1.53          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 15       | 1.53          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 16       | 1.53          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 20       | 1.53          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 18       | 1.53          |
| (1,2190) | 1:30:A:C:H41  | 1:30:A:C:N4  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:C5   | 3        | 1.52          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 12       | 1.52          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 12       | 1.52          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21   | 4        | 1.52          |
| (1,907)  | 1:91:A:G:C4   | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:O6   | 5        | 1.52          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 18       | 1.52          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 1        | 1.52          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 1        | 1.52          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 3        | 1.52          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 4        | 1.52          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 6        | 1.52          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 17       | 1.52          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 18       | 1.52          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 1        | 1.52          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 14       | 1.52          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 11       | 1.52          |
| (1,131)  | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:H81 | 20       | 1.52          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 15       | 1.51          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 17       | 1.51          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6   | 14       | 1.51          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6   | 15       | 1.51          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6   | 16       | 1.51          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6   | 17       | 1.51          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 6        | 1.51          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 19       | 1.51          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 7        | 1.51          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 3        | 1.51          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21   | 6        | 1.51          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8  | 16       | 1.51          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8   | 17       | 1.51          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 5        | 1.51          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 14       | 1.51          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 16       | 1.51          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 2        | 1.51          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 10       | 1.51          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 9        | 1.51          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 11       | 1.51          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 18       | 1.51          |
| (1,1685) | 1:93:A:C:N3   | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C1'  | 16       | 1.5           |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 7        | 1.5           |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 9        | 1.5           |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 16       | 1.5           |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 1        | 1.5           |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 3        | 1.5           |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 15       | 1.5           |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 7        | 1.5           |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 16       | 1.5           |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 19       | 1.5           |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 1        | 1.5           |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 17       | 1.5           |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 18       | 1.5           |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 8        | 1.5           |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 12       | 1.5           |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8   | 11       | 1.5           |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 14       | 1.5           |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 9        | 1.5           |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 6        | 1.5           |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 1        | 1.5           |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 6        | 1.5           |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 8        | 1.5           |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 12       | 1.5           |
| (1,1860) | 1:57:A:C:C6   | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:O2   | 16       | 1.49          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 16       | 1.49          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 9        | 1.49          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61  | 14       | 1.49          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 7        | 1.49          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 13       | 1.49          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 16       | 1.49          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 1        | 1.49          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 4        | 1.49          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 11       | 1.49          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 18       | 1.49          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 1        | 1.49          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 19       | 1.49          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 14       | 1.49          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 7        | 1.49          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 5        | 1.49          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 7        | 1.49          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 16       | 1.49          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 2        | 1.49          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3    | 16       | 1.49          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 14       | 1.49          |
| (1,179)  | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 1:103:A:G:H8  | 16       | 1.49          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 10       | 1.49          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 17       | 1.48          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 7        | 1.48          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5  | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 9        | 1.48          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 11       | 1.48          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 9        | 1.48          |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 7        | 1.48          |
| (1,907)  | 1:91:A:G:C4   | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:O6   | 16       | 1.48          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 9        | 1.48          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 3        | 1.48          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8   | 3        | 1.48          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8   | 9        | 1.48          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 2        | 1.48          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 7        | 1.48          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 16       | 1.48          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 18       | 1.48          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 18       | 1.48          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 2        | 1.48          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 7        | 1.48          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 1        | 1.48          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3  | 14       | 1.48          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 18       | 1.48          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 14       | 1.48          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 6        | 1.48          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 17       | 1.48          |
| (1,1867) | 1:69:A:C:C6   | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:O2   | 9        | 1.47          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5  | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 17       | 1.47          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6   | 13       | 1.47          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 20       | 1.47          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 9        | 1.47          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 17       | 1.47          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 11       | 1.47          |
| (1,982)  | 1:89:A:G:N3   | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2  | 1:89:A:G:H21  | 5        | 1.47          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 8        | 1.47          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 19       | 1.47          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 6        | 1.47          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 1        | 1.47          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 18       | 1.47          |
| (1,757)  | 1:89:A:G:C5   | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C8   | 1        | 1.47          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 15       | 1.47          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 4        | 1.47          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 5        | 1.47          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 8        | 1.47          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 12       | 1.47          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 4        | 1.47          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 8        | 1.47          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 11       | 1.47          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 2        | 1.47          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 1        | 1.47          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 8        | 1.47          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 17       | 1.47          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 10       | 1.47          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 20       | 1.47          |
| (1,131)  | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:H81 | 8        | 1.47          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 18       | 1.46          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 9        | 1.46          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 11       | 1.46          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 5        | 1.46          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61  | 13       | 1.46          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6   | 18       | 1.46          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 4        | 1.46          |
| (1,1135) | 1:91:A:G:C5   | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:N1  | 1:91:A:G:H1   | 5        | 1.46          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 1        | 1.46          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 2        | 1.46          |
| (1,1017) | 1:78:A:G:N1   | 1:78:A:G:C2  | 1:78:A:G:N2  | 1:78:A:G:H22  | 1        | 1.46          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 18       | 1.46          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21   | 10       | 1.46          |
| (1,907)  | 1:91:A:G:C4   | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:O6   | 18       | 1.46          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 5        | 1.46          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 7        | 1.46          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 16       | 1.46          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8   | 20       | 1.46          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 4        | 1.46          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 3        | 1.46          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 1        | 1.46          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 10       | 1.46          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 10       | 1.46          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 6        | 1.46          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 11       | 1.46          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 6        | 1.46          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 13       | 1.46          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 19       | 1.46          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 15       | 1.45          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 5        | 1.45          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 14       | 1.45          |
| (1,1672) | 1:69:A:C:N3   | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C1'  | 9        | 1.45          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 9        | 1.45          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 14       | 1.45          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 11       | 1.45          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 6        | 1.45          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6   | 2        | 1.45          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 2        | 1.45          |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 3        | 1.45          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 1        | 1.45          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 15       | 1.45          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 9        | 1.45          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 9        | 1.45          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 6        | 1.45          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 20       | 1.45          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 4        | 1.45          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1'  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 9        | 1.45          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 1        | 1.45          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 2        | 1.45          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 2        | 1.45          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 6        | 1.44          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 7        | 1.44          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 8        | 1.44          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 20       | 1.44          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5  | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 19       | 1.44          |
| (1,1330) | 1:50:A:A:C5  | 1:50:A:A:C6  | 1:50:A:A:N6  | 1:50:A:A:H61  | 9        | 1.44          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 7        | 1.44          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 16       | 1.44          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 11       | 1.44          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9 | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 6        | 1.44          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9 | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 20       | 1.44          |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8   | 8        | 1.44          |
| (1,758)  | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C8   | 8        | 1.44          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 6        | 1.44          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 6        | 1.44          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 8        | 1.44          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 10       | 1.44          |
| (1,722)  | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C8   | 19       | 1.44          |
| (1,456)  | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:N7 | 1:2:A:M7G:C5  | 1        | 1.44          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1' | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 10       | 1.44          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 20       | 1.44          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 20       | 1.44          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 12       | 1.43          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 17       | 1.43          |
| (1,1867) | 1:69:A:C:C6  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:O2   | 20       | 1.43          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 8        | 1.43          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 19       | 1.43          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 6        | 1.43          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 7        | 1.43          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 4        | 1.43          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 15       | 1.43          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 7        | 1.43          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 12       | 1.43          |
| (1,961)  | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2   | 1:3:A:G:H21   | 17       | 1.43          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 4        | 1.43          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 12       | 1.43          |
| (1,757)  | 1:89:A:G:C5  | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C8   | 16       | 1.43          |
| (1,757)  | 1:89:A:G:C5  | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C8   | 18       | 1.43          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 7        | 1.43          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 16       | 1.43          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1' | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 19       | 1.43          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 3        | 1.43          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41 | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 16       | 1.42          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 6        | 1.42          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 3        | 1.42          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 4        | 1.42          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5  | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 17       | 1.42          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 6        | 1.42          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 11       | 1.42          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 6        | 1.42          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 20       | 1.42          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 1        | 1.42          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 5        | 1.42          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 17       | 1.42          |
| (1,823)  | 1:91:A:G:N9   | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N3  | 1:91:A:G:C2   | 7        | 1.42          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 12       | 1.42          |
| (1,748)  | 1:72:A:A:C5   | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C8   | 11       | 1.42          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 12       | 1.42          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 12       | 1.42          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 6        | 1.42          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 15       | 1.42          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 14       | 1.42          |
| (1,416)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3   | 7        | 1.42          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1'  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 12       | 1.42          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 13       | 1.42          |
| (1,351)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:C5   | 7        | 1.42          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 9        | 1.42          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6   | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 19       | 1.41          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5  | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 14       | 1.41          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 3        | 1.41          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 1        | 1.41          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 14       | 1.41          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 7        | 1.41          |
| (1,823)  | 1:91:A:G:N9   | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N3  | 1:91:A:G:C2   | 4        | 1.41          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 4        | 1.41          |
| (1,442)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:N3  | 8        | 1.41          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 13       | 1.41          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 7        | 1.41          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 9        | 1.41          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 15       | 1.41          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 18       | 1.4           |
| (1,2190) | 1:30:A:C:H41  | 1:30:A:C:N4  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:C5   | 11       | 1.4           |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6   | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 15       | 1.4           |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6   | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 16       | 1.4           |
| (1,1867) | 1:69:A:C:C6   | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:O2   | 6        | 1.4           |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5  | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 8        | 1.4           |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 12       | 1.4           |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 18       | 1.4           |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 7        | 1.4           |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 8        | 1.4           |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 16       | 1.4           |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 19       | 1.4           |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 11       | 1.4           |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 12       | 1.4           |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 14       | 1.4           |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 2        | 1.4           |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 20       | 1.4           |
| (1,757)  | 1:89:A:G:C5   | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C8   | 15       | 1.4           |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 13       | 1.4           |
| (1,743)  | 1:58:A:A:C5   | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8   | 3        | 1.4           |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5   | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 11       | 1.4           |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 7        | 1.4           |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 10       | 1.4           |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 2        | 1.4           |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 19       | 1.4           |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 3        | 1.4           |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 14       | 1.4           |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1' | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 15       | 1.4           |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 2        | 1.4           |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1' | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 1        | 1.4           |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 8        | 1.4           |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 9        | 1.4           |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 20       | 1.4           |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41  | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 10       | 1.39          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 1        | 1.39          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 2        | 1.39          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 5        | 1.39          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 9        | 1.39          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 11       | 1.39          |
| (1,1680) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C1'  | 11       | 1.39          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 19       | 1.39          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 16       | 1.39          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5  | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 13       | 1.39          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 5        | 1.39          |
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 14       | 1.39          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 6        | 1.39          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 16       | 1.39          |
| (1,1017) | 1:78:A:G:N1  | 1:78:A:G:C2  | 1:78:A:G:N2  | 1:78:A:G:H22  | 5        | 1.39          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 4        | 1.39          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 6        | 1.39          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 11       | 1.39          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 13       | 1.39          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 6        | 1.39          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 14       | 1.39          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 9        | 1.39          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 15       | 1.39          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1' | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 19       | 1.39          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 13       | 1.39          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 1        | 1.39          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 12       | 1.39          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 15       | 1.39          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 19       | 1.39          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 18       | 1.39          |
| (1,1751) | 1:94:A:U:C5  | 1:94:A:U:C6  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 15       | 1.38          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 11       | 1.38          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 12       | 1.38          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5  | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 14       | 1.38          |
| (1,1327) | 1:34:A:A:C5  | 1:34:A:A:C6  | 1:34:A:A:N6  | 1:34:A:A:H61  | 1        | 1.38          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 8        | 1.38          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 7        | 1.38          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 10       | 1.38          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 14       | 1.38          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 9        | 1.38          |
| (1,907)  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:O6   | 1        | 1.38          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9 | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 14       | 1.38          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 19       | 1.38          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 16       | 1.38          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5  | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 6        | 1.38          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 15       | 1.38          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 18       | 1.38          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1' | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 12       | 1.38          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1' | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 11       | 1.38          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1' | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 8        | 1.38          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1' | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 11       | 1.38          |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3    | 17       | 1.38          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 17       | 1.38          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 19       | 1.38          |
| (1,2260) | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:N4   | 2        | 1.37          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41  | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 1        | 1.37          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 20       | 1.37          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 11       | 1.37          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 14       | 1.37          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 18       | 1.37          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 20       | 1.37          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 18       | 1.37          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 13       | 1.37          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 16       | 1.37          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 3        | 1.37          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 5        | 1.37          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 19       | 1.37          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9 | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 10       | 1.37          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 15       | 1.37          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 6        | 1.37          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 8        | 1.37          |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5  | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8   | 2        | 1.37          |
| (1,737)  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C8   | 13       | 1.37          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 12       | 1.37          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 19       | 1.37          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 5        | 1.37          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 12       | 1.37          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 3        | 1.37          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 4        | 1.37          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 11       | 1.37          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 3        | 1.37          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 4        | 1.37          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 16       | 1.37          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 3        | 1.37          |
| (1,2278) | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:N4   | 7        | 1.36          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41 | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 4        | 1.36          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41  | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 13       | 1.36          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 14       | 1.36          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 20       | 1.36          |
| (1,1685) | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C1'  | 1        | 1.36          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 19       | 1.36          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5  | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 6        | 1.36          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 14       | 1.36          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 13       | 1.36          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 18       | 1.36          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 10       | 1.36          |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 17       | 1.36          |
| (1,970)  | 1:33:A:G:N3   | 1:33:A:G:C2  | 1:33:A:G:N2  | 1:33:A:G:H21  | 16       | 1.36          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 2        | 1.36          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 3        | 1.36          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 7        | 1.36          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 8        | 1.36          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 18       | 1.36          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 19       | 1.36          |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5   | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8   | 6        | 1.36          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 7        | 1.36          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 8        | 1.36          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 5        | 1.36          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 14       | 1.36          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 2        | 1.36          |
| (1,131)  | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:H81 | 14       | 1.36          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 15       | 1.36          |
| (1,2260) | 1:30:A:C:C2   | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:N4   | 3        | 1.35          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 8        | 1.35          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 8        | 1.35          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6   | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 3        | 1.35          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 1        | 1.35          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 18       | 1.35          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 16       | 1.35          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 13       | 1.35          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 6        | 1.35          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 13       | 1.35          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 12       | 1.35          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 13       | 1.35          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9  | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 16       | 1.35          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 10       | 1.35          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 11       | 1.35          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 4        | 1.35          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 19       | 1.35          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 5        | 1.35          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3  | 8        | 1.35          |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3  | 20       | 1.35          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1'  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 15       | 1.35          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 18       | 1.35          |
| (1,179)  | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 1:103:A:G:H8  | 14       | 1.35          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 16       | 1.35          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 1        | 1.34          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 5        | 1.34          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 11       | 1.34          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 19       | 1.34          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 10       | 1.34          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6   | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 18       | 1.34          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 8        | 1.34          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5  | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 6        | 1.34          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 20       | 1.34          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 9        | 1.34          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 14       | 1.34          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 4        | 1.34          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 17       | 1.34          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 20       | 1.34          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 4        | 1.34          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 1        | 1.34          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 2        | 1.34          |
| (1,1037) | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N2    | 10       | 1.34          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 13       | 1.34          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 8        | 1.34          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 9        | 1.34          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 15       | 1.34          |
| (1,982)  | 1:89:A:G:N3  | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2  | 1:89:A:G:H21  | 1        | 1.34          |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 20       | 1.34          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 6        | 1.34          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 15       | 1.34          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9 | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 3        | 1.34          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 4        | 1.34          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 14       | 1.34          |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5  | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8   | 16       | 1.34          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 10       | 1.34          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 18       | 1.34          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 9        | 1.34          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 12       | 1.34          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 15       | 1.34          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 7        | 1.34          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6  | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 5        | 1.34          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 4        | 1.34          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 17       | 1.34          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6  | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 12       | 1.34          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1' | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 5        | 1.34          |
| (1,432)  | 1:89:A:G:C1' | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N3   | 1        | 1.34          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1' | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 13       | 1.34          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1' | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 2        | 1.34          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1' | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 7        | 1.34          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1' | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 16       | 1.34          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 14       | 1.34          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 9        | 1.34          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 5        | 1.34          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 13       | 1.34          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 18       | 1.34          |
| (1,2278) | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:N4   | 15       | 1.33          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41 | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 16       | 1.33          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41 | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 13       | 1.33          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 15       | 1.33          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5  | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 8        | 1.33          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 19       | 1.33          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 10       | 1.33          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 4        | 1.33          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1126) | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:N1  | 1:47:A:G:H1   | 8        | 1.33          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 5        | 1.33          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 14       | 1.33          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 12       | 1.33          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 1        | 1.33          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 12       | 1.33          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 2        | 1.33          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 19       | 1.33          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 4        | 1.33          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 17       | 1.33          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 3        | 1.33          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9 | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 17       | 1.33          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 14       | 1.33          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 19       | 1.33          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 6        | 1.33          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 17       | 1.33          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 19       | 1.33          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1' | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 15       | 1.33          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 2        | 1.33          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 3        | 1.33          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 14       | 1.33          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 14       | 1.33          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 10       | 1.32          |
| (1,1867) | 1:69:A:C:C6  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:O2   | 8        | 1.32          |
| (1,1860) | 1:57:A:C:C6  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:O2   | 2        | 1.32          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 19       | 1.32          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 2        | 1.32          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 10       | 1.32          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 15       | 1.32          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5  | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61  | 4        | 1.32          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1   | 10       | 1.32          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 1        | 1.32          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 4        | 1.32          |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 10       | 1.32          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 18       | 1.32          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 10       | 1.32          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9 | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 15       | 1.32          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 7        | 1.32          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 19       | 1.32          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 20       | 1.32          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 6        | 1.32          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 17       | 1.32          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 10       | 1.32          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 20       | 1.32          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6  | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 16       | 1.32          |
| (1,456)  | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:N7 | 1:2:A:M7G:C5  | 8        | 1.32          |
| (1,456)  | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:N7 | 1:2:A:M7G:C5  | 15       | 1.32          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1' | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 9        | 1.32          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1' | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 4        | 1.32          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1' | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 12       | 1.32          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 16       | 1.32          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 8        | 1.32          |
| (1,374)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:C5  | 11       | 1.32          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 19       | 1.32          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 9        | 1.32          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 4        | 1.32          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 15       | 1.32          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 1        | 1.31          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 1        | 1.31          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6   | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 14       | 1.31          |
| (1,1703) | 1:5:A:C:C5    | 1:5:A:C:C6   | 1:5:A:C:N1   | 1:5:A:C:C1'   | 17       | 1.31          |
| (1,1672) | 1:69:A:C:N3   | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C1'  | 20       | 1.31          |
| (1,1658) | 1:40:A:C:N3   | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 8        | 1.31          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5  | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 13       | 1.31          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5  | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 16       | 1.31          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5   | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 16       | 1.31          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 9        | 1.31          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 11       | 1.31          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 13       | 1.31          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 18       | 1.31          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 14       | 1.31          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 12       | 1.31          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 16       | 1.31          |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 6        | 1.31          |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 19       | 1.31          |
| (1,970)  | 1:33:A:G:N3   | 1:33:A:G:C2  | 1:33:A:G:N2  | 1:33:A:G:H21  | 18       | 1.31          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 16       | 1.31          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 7        | 1.31          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 9        | 1.31          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 17       | 1.31          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 10       | 1.31          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 9        | 1.31          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 17       | 1.31          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 9        | 1.31          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 6        | 1.31          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 19       | 1.31          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 5        | 1.31          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 11       | 1.31          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 16       | 1.31          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 2        | 1.31          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 13       | 1.3           |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 15       | 1.3           |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 16       | 1.3           |
| (1,1738) | 1:70:A:U:C5   | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1'  | 18       | 1.3           |
| (1,1685) | 1:93:A:C:N3   | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C1'  | 17       | 1.3           |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5  | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 5        | 1.3           |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 20       | 1.3           |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 2        | 1.3           |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 6        | 1.3           |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 20       | 1.3           |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 1        | 1.3           |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 1        | 1.3           |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21 | 14       | 1.3           |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21 | 15       | 1.3           |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 15       | 1.3           |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 16       | 1.3           |
| (1,759)  | 1:96:A:A:C5   | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C8  | 18       | 1.3           |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8  | 19       | 1.3           |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8  | 1        | 1.3           |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8  | 12       | 1.3           |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8  | 14       | 1.3           |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8  | 7        | 1.3           |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8  | 20       | 1.3           |
| (1,439)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 15       | 1.3           |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3  | 1        | 1.3           |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3  | 15       | 1.3           |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3  | 7        | 1.3           |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 6        | 1.3           |
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 7        | 1.3           |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3  | 7        | 1.3           |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5  | 4        | 1.29          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5  | 20       | 1.29          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5  | 3        | 1.29          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5  | 11       | 1.29          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5   | 2        | 1.29          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2  | 15       | 1.29          |
| (1,1729) | 1:56:A:C:C5   | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1' | 14       | 1.29          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'  | 4        | 1.29          |
| (1,1685) | 1:93:A:C:N3   | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C1' | 7        | 1.29          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1   | 5        | 1.29          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1   | 20       | 1.29          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1        | 1.29          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 6        | 1.29          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 2        | 1.29          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21 | 5        | 1.29          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21 | 10       | 1.29          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21 | 11       | 1.29          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21 | 19       | 1.29          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8 | 20       | 1.29          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 5        | 1.29          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8  | 15       | 1.29          |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8  | 5        | 1.29          |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8  | 15       | 1.29          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 20       | 1.29          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8  | 13       | 1.29          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8 | 1        | 1.29          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8 | 13       | 1.29          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8  | 14       | 1.29          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3  | 19       | 1.29          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3  | 9        | 1.29          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3  | 9        | 1.29          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3  | 12       | 1.29          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1'  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3  | 10       | 1.29          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,392)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:N3   | 1        | 1.29          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5   | 15       | 1.28          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5   | 19       | 1.28          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6   | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2  | 7        | 1.28          |
| (1,1714) | 1:23:A:U:C5   | 1:23:A:U:C6  | 1:23:A:U:N1  | 1:23:A:U:C1' | 16       | 1.28          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3   | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1' | 15       | 1.28          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5   | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61 | 18       | 1.28          |
| (1,1337) | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C6  | 1:73:A:A:N6  | 1:73:A:A:H61 | 6        | 1.28          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61 | 16       | 1.28          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1  | 15       | 1.28          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1   | 18       | 1.28          |
| (1,1119) | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C6  | 1:27:A:G:N1  | 1:27:A:G:H1  | 8        | 1.28          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1  | 3        | 1.28          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1  | 8        | 1.28          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1  | 19       | 1.28          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 4        | 1.28          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1        | 1.28          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2  | 10       | 1.28          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2  | 4        | 1.28          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 9        | 1.28          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 11       | 1.28          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 8        | 1.28          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 2        | 1.28          |
| (1,975)  | 1:51:A:G:N3   | 1:51:A:G:C2  | 1:51:A:G:N2  | 1:51:A:G:H21 | 14       | 1.28          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21 | 2        | 1.28          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21 | 11       | 1.28          |
| (1,818)  | 1:78:A:G:N9   | 1:78:A:G:C4  | 1:78:A:G:N3  | 1:78:A:G:C2  | 18       | 1.28          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8 | 10       | 1.28          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1        | 1.28          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 11       | 1.28          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 20       | 1.28          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8 | 11       | 1.28          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8  | 2        | 1.28          |
| (1,758)  | 1:91:A:G:C5   | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C8  | 6        | 1.28          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8  | 5        | 1.28          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8  | 12       | 1.28          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8  | 11       | 1.28          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8 | 10       | 1.28          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8 | 11       | 1.28          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8 | 18       | 1.28          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8  | 2        | 1.28          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8  | 5        | 1.28          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8  | 12       | 1.28          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8  | 16       | 1.28          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5   | 9        | 1.28          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3 | 3        | 1.28          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3 | 16       | 1.28          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3  | 20       | 1.28          |
| (1,432)  | 1:89:A:G:C1'  | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N3  | 18       | 1.28          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3  | 6        | 1.28          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3  | 7        | 1.28          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 10       | 1.28          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 5        | 1.28          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 4        | 1.28          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 11       | 1.28          |
| (1,132)  | 1:3:A:G:C4    | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:H8    | 16       | 1.28          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 1        | 1.28          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 19       | 1.28          |
| (1,2278) | 1:93:A:C:C2   | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:N4   | 16       | 1.27          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 14       | 1.27          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 18       | 1.27          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 7        | 1.27          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 17       | 1.27          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 12       | 1.27          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 20       | 1.27          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 2        | 1.27          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 8        | 1.27          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 2        | 1.27          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 9        | 1.27          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 13       | 1.27          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 15       | 1.27          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 5        | 1.27          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 17       | 1.27          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 5        | 1.27          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 9        | 1.27          |
| (1,985)  | 1:101:A:G:N3  | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 1:101:A:G:H21 | 13       | 1.27          |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 9        | 1.27          |
| (1,965)  | 1:22:A:G:N3   | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2  | 1:22:A:G:H21  | 16       | 1.27          |
| (1,812)  | 1:67:A:G:N9   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2   | 7        | 1.27          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 14       | 1.27          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 18       | 1.27          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 11       | 1.27          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 15       | 1.27          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 20       | 1.27          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 3        | 1.27          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 1        | 1.27          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 13       | 1.27          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 6        | 1.27          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 2        | 1.27          |
| (1,433)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N3   | 20       | 1.27          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 11       | 1.27          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 15       | 1.27          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1'  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 7        | 1.27          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 12       | 1.27          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 11       | 1.27          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 20       | 1.27          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 11       | 1.27          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 10       | 1.26          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 17       | 1.26          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 9        | 1.26          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 6        | 1.26          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 17       | 1.26          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1867) | 1:69:A:C:C6  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:O2   | 10       | 1.26          |
| (1,1860) | 1:57:A:C:C6  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:O2   | 7        | 1.26          |
| (1,1751) | 1:94:A:U:C5  | 1:94:A:U:C6  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 16       | 1.26          |
| (1,1738) | 1:70:A:U:C5  | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1'  | 1        | 1.26          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5   | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 6        | 1.26          |
| (1,1349) | 1:351:A:A:C5 | 1:351:A:A:C6 | 1:351:A:A:N6 | 1:351:A:A:H61 | 1        | 1.26          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5  | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 15       | 1.26          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 2        | 1.26          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 1        | 1.26          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 10       | 1.26          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 6        | 1.26          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 7        | 1.26          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 11       | 1.26          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 20       | 1.26          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 15       | 1.26          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 7        | 1.26          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 13       | 1.26          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 18       | 1.26          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 4        | 1.26          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 12       | 1.26          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 12       | 1.26          |
| (1,982)  | 1:89:A:G:N3  | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2  | 1:89:A:G:H21  | 18       | 1.26          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 4        | 1.26          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 7        | 1.26          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 17       | 1.26          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 7        | 1.26          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 8        | 1.26          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5  | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 9        | 1.26          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 16       | 1.26          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6  | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 20       | 1.26          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 14       | 1.26          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6  | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 18       | 1.26          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6  | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 6        | 1.26          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 15       | 1.26          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 20       | 1.26          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1' | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 4        | 1.26          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1' | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 14       | 1.26          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1' | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 6        | 1.26          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1' | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 12       | 1.26          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 18       | 1.26          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1' | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 14       | 1.26          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 13       | 1.25          |
| (1,2207) | 1:92:A:C:H41 | 1:92:A:C:N4  | 1:92:A:C:C4  | 1:92:A:C:C5   | 2        | 1.25          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41 | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 14       | 1.25          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41  | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 11       | 1.25          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41  | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 18       | 1.25          |
| (1,1875) | 1:84:A:C:C6  | 1:84:A:C:N1  | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:O2   | 13       | 1.25          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 8        | 1.25          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 11       | 1.25          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 17       | 1.25          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 3        | 1.25          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 11       | 1.25          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 11       | 1.25          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 19       | 1.25          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 15       | 1.25          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 17       | 1.25          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 7        | 1.25          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 9        | 1.25          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 12       | 1.25          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 15       | 1.25          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 19       | 1.25          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 18       | 1.25          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 6        | 1.25          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 10       | 1.25          |
| (1,983)  | 1:91:A:G:N3  | 1:91:A:G:C2  | 1:91:A:G:N2  | 1:91:A:G:H21  | 7        | 1.25          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 5        | 1.25          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 6        | 1.25          |
| (1,818)  | 1:78:A:G:N9  | 1:78:A:G:C4  | 1:78:A:G:N3  | 1:78:A:G:C2   | 9        | 1.25          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 9        | 1.25          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 6        | 1.25          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 9        | 1.25          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 17       | 1.25          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5  | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 8        | 1.25          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 8        | 1.25          |
| (1,734)  | 1:43:A:G:C5  | 1:43:A:G:C4  | 1:43:A:G:N9  | 1:43:A:G:C8   | 20       | 1.25          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 5        | 1.25          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 9        | 1.25          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 5        | 1.25          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 18       | 1.25          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6 | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 3        | 1.25          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6 | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 4        | 1.25          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6 | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 12       | 1.25          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6 | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 16       | 1.25          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6  | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 13       | 1.25          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6  | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 2        | 1.25          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 13       | 1.25          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1' | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 5        | 1.25          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1' | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 16       | 1.25          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1' | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 18       | 1.25          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1' | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 17       | 1.25          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1' | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 3        | 1.25          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 17       | 1.25          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1' | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 15       | 1.25          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1' | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 18       | 1.25          |
| (1,131)  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:H81 | 12       | 1.25          |
| (1,131)  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:H81 | 13       | 1.25          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41 | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 6        | 1.24          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41 | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 10       | 1.24          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41 | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 5        | 1.24          |
| (1,1867) | 1:69:A:C:C6  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:O2   | 13       | 1.24          |
| (1,1858) | 1:55:A:C:C6  | 1:55:A:C:N1  | 1:55:A:C:C2  | 1:55:A:C:O2   | 7        | 1.24          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 7        | 1.24          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1738) | 1:70:A:U:C5  | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1'  | 15       | 1.24          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1'  | 17       | 1.24          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 12       | 1.24          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 16       | 1.24          |
| (1,1074) | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 16       | 1.24          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 15       | 1.24          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 2        | 1.24          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 16       | 1.24          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 16       | 1.24          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 3        | 1.24          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3 | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 19       | 1.24          |
| (1,970)  | 1:33:A:G:N3  | 1:33:A:G:C2  | 1:33:A:G:N2  | 1:33:A:G:H21  | 6        | 1.24          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 8        | 1.24          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 3        | 1.24          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 18       | 1.24          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 13       | 1.24          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 3        | 1.24          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 15       | 1.24          |
| (1,757)  | 1:89:A:G:C5  | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C8   | 5        | 1.24          |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5  | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8   | 10       | 1.24          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 2        | 1.24          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 20       | 1.24          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 2        | 1.24          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6 | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 15       | 1.24          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6 | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 17       | 1.24          |
| (1,616)  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:N7  | 1:66:A:A:C8   | 2        | 1.24          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6  | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 15       | 1.24          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 8        | 1.24          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1' | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 1        | 1.24          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1' | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 17       | 1.24          |
| (1,433)  | 1:91:A:G:C1' | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N3   | 9        | 1.24          |
| (1,432)  | 1:89:A:G:C1' | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N3   | 16       | 1.24          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1' | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 3        | 1.24          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1' | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 5        | 1.24          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1' | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 9        | 1.24          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'  | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 8        | 1.24          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 6        | 1.24          |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6  | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 6        | 1.24          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2   | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 4        | 1.23          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41 | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 8        | 1.23          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41 | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 11       | 1.23          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41 | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 6        | 1.23          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 14       | 1.23          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 10       | 1.23          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 2        | 1.23          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 5        | 1.23          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 13       | 1.23          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5   | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 14       | 1.23          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 10       | 1.23          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 17       | 1.23          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 2        | 1.23          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1130) | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C6  | 1:67:A:G:N1  | 1:67:A:G:H1   | 17       | 1.23          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 11       | 1.23          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 8        | 1.23          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 13       | 1.23          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 15       | 1.23          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 10       | 1.23          |
| (1,982)  | 1:89:A:G:N3   | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2  | 1:89:A:G:H21  | 15       | 1.23          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 13       | 1.23          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 17       | 1.23          |
| (1,907)  | 1:91:A:G:C4   | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:O6   | 15       | 1.23          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8  | 9        | 1.23          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 12       | 1.23          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 18       | 1.23          |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8   | 17       | 1.23          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 14       | 1.23          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 18       | 1.23          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 14       | 1.23          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 19       | 1.23          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 5        | 1.23          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 11       | 1.23          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 4        | 1.23          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 19       | 1.23          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 18       | 1.23          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 13       | 1.23          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 9        | 1.23          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1'  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 19       | 1.23          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 13       | 1.23          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 2        | 1.22          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 14       | 1.22          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 18       | 1.22          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 3        | 1.22          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 2        | 1.22          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 3        | 1.22          |
| (1,2138) | 1:90:A:U:N1   | 1:90:A:U:C2  | 1:90:A:U:N3  | 1:90:A:U:H3   | 15       | 1.22          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 6        | 1.22          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 8        | 1.22          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 16       | 1.22          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3   | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1'  | 14       | 1.22          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 13       | 1.22          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5   | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61  | 3        | 1.22          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 2        | 1.22          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 12       | 1.22          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 6        | 1.22          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 14       | 1.22          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 5        | 1.22          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 18       | 1.22          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 9        | 1.22          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 1        | 1.22          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 4        | 1.22          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 6        | 1.22          |
| (1,982)  | 1:89:A:G:N3   | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2  | 1:89:A:G:H21  | 16       | 1.22          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,970)  | 1:33:A:G:N3   | 1:33:A:G:C2  | 1:33:A:G:N2  | 1:33:A:G:H21 | 15       | 1.22          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21 | 17       | 1.22          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8 | 17       | 1.22          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 20       | 1.22          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8 | 13       | 1.22          |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5   | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8  | 13       | 1.22          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8  | 3        | 1.22          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8  | 17       | 1.22          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8  | 18       | 1.22          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8  | 8        | 1.22          |
| (1,723)  | 1:21:A:G:C5   | 1:21:A:G:C4  | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8  | 10       | 1.22          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8 | 14       | 1.22          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8  | 1        | 1.22          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8  | 16       | 1.22          |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8  | 16       | 1.22          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8  | 6        | 1.22          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8  | 4        | 1.22          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5   | 4        | 1.22          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3 | 20       | 1.22          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3  | 3        | 1.22          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3 | 10       | 1.22          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3 | 10       | 1.22          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4  | 17       | 1.21          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4  | 19       | 1.21          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5  | 3        | 1.21          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5  | 19       | 1.21          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5  | 8        | 1.21          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5  | 16       | 1.21          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5   | 14       | 1.21          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6   | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2  | 15       | 1.21          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2  | 15       | 1.21          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1' | 18       | 1.21          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61 | 3        | 1.21          |
| (1,1277) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:C5  | 1:53:A:A:C6  | 1:53:A:A:N6  | 7        | 1.21          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2  | 19       | 1.21          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1  | 16       | 1.21          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1   | 9        | 1.21          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1  | 9        | 1.21          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 10       | 1.21          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 14       | 1.21          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 16       | 1.21          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 2        | 1.21          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2  | 6        | 1.21          |
| (1,1041) | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2  | 12       | 1.21          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8 | 5        | 1.21          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8 | 2        | 1.21          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8 | 10       | 1.21          |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5   | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8  | 19       | 1.21          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8  | 10       | 1.21          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8  | 14       | 1.21          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 5        | 1.21          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 12       | 1.21          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 5        | 1.21          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 8        | 1.21          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 20       | 1.21          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 15       | 1.21          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 11       | 1.21          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 5        | 1.21          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 2        | 1.21          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 3        | 1.21          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 18       | 1.21          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 14       | 1.21          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 3        | 1.21          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 20       | 1.21          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 20       | 1.21          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 8        | 1.21          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1'  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 1        | 1.21          |
| (1,397)  | 1:20:A:A:C1'  | 1:20:A:A:N9  | 1:20:A:A:C4  | 1:20:A:A:N3   | 8        | 1.21          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 10       | 1.21          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 20       | 1.21          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 12       | 1.21          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 6        | 1.21          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 14       | 1.2           |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 16       | 1.2           |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 7        | 1.2           |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 1        | 1.2           |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 9        | 1.2           |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 18       | 1.2           |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 20       | 1.2           |
| (1,2089) | 1:8:A:U:C2    | 1:8:A:U:N3   | 1:8:A:U:C4   | 1:8:A:U:O4    | 14       | 1.2           |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 11       | 1.2           |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 12       | 1.2           |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 12       | 1.2           |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 15       | 1.2           |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 1        | 1.2           |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 6        | 1.2           |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 8        | 1.2           |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 15       | 1.2           |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 3        | 1.2           |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 13       | 1.2           |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 5        | 1.2           |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 5        | 1.2           |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 11       | 1.2           |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 20       | 1.2           |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 20       | 1.2           |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 8        | 1.2           |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 18       | 1.2           |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 7        | 1.2           |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 5        | 1.2           |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 10       | 1.2           |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 11       | 1.2           |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 14       | 1.2           |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,975)  | 1:51:A:G:N3   | 1:51:A:G:C2  | 1:51:A:G:N2  | 1:51:A:G:H21 | 3        | 1.2           |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21 | 4        | 1.2           |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8  | 3        | 1.2           |
| (1,758)  | 1:91:A:G:C5   | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C8  | 9        | 1.2           |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8  | 9        | 1.2           |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 17       | 1.2           |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8  | 2        | 1.2           |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8 | 2        | 1.2           |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8 | 7        | 1.2           |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8  | 2        | 1.2           |
| (1,616)  | 1:66:A:A:C6   | 1:66:A:A:C5  | 1:66:A:A:N7  | 1:66:A:A:C8  | 13       | 1.2           |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8  | 1        | 1.2           |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5   | 11       | 1.2           |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3 | 15       | 1.2           |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3 | 18       | 1.2           |
| (1,433)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N3  | 8        | 1.2           |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3  | 2        | 1.2           |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3  | 8        | 1.2           |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3  | 13       | 1.2           |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5   | 13       | 1.2           |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3 | 8        | 1.2           |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4  | 11       | 1.19          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4  | 16       | 1.19          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5  | 15       | 1.19          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5  | 19       | 1.19          |
| (1,2207) | 1:92:A:C:H41  | 1:92:A:C:N4  | 1:92:A:C:C4  | 1:92:A:C:C5  | 13       | 1.19          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5  | 20       | 1.19          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5   | 5        | 1.19          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2  | 2        | 1.19          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2  | 5        | 1.19          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5  | 5        | 1.19          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3   | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1' | 7        | 1.19          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3   | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1' | 10       | 1.19          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61 | 4        | 1.19          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61 | 13       | 1.19          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61 | 19       | 1.19          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61 | 20       | 1.19          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1  | 19       | 1.19          |
| (1,1122) | 1:33:A:G:C5   | 1:33:A:G:C6  | 1:33:A:G:N1  | 1:33:A:G:H1  | 3        | 1.19          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2 | 12       | 1.19          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 3        | 1.19          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 6        | 1.19          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 17       | 1.19          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2 | 19       | 1.19          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 3        | 1.19          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 11       | 1.19          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2  | 12       | 1.19          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2  | 9        | 1.19          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 8        | 1.19          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 4        | 1.19          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 12       | 1.19          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 17       | 1.19          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 14       | 1.19          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 8        | 1.19          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8  | 8        | 1.19          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8  | 14       | 1.19          |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8  | 3        | 1.19          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 5        | 1.19          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 1        | 1.19          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 16       | 1.19          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 8        | 1.19          |
| (1,727)  | 1:27:A:G:C5   | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8   | 8        | 1.19          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 8        | 1.19          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 11       | 1.19          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 12       | 1.19          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 17       | 1.19          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 9        | 1.19          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 15       | 1.19          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 8        | 1.19          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 18       | 1.19          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 12       | 1.19          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 14       | 1.19          |
| (1,419)  | 1:61:A:G:C1'  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3   | 1        | 1.19          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 6        | 1.19          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 2        | 1.19          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 13       | 1.19          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 17       | 1.19          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 5        | 1.19          |
| (1,138)  | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8  | 1:21:A:G:H8   | 19       | 1.19          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 20       | 1.19          |
| (1,2258) | 1:28:A:C:C2   | 1:28:A:C:N3  | 1:28:A:C:C4  | 1:28:A:C:N4   | 18       | 1.18          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 6        | 1.18          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 19       | 1.18          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 12       | 1.18          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 2        | 1.18          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 7        | 1.18          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 14       | 1.18          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 3        | 1.18          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 19       | 1.18          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6   | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 1        | 1.18          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 4        | 1.18          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 2        | 1.18          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 2        | 1.18          |
| (1,1703) | 1:5:A:C:C5    | 1:5:A:C:C6   | 1:5:A:C:N1   | 1:5:A:C:C1'   | 7        | 1.18          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3   | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 8        | 1.18          |
| (1,1685) | 1:93:A:C:N3   | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C1'  | 5        | 1.18          |
| (1,1672) | 1:69:A:C:N3   | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C1'  | 10       | 1.18          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3   | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 4        | 1.18          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 4        | 1.18          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 8        | 1.18          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 12       | 1.18          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 14       | 1.18          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61 | 10       | 1.18          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2  | 8        | 1.18          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2  | 13       | 1.18          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1  | 18       | 1.18          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2 | 5        | 1.18          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2 | 10       | 1.18          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2 | 17       | 1.18          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 3        | 1.18          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 17       | 1.18          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 12       | 1.18          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 17       | 1.18          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 19       | 1.18          |
| (1,1041) | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2  | 11       | 1.18          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 10       | 1.18          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 7        | 1.18          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8 | 3        | 1.18          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8 | 9        | 1.18          |
| (1,778)  | 1:355:A:G:C5  | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C8 | 20       | 1.18          |
| (1,766)  | 1:107:A:G:C5  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 2        | 1.18          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8  | 7        | 1.18          |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8  | 4        | 1.18          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 16       | 1.18          |
| (1,723)  | 1:21:A:G:C5   | 1:21:A:G:C4  | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8  | 19       | 1.18          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8 | 6        | 1.18          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8  | 7        | 1.18          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8  | 10       | 1.18          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8  | 11       | 1.18          |
| (1,456)  | 1:2:A:M7G:N9  | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:N7 | 1:2:A:M7G:C5 | 20       | 1.18          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3 | 10       | 1.18          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3  | 10       | 1.18          |
| (1,432)  | 1:89:A:G:C1'  | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N3  | 15       | 1.18          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3  | 10       | 1.18          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3  | 3        | 1.18          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3  | 14       | 1.18          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3  | 17       | 1.18          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3  | 14       | 1.18          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5 | 14       | 1.18          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5  | 14       | 1.18          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5  | 16       | 1.18          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5   | 8        | 1.18          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5   | 20       | 1.18          |
| (1,158)  | 1:58:A:A:C4   | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C8  | 1:58:A:A:H8  | 16       | 1.18          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3 | 3        | 1.18          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3 | 9        | 1.18          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3  | 8        | 1.18          |
| (1,2278) | 1:93:A:C:C2   | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:N4  | 5        | 1.17          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4  | 19       | 1.17          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5  | 6        | 1.17          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5  | 15       | 1.17          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5  | 19       | 1.17          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5   | 4        | 1.17          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,2138) | 1:90:A:U:N1   | 1:90:A:U:C2  | 1:90:A:U:N3  | 1:90:A:U:H3   | 16       | 1.17          |
| (1,2138) | 1:90:A:U:N1   | 1:90:A:U:C2  | 1:90:A:U:N3  | 1:90:A:U:H3   | 18       | 1.17          |
| (1,1860) | 1:57:A:C:C6   | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:O2   | 4        | 1.17          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 7        | 1.17          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 11       | 1.17          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 18       | 1.17          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3   | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 16       | 1.17          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3   | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1'  | 12       | 1.17          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 16       | 1.17          |
| (1,1279) | 1:58:A:A:C4   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:C6  | 1:58:A:A:N6   | 16       | 1.17          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 2        | 1.17          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 15       | 1.17          |
| (1,1130) | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C6  | 1:67:A:G:N1  | 1:67:A:G:H1   | 7        | 1.17          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 8        | 1.17          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 12       | 1.17          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 14       | 1.17          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 1        | 1.17          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 12       | 1.17          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 14       | 1.17          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 15       | 1.17          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 12       | 1.17          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 13       | 1.17          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 14       | 1.17          |
| (1,978)  | 1:67:A:G:N3   | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2  | 1:67:A:G:H21  | 8        | 1.17          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8  | 4        | 1.17          |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8  | 1        | 1.17          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 1        | 1.17          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 4        | 1.17          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 17       | 1.17          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 9        | 1.17          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 6        | 1.17          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 9        | 1.17          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 18       | 1.17          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 5        | 1.17          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 13       | 1.17          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 7        | 1.17          |
| (1,418)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:N3   | 9        | 1.17          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 5        | 1.17          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 19       | 1.17          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 19       | 1.17          |
| (1,2278) | 1:93:A:C:C2   | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:N4   | 1        | 1.16          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 13       | 1.16          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 5        | 1.16          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41  | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 8        | 1.16          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 12       | 1.16          |
| (1,1881) | 1:94:A:U:C6   | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:O2   | 15       | 1.16          |
| (1,1867) | 1:69:A:C:C6   | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:O2   | 2        | 1.16          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 10       | 1.16          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 18       | 1.16          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 3        | 1.16          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 20       | 1.16          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1738) | 1:70:A:U:C5   | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1'  | 16       | 1.16          |
| (1,1729) | 1:56:A:C:C5   | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 20       | 1.16          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 13       | 1.16          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3   | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1'  | 2        | 1.16          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 7        | 1.16          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 12       | 1.16          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 12       | 1.16          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 16       | 1.16          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 8        | 1.16          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 1        | 1.16          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 7        | 1.16          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 14       | 1.16          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 20       | 1.16          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 19       | 1.16          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 6        | 1.16          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 19       | 1.16          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 13       | 1.16          |
| (1,983)  | 1:91:A:G:N3   | 1:91:A:G:C2  | 1:91:A:G:N2  | 1:91:A:G:H21  | 15       | 1.16          |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21  | 6        | 1.16          |
| (1,805)  | 1:52:A:G:N9   | 1:52:A:G:C4  | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2   | 7        | 1.16          |
| (1,778)  | 1:355:A:G:C5  | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C8  | 4        | 1.16          |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8  | 12       | 1.16          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 12       | 1.16          |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5   | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8   | 15       | 1.16          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 20       | 1.16          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 3        | 1.16          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 7        | 1.16          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 19       | 1.16          |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 15       | 1.16          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 13       | 1.16          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 7        | 1.16          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 10       | 1.16          |
| (1,402)  | 1:27:A:G:C1'  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3   | 3        | 1.16          |
| (1,402)  | 1:27:A:G:C1'  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3   | 11       | 1.16          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 19       | 1.16          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 6        | 1.16          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 16       | 1.16          |
| (1,286)  | 1:53:A:A:C1'  | 1:53:A:A:N9  | 1:53:A:A:C8  | 1:53:A:A:N7   | 7        | 1.16          |
| (1,179)  | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 1:103:A:G:H8  | 15       | 1.16          |
| (1,154)  | 1:51:A:G:C4   | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8  | 1:51:A:G:H8   | 6        | 1.16          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 13       | 1.16          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 14       | 1.16          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 13       | 1.16          |
| (1,2279) | 1:95:A:C:C2   | 1:95:A:C:N3  | 1:95:A:C:C4  | 1:95:A:C:N4   | 13       | 1.15          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 1        | 1.15          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 12       | 1.15          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 5        | 1.15          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 16       | 1.15          |
| (1,2203) | 1:71:A:C:H41  | 1:71:A:C:N4  | 1:71:A:C:C4  | 1:71:A:C:C5   | 13       | 1.15          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 4        | 1.15          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 8        | 1.15          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 11       | 1.15          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41  | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 18       | 1.15          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6   | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 18       | 1.15          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 18       | 1.15          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 19       | 1.15          |
| (1,1751) | 1:94:A:U:C5   | 1:94:A:U:C6  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 8        | 1.15          |
| (1,1729) | 1:56:A:C:C5   | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 15       | 1.15          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 9        | 1.15          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 18       | 1.15          |
| (1,1672) | 1:69:A:C:N3   | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C1'  | 8        | 1.15          |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 3        | 1.15          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 10       | 1.15          |
| (1,1165) | 1:51:A:G:N3   | 1:51:A:G:C2  | 1:51:A:G:N1  | 1:51:A:G:H1   | 20       | 1.15          |
| (1,1122) | 1:33:A:G:C5   | 1:33:A:G:C6  | 1:33:A:G:N1  | 1:33:A:G:H1   | 2        | 1.15          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 2        | 1.15          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 6        | 1.15          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 10       | 1.15          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 14       | 1.15          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 6        | 1.15          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 17       | 1.15          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 10       | 1.15          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 11       | 1.15          |
| (1,1038) | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2   | 15       | 1.15          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 1        | 1.15          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 2        | 1.15          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 5        | 1.15          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 18       | 1.15          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 12       | 1.15          |
| (1,967)  | 1:27:A:G:N3   | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2  | 1:27:A:G:H21  | 20       | 1.15          |
| (1,795)  | 1:33:A:G:N9   | 1:33:A:G:C4  | 1:33:A:G:N3  | 1:33:A:G:C2   | 8        | 1.15          |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 3        | 1.15          |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 16       | 1.15          |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 19       | 1.15          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 13       | 1.15          |
| (1,723)  | 1:21:A:G:C5   | 1:21:A:G:C4  | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8   | 8        | 1.15          |
| (1,718)  | 1:12:A:G:C5   | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8   | 15       | 1.15          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 1        | 1.15          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 11       | 1.15          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 3        | 1.15          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 13       | 1.15          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 9        | 1.15          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 1        | 1.15          |
| (1,453)  | 1:355:A:G:C1' | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3  | 19       | 1.15          |
| (1,440)  | 1:105:A:G:C1' | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N3  | 16       | 1.15          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 2        | 1.15          |
| (1,436)  | 1:98:A:G:C1'  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N3   | 1        | 1.15          |
| (1,432)  | 1:89:A:G:C1'  | 1:89:A:G:N9  | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N3   | 5        | 1.15          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 20       | 1.15          |
| (1,412)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:N3   | 6        | 1.15          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 17       | 1.15          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 12       | 1.15          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,179)  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 1:103:A:G:H8  | 20       | 1.15          |
| (1,139)  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8  | 1:22:A:G:H8   | 13       | 1.15          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 17       | 1.15          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 8        | 1.14          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 20       | 1.14          |
| (1,2260) | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:N4   | 1        | 1.14          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2   | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 20       | 1.14          |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41 | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 12       | 1.14          |
| (1,2202) | 1:69:A:C:H41 | 1:69:A:C:N4  | 1:69:A:C:C4  | 1:69:A:C:C5   | 7        | 1.14          |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41 | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 6        | 1.14          |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41 | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 15       | 1.14          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41 | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 17       | 1.14          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 4        | 1.14          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41 | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 16       | 1.14          |
| (1,1860) | 1:57:A:C:C6  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:O2   | 18       | 1.14          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 9        | 1.14          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 20       | 1.14          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 1        | 1.14          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 13       | 1.14          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 14       | 1.14          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1'  | 18       | 1.14          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 7        | 1.14          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 16       | 1.14          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5 | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 9        | 1.14          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5 | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 13       | 1.14          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5  | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 4        | 1.14          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 1        | 1.14          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 7        | 1.14          |
| (1,1327) | 1:34:A:A:C5  | 1:34:A:A:C6  | 1:34:A:A:N6  | 1:34:A:A:H61  | 17       | 1.14          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 7        | 1.14          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 9        | 1.14          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 5        | 1.14          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 6        | 1.14          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 11       | 1.14          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 20       | 1.14          |
| (1,1176) | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:H1  | 16       | 1.14          |
| (1,1130) | 1:67:A:G:C5  | 1:67:A:G:C6  | 1:67:A:G:N1  | 1:67:A:G:H1   | 6        | 1.14          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 4        | 1.14          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 19       | 1.14          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 9        | 1.14          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 19       | 1.14          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 5        | 1.14          |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 14       | 1.14          |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 16       | 1.14          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 16       | 1.14          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 17       | 1.14          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 16       | 1.14          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3 | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 3        | 1.14          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3 | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 2        | 1.14          |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21  | 11       | 1.14          |
| (1,758)  | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C8   | 10       | 1.14          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,758)  | 1:91:A:G:C5   | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C8   | 20       | 1.14          |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5   | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8   | 3        | 1.14          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 2        | 1.14          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 3        | 1.14          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 17       | 1.14          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 14       | 1.14          |
| (1,601)  | 1:34:A:A:C6   | 1:34:A:A:C5  | 1:34:A:A:N7  | 1:34:A:A:C8   | 14       | 1.14          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 3        | 1.14          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 11       | 1.14          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 17       | 1.14          |
| (1,402)  | 1:27:A:G:C1'  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3   | 2        | 1.14          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 2        | 1.14          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 7        | 1.14          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 7        | 1.14          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 1        | 1.14          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 5        | 1.14          |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4  | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8  | 12       | 1.14          |
| (1,179)  | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 1:103:A:G:H8  | 8        | 1.14          |
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8   | 16       | 1.14          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 16       | 1.14          |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6   | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 12       | 1.14          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 3        | 1.13          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 12       | 1.13          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 15       | 1.13          |
| (1,2195) | 1:48:A:C:H41  | 1:48:A:C:N4  | 1:48:A:C:C4  | 1:48:A:C:C5   | 8        | 1.13          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41  | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 9        | 1.13          |
| (1,2184) | 1:9:A:C:H41   | 1:9:A:C:N4   | 1:9:A:C:C4   | 1:9:A:C:C5    | 9        | 1.13          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 6        | 1.13          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 19       | 1.13          |
| (1,1815) | 1:93:A:C:N3   | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5  | 1:93:A:C:H5   | 13       | 1.13          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 9        | 1.13          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 10       | 1.13          |
| (1,1685) | 1:93:A:C:N3   | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C1'  | 4        | 1.13          |
| (1,1653) | 1:30:A:C:N3   | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 19       | 1.13          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 3        | 1.13          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 6        | 1.13          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 15       | 1.13          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 9        | 1.13          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 16       | 1.13          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 18       | 1.13          |
| (1,1130) | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C6  | 1:67:A:G:N1  | 1:67:A:G:H1   | 20       | 1.13          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 6        | 1.13          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 9        | 1.13          |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 1        | 1.13          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 20       | 1.13          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 17       | 1.13          |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21  | 14       | 1.13          |
| (1,804)  | 1:51:A:G:N9   | 1:51:A:G:C4  | 1:51:A:G:N3  | 1:51:A:G:C2   | 3        | 1.13          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 2        | 1.13          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 13       | 1.13          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5  | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 16       | 1.13          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,778)  | 1:355:A:G:C5  | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C8  | 19       | 1.13          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 17       | 1.13          |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8  | 16       | 1.13          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 5        | 1.13          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 15       | 1.13          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 3        | 1.13          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 11       | 1.13          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 19       | 1.13          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 5        | 1.13          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 13       | 1.13          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 18       | 1.13          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 19       | 1.13          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 10       | 1.13          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 3        | 1.13          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 3        | 1.13          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 4        | 1.13          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 3        | 1.13          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 15       | 1.13          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 7        | 1.13          |
| (1,433)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N3   | 10       | 1.13          |
| (1,422)  | 1:67:A:G:C1'  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N3   | 15       | 1.13          |
| (1,411)  | 1:47:A:G:C1'  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3   | 2        | 1.13          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 11       | 1.13          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 11       | 1.13          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 13       | 1.13          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 16       | 1.13          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 18       | 1.13          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 1        | 1.13          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 18       | 1.13          |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6   | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 16       | 1.13          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 7        | 1.12          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 1        | 1.12          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 2        | 1.12          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 2        | 1.12          |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41  | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 20       | 1.12          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41  | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 7        | 1.12          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 10       | 1.12          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 6        | 1.12          |
| (1,1881) | 1:94:A:U:C6   | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:O2   | 16       | 1.12          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 17       | 1.12          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 9        | 1.12          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 10       | 1.12          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 16       | 1.12          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 1        | 1.12          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 5        | 1.12          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 10       | 1.12          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3   | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 17       | 1.12          |
| (1,1672) | 1:69:A:C:N3   | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C1'  | 13       | 1.12          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3   | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1'  | 4        | 1.12          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3   | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1'  | 16       | 1.12          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 5        | 1.12          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5   | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 13       | 1.12          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 12       | 1.12          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 12       | 1.12          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 18       | 1.12          |
| (1,1136) | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C6  | 1:98:A:G:N1  | 1:98:A:G:H1   | 6        | 1.12          |
| (1,1130) | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C6  | 1:67:A:G:N1  | 1:67:A:G:H1   | 14       | 1.12          |
| (1,1071) | 1:355:A:G:C4  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2  | 18       | 1.12          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 4        | 1.12          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 10       | 1.12          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 18       | 1.12          |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 15       | 1.12          |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 18       | 1.12          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 13       | 1.12          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 20       | 1.12          |
| (1,1041) | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2   | 17       | 1.12          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 8        | 1.12          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 8        | 1.12          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 9        | 1.12          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 20       | 1.12          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 11       | 1.12          |
| (1,975)  | 1:51:A:G:N3   | 1:51:A:G:C2  | 1:51:A:G:N2  | 1:51:A:G:H21  | 9        | 1.12          |
| (1,817)  | 1:77:A:A:N9   | 1:77:A:A:C4  | 1:77:A:A:N3  | 1:77:A:A:C2   | 13       | 1.12          |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8  | 9        | 1.12          |
| (1,762)  | 1:100:A:A:C5  | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C8  | 1        | 1.12          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 4        | 1.12          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 5        | 1.12          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 4        | 1.12          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 13       | 1.12          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 17       | 1.12          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 14       | 1.12          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 13       | 1.12          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 14       | 1.12          |
| (1,601)  | 1:34:A:A:C6   | 1:34:A:A:C5  | 1:34:A:A:N7  | 1:34:A:A:C8   | 3        | 1.12          |
| (1,441)  | 1:107:A:G:C1' | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N3  | 4        | 1.12          |
| (1,423)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:N3   | 1        | 1.12          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 3        | 1.12          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 6        | 1.12          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 16       | 1.12          |
| (1,138)  | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8  | 1:21:A:G:H8   | 8        | 1.12          |
| (1,138)  | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8  | 1:21:A:G:H8   | 10       | 1.12          |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6   | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 1        | 1.12          |
| (1,2278) | 1:93:A:C:C2   | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:N4   | 4        | 1.11          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 5        | 1.11          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 10       | 1.11          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 3        | 1.11          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 5        | 1.11          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 9        | 1.11          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 18       | 1.11          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 9        | 1.11          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 11       | 1.11          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 12       | 1.11          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41 | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 19       | 1.11          |
| (1,2190) | 1:30:A:C:H41 | 1:30:A:C:N4  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:C5   | 1        | 1.11          |
| (1,1889) | 1:110:A:C:C6 | 1:110:A:C:N1 | 1:110:A:C:C2 | 1:110:A:C:O2  | 4        | 1.11          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 12       | 1.11          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 16       | 1.11          |
| (1,1860) | 1:57:A:C:C6  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:O2   | 12       | 1.11          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 1        | 1.11          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 12       | 1.11          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 13       | 1.11          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 14       | 1.11          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 19       | 1.11          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 11       | 1.11          |
| (1,1751) | 1:94:A:U:C5  | 1:94:A:U:C6  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 17       | 1.11          |
| (1,1751) | 1:94:A:U:C5  | 1:94:A:U:C6  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 18       | 1.11          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5   | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 3        | 1.11          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5   | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 7        | 1.11          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5   | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 19       | 1.11          |
| (1,1685) | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C1'  | 18       | 1.11          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 12       | 1.11          |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 3        | 1.11          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5 | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 2        | 1.11          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5 | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 10       | 1.11          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5  | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 6        | 1.11          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 16       | 1.11          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 5        | 1.11          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 11       | 1.11          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 7        | 1.11          |
| (1,1152) | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N1  | 1:12:A:G:H1   | 20       | 1.11          |
| (1,1130) | 1:67:A:G:C5  | 1:67:A:G:C6  | 1:67:A:G:N1  | 1:67:A:G:H1   | 9        | 1.11          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 10       | 1.11          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 4        | 1.11          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 16       | 1.11          |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 13       | 1.11          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 9        | 1.11          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 10       | 1.11          |
| (1,1041) | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2   | 13       | 1.11          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 18       | 1.11          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3 | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 3        | 1.11          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3 | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 18       | 1.11          |
| (1,971)  | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2  | 1:35:A:G:H21  | 8        | 1.11          |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21  | 5        | 1.11          |
| (1,833)  | 1:116:A:G:N9 | 1:116:A:G:C4 | 1:116:A:G:N3 | 1:116:A:G:C2  | 12       | 1.11          |
| (1,817)  | 1:77:A:A:N9  | 1:77:A:A:C4  | 1:77:A:A:N3  | 1:77:A:A:C2   | 14       | 1.11          |
| (1,792)  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2   | 7        | 1.11          |
| (1,778)  | 1:355:A:G:C5 | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C8  | 7        | 1.11          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5 | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8  | 6        | 1.11          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5 | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8  | 10       | 1.11          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 9        | 1.11          |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5  | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8   | 8        | 1.11          |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8   | 5        | 1.11          |
| (1,734)  | 1:43:A:G:C5  | 1:43:A:G:C4  | 1:43:A:G:N9  | 1:43:A:G:C8   | 9        | 1.11          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 16       | 1.11          |
| (1,724)  | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8   | 16       | 1.11          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 7        | 1.11          |
| (1,637)  | 1:111:A:A:C6  | 1:111:A:A:C5 | 1:111:A:A:N7 | 1:111:A:A:C8  | 9        | 1.11          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 14       | 1.11          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 8        | 1.11          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 17       | 1.11          |
| (1,454)  | 1:357:A:G:C1' | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N3  | 8        | 1.11          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 9        | 1.11          |
| (1,422)  | 1:67:A:G:C1'  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N3   | 17       | 1.11          |
| (1,411)  | 1:47:A:G:C1'  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3   | 7        | 1.11          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 10       | 1.11          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 3        | 1.11          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 4        | 1.11          |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 12       | 1.11          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 6        | 1.11          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 12       | 1.11          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 20       | 1.11          |
| (1,347)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:C5   | 2        | 1.11          |
| (1,347)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:C5   | 10       | 1.11          |
| (1,347)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:C5   | 17       | 1.11          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 15       | 1.11          |
| (1,151)  | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 1:47:A:G:H8   | 2        | 1.11          |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6   | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 4        | 1.11          |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6   | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 8        | 1.11          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 2        | 1.1           |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 11       | 1.1           |
| (1,2259) | 1:29:A:C:C2   | 1:29:A:C:N3  | 1:29:A:C:C4  | 1:29:A:C:N4   | 6        | 1.1           |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 11       | 1.1           |
| (1,2210) | 1:99:A:C:H41  | 1:99:A:C:N4  | 1:99:A:C:C4  | 1:99:A:C:C5   | 9        | 1.1           |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 20       | 1.1           |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 9        | 1.1           |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41  | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 2        | 1.1           |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 6        | 1.1           |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41  | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 14       | 1.1           |
| (1,2089) | 1:8:A:U:C2    | 1:8:A:U:N3   | 1:8:A:U:C4   | 1:8:A:U:O4    | 4        | 1.1           |
| (1,2089) | 1:8:A:U:C2    | 1:8:A:U:N3   | 1:8:A:U:C4   | 1:8:A:U:O4    | 6        | 1.1           |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 20       | 1.1           |
| (1,1854) | 1:41:A:U:C6   | 1:41:A:U:N1  | 1:41:A:U:C2  | 1:41:A:U:O2   | 8        | 1.1           |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 3        | 1.1           |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 17       | 1.1           |
| (1,1738) | 1:70:A:U:C5   | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1'  | 5        | 1.1           |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5   | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 18       | 1.1           |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 12       | 1.1           |
| (1,1673) | 1:70:A:U:N3   | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1'  | 1        | 1.1           |
| (1,1673) | 1:70:A:U:N3   | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1'  | 18       | 1.1           |
| (1,1672) | 1:69:A:C:N3   | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C1'  | 6        | 1.1           |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 14       | 1.1           |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 18       | 1.1           |
| (1,1335) | 1:66:A:A:C5   | 1:66:A:A:C6  | 1:66:A:A:N6  | 1:66:A:A:H61  | 7        | 1.1           |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 8        | 1.1           |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 18       | 1.1           |
| (1,1176) | 1:103:A:G:N3  | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:H1  | 2        | 1.1           |
| (1,1152) | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N1  | 1:12:A:G:H1   | 14       | 1.1           |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 13       | 1.1           |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 14       | 1.1           |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 5        | 1.1           |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 15       | 1.1           |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 2        | 1.1           |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 5        | 1.1           |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 6        | 1.1           |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 5        | 1.1           |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 6        | 1.1           |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 5        | 1.1           |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 19       | 1.1           |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 7        | 1.1           |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 16       | 1.1           |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 7        | 1.1           |
| (1,975)  | 1:51:A:G:N3   | 1:51:A:G:C2  | 1:51:A:G:N2  | 1:51:A:G:H21  | 6        | 1.1           |
| (1,970)  | 1:33:A:G:N3   | 1:33:A:G:C2  | 1:33:A:G:N2  | 1:33:A:G:H21  | 3        | 1.1           |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 20       | 1.1           |
| (1,795)  | 1:33:A:G:N9   | 1:33:A:G:C4  | 1:33:A:G:N3  | 1:33:A:G:C2   | 13       | 1.1           |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8  | 13       | 1.1           |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5   | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8   | 14       | 1.1           |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8   | 7        | 1.1           |
| (1,734)  | 1:43:A:G:C5   | 1:43:A:G:C4  | 1:43:A:G:N9  | 1:43:A:G:C8   | 5        | 1.1           |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 8        | 1.1           |
| (1,723)  | 1:21:A:G:C5   | 1:21:A:G:C4  | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8   | 11       | 1.1           |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 17       | 1.1           |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 8        | 1.1           |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 4        | 1.1           |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 6        | 1.1           |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 5        | 1.1           |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 8        | 1.1           |
| (1,433)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N3   | 6        | 1.1           |
| (1,393)  | 1:12:A:G:C1'  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N3   | 5        | 1.1           |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 1        | 1.1           |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 4        | 1.1           |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 4        | 1.1           |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 7        | 1.1           |
| (1,347)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:C5   | 18       | 1.1           |
| (1,179)  | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8 | 1:103:A:G:H8  | 2        | 1.1           |
| (1,151)  | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 1:47:A:G:H8   | 6        | 1.1           |
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8   | 11       | 1.1           |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 5        | 1.1           |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6   | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 5        | 1.1           |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6   | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 13       | 1.1           |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 8        | 1.09          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 14       | 1.09          |
| (1,2260) | 1:30:A:C:C2   | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:N4   | 18       | 1.09          |
| (1,2258) | 1:28:A:C:C2   | 1:28:A:C:N3  | 1:28:A:C:C4  | 1:28:A:C:N4   | 15       | 1.09          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 8        | 1.09          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 11       | 1.09          |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41  | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 14       | 1.09          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41  | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 6        | 1.09          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41  | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 16       | 1.09          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41  | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 9        | 1.09          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 18       | 1.09          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6   | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 9        | 1.09          |
| (1,1810) | 1:84:A:C:N3   | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:C5  | 1:84:A:C:H5   | 17       | 1.09          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5    | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 15       | 1.09          |
| (1,1650) | 1:24:A:C:N3   | 1:24:A:C:C2  | 1:24:A:C:N1  | 1:24:A:C:C1'  | 4        | 1.09          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 1        | 1.09          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5   | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 7        | 1.09          |
| (1,1327) | 1:34:A:A:C5   | 1:34:A:A:C6  | 1:34:A:A:N6  | 1:34:A:A:H61  | 4        | 1.09          |
| (1,1279) | 1:58:A:A:C4   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:C6  | 1:58:A:A:N6   | 17       | 1.09          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 3        | 1.09          |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 10       | 1.09          |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 20       | 1.09          |
| (1,1041) | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2   | 19       | 1.09          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 15       | 1.09          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 11       | 1.09          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 13       | 1.09          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3  | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 1        | 1.09          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 1        | 1.09          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 9        | 1.09          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 16       | 1.09          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 17       | 1.09          |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21  | 13       | 1.09          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8  | 19       | 1.09          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 8        | 1.09          |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8   | 13       | 1.09          |
| (1,758)  | 1:91:A:G:C5   | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C8   | 2        | 1.09          |
| (1,744)  | 1:61:A:G:C5   | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8   | 19       | 1.09          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 19       | 1.09          |
| (1,734)  | 1:43:A:G:C5   | 1:43:A:G:C4  | 1:43:A:G:N9  | 1:43:A:G:C8   | 1        | 1.09          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 7        | 1.09          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 7        | 1.09          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 3        | 1.09          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 6        | 1.09          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 8        | 1.09          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 12       | 1.09          |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 17       | 1.09          |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 20       | 1.09          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 12       | 1.09          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 14       | 1.09          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 1        | 1.09          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 15       | 1.09          |
| (1,399)  | 1:22:A:G:C1'  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3   | 18       | 1.09          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 11       | 1.09          |
| (1,298)  | 1:78:A:G:C1'  | 1:78:A:G:N9  | 1:78:A:G:C8  | 1:78:A:G:N7   | 18       | 1.09          |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4  | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8  | 4        | 1.09          |
| (1,154)  | 1:51:A:G:C4   | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8  | 1:51:A:G:H8   | 9        | 1.09          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8   | 13       | 1.09          |
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8   | 19       | 1.09          |
| (1,2278) | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:N4   | 13       | 1.08          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 5        | 1.08          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 10       | 1.08          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2  | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 15       | 1.08          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 18       | 1.08          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41 | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 13       | 1.08          |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41 | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 17       | 1.08          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 11       | 1.08          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41 | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 2        | 1.08          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41 | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 4        | 1.08          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41 | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 16       | 1.08          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 4        | 1.08          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 5        | 1.08          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 10       | 1.08          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 1        | 1.08          |
| (1,1854) | 1:41:A:U:C6  | 1:41:A:U:N1  | 1:41:A:U:C2  | 1:41:A:U:O2   | 19       | 1.08          |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5  | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 10       | 1.08          |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5  | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 19       | 1.08          |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 4        | 1.08          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5  | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 8        | 1.08          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5  | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 20       | 1.08          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3   | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 14       | 1.08          |
| (1,1136) | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C6  | 1:98:A:G:N1  | 1:98:A:G:H1   | 17       | 1.08          |
| (1,1122) | 1:33:A:G:C5  | 1:33:A:G:C6  | 1:33:A:G:N1  | 1:33:A:G:H1   | 11       | 1.08          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5  | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 1        | 1.08          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 18       | 1.08          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 20       | 1.08          |
| (1,1074) | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 2        | 1.08          |
| (1,1063) | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N3 | 1:105:A:G:C2 | 1:105:A:G:N2  | 16       | 1.08          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 19       | 1.08          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 19       | 1.08          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 4        | 1.08          |
| (1,1017) | 1:78:A:G:N1  | 1:78:A:G:C2  | 1:78:A:G:N2  | 1:78:A:G:H22  | 20       | 1.08          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 2        | 1.08          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 16       | 1.08          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3 | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 8        | 1.08          |
| (1,980)  | 1:82:A:G:N3  | 1:82:A:G:C2  | 1:82:A:G:N2  | 1:82:A:G:H21  | 6        | 1.08          |
| (1,975)  | 1:51:A:G:N3  | 1:51:A:G:C2  | 1:51:A:G:N2  | 1:51:A:G:H21  | 4        | 1.08          |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21  | 9        | 1.08          |
| (1,828)  | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2  | 1        | 1.08          |
| (1,828)  | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2  | 16       | 1.08          |
| (1,828)  | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2  | 19       | 1.08          |
| (1,817)  | 1:77:A:A:N9  | 1:77:A:A:C4  | 1:77:A:A:N3  | 1:77:A:A:C2   | 6        | 1.08          |
| (1,817)  | 1:77:A:A:N9  | 1:77:A:A:C4  | 1:77:A:A:N3  | 1:77:A:A:C2   | 19       | 1.08          |
| (1,779)  | 1:357:A:G:C5 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8  | 1        | 1.08          |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5  | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8   | 18       | 1.08          |
| (1,740)  | 1:52:A:G:C5  | 1:52:A:G:C4  | 1:52:A:G:N9  | 1:52:A:G:C8   | 20       | 1.08          |
| (1,739)  | 1:51:A:G:C5  | 1:51:A:G:C4  | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8   | 8        | 1.08          |
| (1,719)  | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C8   | 4        | 1.08          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 8        | 1.08          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 9        | 1.08          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 11       | 1.08          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 16       | 1.08          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 18       | 1.08          |
| (1,628)  | 1:91:A:G:C6   | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:N7  | 1:91:A:G:C8   | 9        | 1.08          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 17       | 1.08          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 1        | 1.08          |
| (1,589)  | 1:15:A:A:C6   | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:N7  | 1:15:A:A:C8   | 4        | 1.08          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 16       | 1.08          |
| (1,419)  | 1:61:A:G:C1'  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3   | 16       | 1.08          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 2        | 1.08          |
| (1,374)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:C5  | 19       | 1.08          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 17       | 1.08          |
| (1,347)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:C5   | 4        | 1.08          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 5        | 1.08          |
| (1,154)  | 1:51:A:G:C4   | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8  | 1:51:A:G:H8   | 3        | 1.08          |
| (1,151)  | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 1:47:A:G:H8   | 1        | 1.08          |
| (1,142)  | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8  | 1:27:A:G:H8   | 13       | 1.08          |
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8   | 4        | 1.08          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 19       | 1.08          |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6   | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 15       | 1.08          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 10       | 1.08          |
| (1,2279) | 1:95:A:C:C2   | 1:95:A:C:N3  | 1:95:A:C:C4  | 1:95:A:C:N4   | 2        | 1.07          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 9        | 1.07          |
| (1,2260) | 1:30:A:C:C2   | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:N4   | 16       | 1.07          |
| (1,2259) | 1:29:A:C:C2   | 1:29:A:C:N3  | 1:29:A:C:C4  | 1:29:A:C:N4   | 11       | 1.07          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 1        | 1.07          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 3        | 1.07          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 7        | 1.07          |
| (1,2187) | 1:24:A:C:H41  | 1:24:A:C:N4  | 1:24:A:C:C4  | 1:24:A:C:C5   | 13       | 1.07          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 17       | 1.07          |
| (1,1881) | 1:94:A:U:C6   | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:O2   | 7        | 1.07          |
| (1,1881) | 1:94:A:U:C6   | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:O2   | 18       | 1.07          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 16       | 1.07          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6   | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 4        | 1.07          |
| (1,1750) | 1:93:A:C:C5   | 1:93:A:C:C6  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C1'  | 17       | 1.07          |
| (1,1729) | 1:56:A:C:C5   | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 5        | 1.07          |
| (1,1729) | 1:56:A:C:C5   | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 8        | 1.07          |
| (1,1723) | 1:40:A:C:C5   | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 7        | 1.07          |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3  | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 8        | 1.07          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 3        | 1.07          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 17       | 1.07          |
| (1,1166) | 1:52:A:G:N3   | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N1  | 1:52:A:G:H1   | 17       | 1.07          |
| (1,1152) | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N1  | 1:12:A:G:H1   | 6        | 1.07          |
| (1,1152) | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N1  | 1:12:A:G:H1   | 16       | 1.07          |
| (1,1151) | 1:3:A:G:N3    | 1:3:A:G:C2   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 17       | 1.07          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 15       | 1.07          |
| (1,1074) | 1:2:A:M7G:C6  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 15       | 1.07          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 18       | 1.07          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 3        | 1.07          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4   | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2   | 11       | 1.07          |
| (1,1041) | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2   | 7        | 1.07          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 14       | 1.07          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 19       | 1.07          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 9        | 1.07          |
| (1,965)  | 1:22:A:G:N3   | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2  | 1:22:A:G:H21  | 8        | 1.07          |
| (1,804)  | 1:51:A:G:N9   | 1:51:A:G:C4  | 1:51:A:G:N3  | 1:51:A:G:C2   | 9        | 1.07          |
| (1,804)  | 1:51:A:G:N9   | 1:51:A:G:C4  | 1:51:A:G:N3  | 1:51:A:G:C2   | 14       | 1.07          |
| (1,778)  | 1:355:A:G:C5  | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C8  | 15       | 1.07          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 10       | 1.07          |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 14       | 1.07          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 2        | 1.07          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 12       | 1.07          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 18       | 1.07          |
| (1,730)  | 1:33:A:G:C5   | 1:33:A:G:C4  | 1:33:A:G:N9  | 1:33:A:G:C8   | 5        | 1.07          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 4        | 1.07          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 2        | 1.07          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 15       | 1.07          |
| (1,628)  | 1:91:A:G:C6   | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:N7  | 1:91:A:G:C8   | 18       | 1.07          |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 1        | 1.07          |
| (1,607)  | 1:49:A:A:C6   | 1:49:A:A:C5  | 1:49:A:A:N7  | 1:49:A:A:C8   | 8        | 1.07          |
| (1,589)  | 1:15:A:A:C6   | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:N7  | 1:15:A:A:C8   | 11       | 1.07          |
| (1,453)  | 1:355:A:G:C1' | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3  | 16       | 1.07          |
| (1,441)  | 1:107:A:G:C1' | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N3  | 7        | 1.07          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 6        | 1.07          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 7        | 1.07          |
| (1,436)  | 1:98:A:G:C1'  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N3   | 9        | 1.07          |
| (1,430)  | 1:87:A:G:C1'  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N3   | 6        | 1.07          |
| (1,424)  | 1:73:A:A:C1'  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N3   | 3        | 1.07          |
| (1,424)  | 1:73:A:A:C1'  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N3   | 4        | 1.07          |
| (1,419)  | 1:61:A:G:C1'  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3   | 12       | 1.07          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 3        | 1.07          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 16       | 1.07          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 10       | 1.07          |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4  | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8  | 7        | 1.07          |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4  | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8  | 16       | 1.07          |
| (1,159)  | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8  | 1:61:A:G:H8   | 1        | 1.07          |
| (1,151)  | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 1:47:A:G:H8   | 10       | 1.07          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3   | 17       | 1.07          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 20       | 1.06          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 4        | 1.06          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 6        | 1.06          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 16       | 1.06          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 8        | 1.06          |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41  | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 4        | 1.06          |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41  | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 16       | 1.06          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41  | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 17       | 1.06          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41  | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 11       | 1.06          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41  | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 15       | 1.06          |
| (1,2135) | 1:81:A:U:N1   | 1:81:A:U:C2  | 1:81:A:U:N3  | 1:81:A:U:H3   | 4        | 1.06          |
| (1,2135) | 1:81:A:U:N1   | 1:81:A:U:C2  | 1:81:A:U:N3  | 1:81:A:U:H3   | 15       | 1.06          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,2135) | 1:81:A:U:N1  | 1:81:A:U:C2  | 1:81:A:U:N3  | 1:81:A:U:H3  | 18       | 1.06          |
| (1,1889) | 1:110:A:C:C6 | 1:110:A:C:N1 | 1:110:A:C:C2 | 1:110:A:C:O2 | 12       | 1.06          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2 | 13       | 1.06          |
| (1,1881) | 1:94:A:U:C6  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:O2  | 1        | 1.06          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2  | 3        | 1.06          |
| (1,1751) | 1:94:A:U:C5  | 1:94:A:U:C6  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1' | 1        | 1.06          |
| (1,1751) | 1:94:A:U:C5  | 1:94:A:U:C6  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1' | 7        | 1.06          |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5  | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1' | 17       | 1.06          |
| (1,1671) | 1:68:A:C:N3  | 1:68:A:C:C2  | 1:68:A:C:N1  | 1:68:A:C:C1' | 1        | 1.06          |
| (1,1671) | 1:68:A:C:N3  | 1:68:A:C:C2  | 1:68:A:C:N1  | 1:68:A:C:C1' | 15       | 1.06          |
| (1,1663) | 1:55:A:C:N3  | 1:55:A:C:C2  | 1:55:A:C:N1  | 1:55:A:C:C1' | 7        | 1.06          |
| (1,1652) | 1:29:A:C:N3  | 1:29:A:C:C2  | 1:29:A:C:N1  | 1:29:A:C:C1' | 6        | 1.06          |
| (1,1651) | 1:28:A:C:N3  | 1:28:A:C:C2  | 1:28:A:C:N1  | 1:28:A:C:C1' | 8        | 1.06          |
| (1,1650) | 1:24:A:C:N3  | 1:24:A:C:C2  | 1:24:A:C:N1  | 1:24:A:C:C1' | 14       | 1.06          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5  | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61 | 1        | 1.06          |
| (1,1341) | 1:88:A:A:C5  | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:N6  | 1:88:A:A:H61 | 2        | 1.06          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61 | 2        | 1.06          |
| (1,1326) | 1:26:A:A:C5  | 1:26:A:A:C6  | 1:26:A:A:N6  | 1:26:A:A:H61 | 10       | 1.06          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2  | 7        | 1.06          |
| (1,1152) | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N1  | 1:12:A:G:H1  | 2        | 1.06          |
| (1,1152) | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N1  | 1:12:A:G:H1  | 8        | 1.06          |
| (1,1136) | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C6  | 1:98:A:G:N1  | 1:98:A:G:H1  | 1        | 1.06          |
| (1,1136) | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C6  | 1:98:A:G:N1  | 1:98:A:G:H1  | 15       | 1.06          |
| (1,1113) | 1:3:A:G:C5   | 1:3:A:G:C6   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1   | 11       | 1.06          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2 | 14       | 1.06          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2  | 11       | 1.06          |
| (1,1047) | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2  | 14       | 1.06          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4  | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 2        | 1.06          |
| (1,971)  | 1:35:A:G:N3  | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2  | 1:35:A:G:H21 | 13       | 1.06          |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21 | 4        | 1.06          |
| (1,818)  | 1:78:A:G:N9  | 1:78:A:G:C4  | 1:78:A:G:N3  | 1:78:A:G:C2  | 15       | 1.06          |
| (1,776)  | 1:353:A:G:C5 | 1:353:A:G:C4 | 1:353:A:G:N9 | 1:353:A:G:C8 | 12       | 1.06          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5 | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8 | 9        | 1.06          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5 | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8 | 12       | 1.06          |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5 | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8 | 14       | 1.06          |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5 | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8 | 18       | 1.06          |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5  | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8  | 10       | 1.06          |
| (1,745)  | 1:65:A:A:C5  | 1:65:A:A:C4  | 1:65:A:A:N9  | 1:65:A:A:C8  | 15       | 1.06          |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8  | 13       | 1.06          |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8  | 17       | 1.06          |
| (1,734)  | 1:43:A:G:C5  | 1:43:A:G:C4  | 1:43:A:G:N9  | 1:43:A:G:C8  | 14       | 1.06          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5  | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8  | 10       | 1.06          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5  | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8  | 2        | 1.06          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 18       | 1.06          |
| (1,632)  | 1:100:A:A:C6 | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:N7 | 1:100:A:A:C8 | 15       | 1.06          |
| (1,628)  | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:N7  | 1:91:A:G:C8  | 1        | 1.06          |
| (1,628)  | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:N7  | 1:91:A:G:C8  | 16       | 1.06          |
| (1,626)  | 1:88:A:A:C6  | 1:88:A:A:C5  | 1:88:A:A:N7  | 1:88:A:A:C8  | 4        | 1.06          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6  | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8  | 7        | 1.06          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6  | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8  | 9        | 1.06          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6  | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8  | 10       | 1.06          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 11       | 1.06          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 19       | 1.06          |
| (1,589)  | 1:15:A:A:C6   | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:N7  | 1:15:A:A:C8   | 18       | 1.06          |
| (1,434)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:N3   | 16       | 1.06          |
| (1,424)  | 1:73:A:A:C1'  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N3   | 6        | 1.06          |
| (1,419)  | 1:61:A:G:C1'  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3   | 6        | 1.06          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 11       | 1.06          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 10       | 1.06          |
| (1,374)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:C5  | 4        | 1.06          |
| (1,374)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:C5  | 7        | 1.06          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 19       | 1.06          |
| (1,275)  | 1:33:A:G:C1'  | 1:33:A:G:N9  | 1:33:A:G:C8  | 1:33:A:G:N7   | 2        | 1.06          |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4  | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8  | 13       | 1.06          |
| (1,176)  | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8  | 1:98:A:G:H8   | 20       | 1.06          |
| (1,159)  | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8  | 1:61:A:G:H8   | 16       | 1.06          |
| (1,142)  | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8  | 1:27:A:G:H8   | 18       | 1.06          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 11       | 1.06          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 12       | 1.06          |
| (1,2279) | 1:95:A:C:C2   | 1:95:A:C:N3  | 1:95:A:C:C4  | 1:95:A:C:N4   | 16       | 1.05          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 3        | 1.05          |
| (1,2276) | 1:84:A:C:C2   | 1:84:A:C:N3  | 1:84:A:C:C4  | 1:84:A:C:N4   | 18       | 1.05          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2   | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 17       | 1.05          |
| (1,2260) | 1:30:A:C:C2   | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:N4   | 9        | 1.05          |
| (1,2258) | 1:28:A:C:C2   | 1:28:A:C:N3  | 1:28:A:C:C4  | 1:28:A:C:N4   | 2        | 1.05          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2    | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 13       | 1.05          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 1        | 1.05          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41  | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 1        | 1.05          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 14       | 1.05          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 17       | 1.05          |
| (1,2190) | 1:30:A:C:H41  | 1:30:A:C:N4  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:C5   | 15       | 1.05          |
| (1,2138) | 1:90:A:U:N1   | 1:90:A:U:C2  | 1:90:A:U:N3  | 1:90:A:U:H3   | 1        | 1.05          |
| (1,2089) | 1:8:A:U:C2    | 1:8:A:U:N3   | 1:8:A:U:C4   | 1:8:A:U:O4    | 16       | 1.05          |
| (1,1889) | 1:110:A:C:C6  | 1:110:A:C:N1 | 1:110:A:C:C2 | 1:110:A:C:O2  | 13       | 1.05          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 3        | 1.05          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 8        | 1.05          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 11       | 1.05          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 15       | 1.05          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6  | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 16       | 1.05          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6   | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 19       | 1.05          |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5   | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 3        | 1.05          |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5   | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 16       | 1.05          |
| (1,1723) | 1:40:A:C:C5   | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 5        | 1.05          |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3  | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 7        | 1.05          |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3  | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 15       | 1.05          |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3   | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 10       | 1.05          |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3   | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 17       | 1.05          |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3   | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 18       | 1.05          |
| (1,1651) | 1:28:A:C:N3   | 1:28:A:C:C2  | 1:28:A:C:N1  | 1:28:A:C:C1'  | 3        | 1.05          |
| (1,1651) | 1:28:A:C:N3   | 1:28:A:C:C2  | 1:28:A:C:N1  | 1:28:A:C:C1'  | 4        | 1.05          |
| (1,1650) | 1:24:A:C:N3   | 1:24:A:C:C2  | 1:24:A:C:N1  | 1:24:A:C:C1'  | 17       | 1.05          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5  | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 20       | 1.05          |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5   | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 5        | 1.05          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5   | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 9        | 1.05          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5   | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 19       | 1.05          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 6        | 1.05          |
| (1,1325) | 1:20:A:A:C5   | 1:20:A:A:C6  | 1:20:A:A:N6  | 1:20:A:A:H61  | 20       | 1.05          |
| (1,1323) | 1:15:A:A:C5   | 1:15:A:A:C6  | 1:15:A:A:N6  | 1:15:A:A:H61  | 1        | 1.05          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4   | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 4        | 1.05          |
| (1,1152) | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N1  | 1:12:A:G:H1   | 17       | 1.05          |
| (1,1122) | 1:33:A:G:C5   | 1:33:A:G:C6  | 1:33:A:G:N1  | 1:33:A:G:H1   | 1        | 1.05          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 1        | 1.05          |
| (1,1074) | 1:2:A:M7G:C6  | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 20       | 1.05          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 13       | 1.05          |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2   | 12       | 1.05          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 14       | 1.05          |
| (1,1043) | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N3  | 1:27:A:G:C2  | 1:27:A:G:N2   | 20       | 1.05          |
| (1,1041) | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2   | 16       | 1.05          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 9        | 1.05          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 3        | 1.05          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 20       | 1.05          |
| (1,987)  | 1:105:A:G:N3  | 1:105:A:G:C2 | 1:105:A:G:N2 | 1:105:A:G:H21 | 16       | 1.05          |
| (1,984)  | 1:98:A:G:N3   | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 1:98:A:G:H21  | 1        | 1.05          |
| (1,984)  | 1:98:A:G:N3   | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 1:98:A:G:H21  | 10       | 1.05          |
| (1,970)  | 1:33:A:G:N3   | 1:33:A:G:C2  | 1:33:A:G:N2  | 1:33:A:G:H21  | 7        | 1.05          |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21  | 1        | 1.05          |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21  | 12       | 1.05          |
| (1,776)  | 1:353:A:G:C5  | 1:353:A:G:C4 | 1:353:A:G:N9 | 1:353:A:G:C8  | 4        | 1.05          |
| (1,764)  | 1:103:A:G:C5  | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C8  | 3        | 1.05          |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8  | 10       | 1.05          |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5   | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8   | 4        | 1.05          |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 13       | 1.05          |
| (1,745)  | 1:65:A:A:C5   | 1:65:A:A:C4  | 1:65:A:A:N9  | 1:65:A:A:C8   | 7        | 1.05          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 6        | 1.05          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 16       | 1.05          |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6   | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8   | 10       | 1.05          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 20       | 1.05          |
| (1,592)  | 1:20:A:A:C6   | 1:20:A:A:C5  | 1:20:A:A:N7  | 1:20:A:A:C8   | 19       | 1.05          |
| (1,456)  | 1:2:A:M7G:N9  | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:N7 | 1:2:A:M7G:C5  | 13       | 1.05          |
| (1,441)  | 1:107:A:G:C1' | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N3  | 18       | 1.05          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 12       | 1.05          |
| (1,436)  | 1:98:A:G:C1'  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N3   | 15       | 1.05          |
| (1,419)  | 1:61:A:G:C1'  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3   | 13       | 1.05          |
| (1,402)  | 1:27:A:G:C1'  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3   | 1        | 1.05          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 2        | 1.05          |
| (1,377)  | 1:111:A:A:C1' | 1:111:A:A:N9 | 1:111:A:A:C4 | 1:111:A:A:C5  | 15       | 1.05          |
| (1,369)  | 1:96:A:A:C1'  | 1:96:A:A:N9  | 1:96:A:A:C4  | 1:96:A:A:C5   | 7        | 1.05          |
| (1,363)  | 1:78:A:G:C1'  | 1:78:A:G:N9  | 1:78:A:G:C4  | 1:78:A:G:C5   | 18       | 1.05          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 5        | 1.05          |
| (1,347)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:C5   | 3        | 1.05          |
| (1,347)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:C5   | 14       | 1.05          |
| (1,298)  | 1:78:A:G:C1'  | 1:78:A:G:N9  | 1:78:A:G:C8  | 1:78:A:G:N7   | 9        | 1.05          |
| (1,262)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7    | 10       | 1.05          |

Continued on next page...

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,180)  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8 | 1:105:A:G:H8  | 16       | 1.05          |
| (1,139)  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8  | 1:22:A:G:H8   | 7        | 1.05          |
| (1,139)  | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8  | 1:22:A:G:H8   | 11       | 1.05          |
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8   | 6        | 1.05          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3  | 4        | 1.05          |
| (1,2267) | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N3  | 1:56:A:C:C4  | 1:56:A:C:N4   | 14       | 1.04          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 7        | 1.04          |
| (1,2260) | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:N4   | 15       | 1.04          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2   | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 10       | 1.04          |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41 | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5   | 12       | 1.04          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41 | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 10       | 1.04          |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41 | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 10       | 1.04          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 18       | 1.04          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41 | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 15       | 1.04          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41 | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 1        | 1.04          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41 | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 12       | 1.04          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41 | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 13       | 1.04          |
| (1,2135) | 1:81:A:U:N1  | 1:81:A:U:C2  | 1:81:A:U:N3  | 1:81:A:U:H3   | 8        | 1.04          |
| (1,2089) | 1:8:A:U:C2   | 1:8:A:U:N3   | 1:8:A:U:C4   | 1:8:A:U:O4    | 9        | 1.04          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 7        | 1.04          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 14       | 1.04          |
| (1,1867) | 1:69:A:C:C6  | 1:69:A:C:N1  | 1:69:A:C:C2  | 1:69:A:C:O2   | 17       | 1.04          |
| (1,1854) | 1:41:A:U:C6  | 1:41:A:U:N1  | 1:41:A:U:C2  | 1:41:A:U:O2   | 16       | 1.04          |
| (1,1853) | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C2  | 1:40:A:C:O2   | 8        | 1.04          |
| (1,1843) | 1:19:A:C:C6  | 1:19:A:C:N1  | 1:19:A:C:C2  | 1:19:A:C:O2   | 10       | 1.04          |
| (1,1723) | 1:40:A:C:C5  | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 10       | 1.04          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5   | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 11       | 1.04          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5   | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 17       | 1.04          |
| (1,1704) | 1:6:A:U:C5   | 1:6:A:U:C6   | 1:6:A:U:N1   | 1:6:A:U:C1'   | 5        | 1.04          |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 3        | 1.04          |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 5        | 1.04          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 10       | 1.04          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 12       | 1.04          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 14       | 1.04          |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 9        | 1.04          |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 11       | 1.04          |
| (1,1652) | 1:29:A:C:N3  | 1:29:A:C:C2  | 1:29:A:C:N1  | 1:29:A:C:C1'  | 11       | 1.04          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5  | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 2        | 1.04          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5  | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 3        | 1.04          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5  | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 17       | 1.04          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 13       | 1.04          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 17       | 1.04          |
| (1,1327) | 1:34:A:A:C5  | 1:34:A:A:C6  | 1:34:A:A:N6  | 1:34:A:A:H61  | 10       | 1.04          |
| (1,1279) | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:C6  | 1:58:A:A:N6   | 19       | 1.04          |
| (1,1196) | 1:53:A:A:C4  | 1:53:A:A:N3  | 1:53:A:A:C2  | 1:53:A:A:H2   | 3        | 1.04          |
| (1,1130) | 1:67:A:G:C5  | 1:67:A:G:C6  | 1:67:A:G:N1  | 1:67:A:G:H1   | 3        | 1.04          |
| (1,1130) | 1:67:A:G:C5  | 1:67:A:G:C6  | 1:67:A:G:N1  | 1:67:A:G:H1   | 10       | 1.04          |
| (1,1100) | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 2        | 1.04          |
| (1,1074) | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 8        | 1.04          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 1        | 1.04          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 10       | 1.04          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 13       | 1.04          |
| (1,1061) | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 1:101:A:G:N2  | 7        | 1.04          |
| (1,1058) | 1:89:A:G:C4   | 1:89:A:G:N3  | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2   | 18       | 1.04          |
| (1,1054) | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 1:67:A:G:N2   | 12       | 1.04          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 4        | 1.04          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 14       | 1.04          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 17       | 1.04          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 20       | 1.04          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 4        | 1.04          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3  | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 19       | 1.04          |
| (1,984)  | 1:98:A:G:N3   | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 1:98:A:G:H21  | 3        | 1.04          |
| (1,984)  | 1:98:A:G:N3   | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 1:98:A:G:H21  | 7        | 1.04          |
| (1,984)  | 1:98:A:G:N3   | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 1:98:A:G:H21  | 17       | 1.04          |
| (1,982)  | 1:89:A:G:N3   | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2  | 1:89:A:G:H21  | 10       | 1.04          |
| (1,828)  | 1:101:A:G:N9  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2  | 12       | 1.04          |
| (1,828)  | 1:101:A:G:N9  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2  | 13       | 1.04          |
| (1,778)  | 1:355:A:G:C5  | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C8  | 3        | 1.04          |
| (1,778)  | 1:355:A:G:C5  | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C8  | 16       | 1.04          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8  | 20       | 1.04          |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8  | 6        | 1.04          |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8   | 6        | 1.04          |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8   | 9        | 1.04          |
| (1,738)  | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C4  | 1:50:A:A:N9  | 1:50:A:A:C8   | 1        | 1.04          |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8   | 7        | 1.04          |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8   | 15       | 1.04          |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8   | 18       | 1.04          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8   | 17       | 1.04          |
| (1,723)  | 1:21:A:G:C5   | 1:21:A:G:C4  | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8   | 9        | 1.04          |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 11       | 1.04          |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 12       | 1.04          |
| (1,454)  | 1:357:A:G:C1' | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N3  | 11       | 1.04          |
| (1,453)  | 1:355:A:G:C1' | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3  | 13       | 1.04          |
| (1,441)  | 1:107:A:G:C1' | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N3  | 17       | 1.04          |
| (1,419)  | 1:61:A:G:C1'  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3   | 14       | 1.04          |
| (1,419)  | 1:61:A:G:C1'  | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3   | 15       | 1.04          |
| (1,394)  | 1:15:A:A:C1'  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N3   | 17       | 1.04          |
| (1,374)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:C5  | 16       | 1.04          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 10       | 1.04          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 13       | 1.04          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 18       | 1.04          |
| (1,314)  | 1:117:A:A:C1' | 1:117:A:A:N9 | 1:117:A:A:C8 | 1:117:A:A:N7  | 11       | 1.04          |
| (1,194)  | 1:357:A:G:C4  | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8 | 1:357:A:G:H8  | 18       | 1.04          |
| (1,176)  | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8  | 1:98:A:G:H8   | 9        | 1.04          |
| (1,151)  | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 1:47:A:G:H8   | 15       | 1.04          |
| (1,139)  | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8  | 1:22:A:G:H8   | 6        | 1.04          |
| (1,139)  | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8  | 1:22:A:G:H8   | 19       | 1.04          |
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8   | 1        | 1.04          |
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8   | 20       | 1.04          |
| (1,131)  | 1:2:A:M7G:C4  | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8 | 1:2:A:M7G:H81 | 5        | 1.04          |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6   | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 10       | 1.04          |
| (1,2278) | 1:93:A:C:C2   | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:N4   | 17       | 1.03          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41 | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 18       | 1.03          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 3        | 1.03          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 5        | 1.03          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 8        | 1.03          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 10       | 1.03          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41 | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 1        | 1.03          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41 | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 18       | 1.03          |
| (1,2089) | 1:8:A:U:C2   | 1:8:A:U:N3   | 1:8:A:U:C4   | 1:8:A:U:O4    | 2        | 1.03          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 1        | 1.03          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 14       | 1.03          |
| (1,1880) | 1:93:A:C:C6  | 1:93:A:C:N1  | 1:93:A:C:C2  | 1:93:A:C:O2   | 13       | 1.03          |
| (1,1836) | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C2   | 1:8:A:U:O2    | 20       | 1.03          |
| (1,1738) | 1:70:A:U:C5  | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1'  | 10       | 1.03          |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5  | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 8        | 1.03          |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5  | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 11       | 1.03          |
| (1,1723) | 1:40:A:C:C5  | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 17       | 1.03          |
| (1,1706) | 1:8:A:U:C5   | 1:8:A:U:C6   | 1:8:A:U:N1   | 1:8:A:U:C1'   | 8        | 1.03          |
| (1,1696) | 1:113:A:C:N3 | 1:113:A:C:C2 | 1:113:A:C:N1 | 1:113:A:C:C1' | 19       | 1.03          |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 14       | 1.03          |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 17       | 1.03          |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 18       | 1.03          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 20       | 1.03          |
| (1,1671) | 1:68:A:C:N3  | 1:68:A:C:C2  | 1:68:A:C:N1  | 1:68:A:C:C1'  | 18       | 1.03          |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 19       | 1.03          |
| (1,1651) | 1:28:A:C:N3  | 1:28:A:C:C2  | 1:28:A:C:N1  | 1:28:A:C:C1'  | 1        | 1.03          |
| (1,1650) | 1:24:A:C:N3  | 1:24:A:C:C2  | 1:24:A:C:N1  | 1:24:A:C:C1'  | 1        | 1.03          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5  | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 11       | 1.03          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 11       | 1.03          |
| (1,1326) | 1:26:A:A:C5  | 1:26:A:A:C6  | 1:26:A:A:N6  | 1:26:A:A:H61  | 4        | 1.03          |
| (1,1279) | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:C6  | 1:58:A:A:N6   | 1        | 1.03          |
| (1,1279) | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:C6  | 1:58:A:A:N6   | 11       | 1.03          |
| (1,1279) | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:C6  | 1:58:A:A:N6   | 15       | 1.03          |
| (1,1176) | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:H1  | 14       | 1.03          |
| (1,1138) | 1:103:A:G:C5 | 1:103:A:G:C6 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:H1  | 20       | 1.03          |
| (1,1130) | 1:67:A:G:C5  | 1:67:A:G:C6  | 1:67:A:G:N1  | 1:67:A:G:H1   | 19       | 1.03          |
| (1,1074) | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 4        | 1.03          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 2        | 1.03          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4  | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 18       | 1.03          |
| (1,1036) | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2  | 7        | 1.03          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 15       | 1.03          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3 | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 10       | 1.03          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3 | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 15       | 1.03          |
| (1,828)  | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2  | 5        | 1.03          |
| (1,828)  | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2  | 6        | 1.03          |
| (1,817)  | 1:77:A:A:N9  | 1:77:A:A:C4  | 1:77:A:A:N3  | 1:77:A:A:C2   | 3        | 1.03          |
| (1,804)  | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C4  | 1:51:A:G:N3  | 1:51:A:G:C2   | 4        | 1.03          |
| (1,804)  | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C4  | 1:51:A:G:N3  | 1:51:A:G:C2   | 6        | 1.03          |
| (1,801)  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2   | 9        | 1.03          |
| (1,778)  | 1:355:A:G:C5 | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C8  | 9        | 1.03          |
| (1,776)  | 1:353:A:G:C5 | 1:353:A:G:C4 | 1:353:A:G:N9 | 1:353:A:G:C8  | 8        | 1.03          |
| (1,776)  | 1:353:A:G:C5 | 1:353:A:G:C4 | 1:353:A:G:N9 | 1:353:A:G:C8  | 9        | 1.03          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 2        | 1.03          |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 17       | 1.03          |
| (1,749)  | 1:73:A:A:C5   | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C8   | 13       | 1.03          |
| (1,738)  | 1:50:A:A:C5   | 1:50:A:A:C4  | 1:50:A:A:N9  | 1:50:A:A:C8   | 7        | 1.03          |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8   | 8        | 1.03          |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8   | 11       | 1.03          |
| (1,730)  | 1:33:A:G:C5   | 1:33:A:G:C4  | 1:33:A:G:N9  | 1:33:A:G:C8   | 4        | 1.03          |
| (1,723)  | 1:21:A:G:C5   | 1:21:A:G:C4  | 1:21:A:G:N9  | 1:21:A:G:C8   | 15       | 1.03          |
| (1,716)  | 1:2:A:M7G:C5  | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C8  | 9        | 1.03          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8  | 20       | 1.03          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 18       | 1.03          |
| (1,589)  | 1:15:A:A:C6   | 1:15:A:A:C5  | 1:15:A:A:N7  | 1:15:A:A:C8   | 5        | 1.03          |
| (1,438)  | 1:101:A:G:C1' | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3  | 20       | 1.03          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 4        | 1.03          |
| (1,436)  | 1:98:A:G:C1'  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N3   | 10       | 1.03          |
| (1,402)  | 1:27:A:G:C1'  | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C4  | 1:27:A:G:N3   | 7        | 1.03          |
| (1,368)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:C5   | 6        | 1.03          |
| (1,368)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:C5   | 7        | 1.03          |
| (1,368)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:C5   | 18       | 1.03          |
| (1,363)  | 1:78:A:G:C1'  | 1:78:A:G:N9  | 1:78:A:G:C4  | 1:78:A:G:C5   | 9        | 1.03          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 2        | 1.03          |
| (1,347)  | 1:49:A:A:C1'  | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:C5   | 5        | 1.03          |
| (1,327)  | 1:3:A:G:C1'   | 1:3:A:G:N9   | 1:3:A:G:C4   | 1:3:A:G:C5    | 15       | 1.03          |
| (1,314)  | 1:117:A:A:C1' | 1:117:A:A:N9 | 1:117:A:A:C8 | 1:117:A:A:N7  | 13       | 1.03          |
| (1,159)  | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8  | 1:61:A:G:H8   | 12       | 1.03          |
| (1,154)  | 1:51:A:G:C4   | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8  | 1:51:A:G:H8   | 18       | 1.03          |
| (1,154)  | 1:51:A:G:C4   | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8  | 1:51:A:G:H8   | 20       | 1.03          |
| (1,151)  | 1:47:A:G:C4   | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 1:47:A:G:H8   | 7        | 1.03          |
| (1,142)  | 1:27:A:G:C4   | 1:27:A:G:N9  | 1:27:A:G:C8  | 1:27:A:G:H8   | 3        | 1.03          |
| (1,139)  | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8  | 1:22:A:G:H8   | 12       | 1.03          |
| (1,2279) | 1:95:A:C:C2   | 1:95:A:C:N3  | 1:95:A:C:C4  | 1:95:A:C:N4   | 5        | 1.02          |
| (1,2271) | 1:68:A:C:C2   | 1:68:A:C:N3  | 1:68:A:C:C4  | 1:68:A:C:N4   | 5        | 1.02          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 14       | 1.02          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 2        | 1.02          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 4        | 1.02          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41  | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 7        | 1.02          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41  | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 6        | 1.02          |
| (1,2089) | 1:8:A:U:C2    | 1:8:A:U:N3   | 1:8:A:U:C4   | 1:8:A:U:O4    | 13       | 1.02          |
| (1,1889) | 1:110:A:C:C6  | 1:110:A:C:N1 | 1:110:A:C:C2 | 1:110:A:C:O2  | 3        | 1.02          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6   | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 4        | 1.02          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6   | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 5        | 1.02          |
| (1,1860) | 1:57:A:C:C6   | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:O2   | 3        | 1.02          |
| (1,1859) | 1:56:A:C:C6   | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:O2   | 7        | 1.02          |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5   | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 13       | 1.02          |
| (1,1715) | 1:24:A:C:C5   | 1:24:A:C:C6  | 1:24:A:C:N1  | 1:24:A:C:C1'  | 17       | 1.02          |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3  | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 9        | 1.02          |
| (1,1693) | 1:109:A:C:N3  | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C1' | 19       | 1.02          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3   | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 6        | 1.02          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3   | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 18       | 1.02          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3   | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1'  | 15       | 1.02          |
| (1,1651) | 1:28:A:C:N3   | 1:28:A:C:C2  | 1:28:A:C:N1  | 1:28:A:C:C1'  | 19       | 1.02          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5   | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 12       | 1.02          |
| (1,1343) | 1:97:A:A:C5   | 1:97:A:A:C6  | 1:97:A:A:N6  | 1:97:A:A:H61  | 14       | 1.02          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 5        | 1.02          |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61  | 19       | 1.02          |
| (1,1327) | 1:34:A:A:C5   | 1:34:A:A:C6  | 1:34:A:A:N6  | 1:34:A:A:H61  | 20       | 1.02          |
| (1,1176) | 1:103:A:G:N3  | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:H1  | 1        | 1.02          |
| (1,1152) | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N1  | 1:12:A:G:H1   | 18       | 1.02          |
| (1,1136) | 1:98:A:G:C5   | 1:98:A:G:C6  | 1:98:A:G:N1  | 1:98:A:G:H1   | 9        | 1.02          |
| (1,1135) | 1:91:A:G:C5   | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:N1  | 1:91:A:G:H1   | 2        | 1.02          |
| (1,1135) | 1:91:A:G:C5   | 1:91:A:G:C6  | 1:91:A:G:N1  | 1:91:A:G:H1   | 16       | 1.02          |
| (1,1117) | 1:22:A:G:C5   | 1:22:A:G:C6  | 1:22:A:G:N1  | 1:22:A:G:H1   | 4        | 1.02          |
| (1,1113) | 1:3:A:G:C5    | 1:3:A:G:C6   | 1:3:A:G:N1   | 1:3:A:G:H1    | 16       | 1.02          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4  | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 9        | 1.02          |
| (1,1060) | 1:98:A:G:C4   | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2   | 4        | 1.02          |
| (1,1052) | 1:52:A:G:C4   | 1:52:A:G:N3  | 1:52:A:G:C2  | 1:52:A:G:N2   | 20       | 1.02          |
| (1,1041) | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2   | 8        | 1.02          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 3        | 1.02          |
| (1,1040) | 1:21:A:G:C4   | 1:21:A:G:N3  | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2   | 9        | 1.02          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 10       | 1.02          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3  | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 12       | 1.02          |
| (1,984)  | 1:98:A:G:N3   | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 1:98:A:G:H21  | 4        | 1.02          |
| (1,964)  | 1:21:A:G:N3   | 1:21:A:G:C2  | 1:21:A:G:N2  | 1:21:A:G:H21  | 19       | 1.02          |
| (1,860)  | 1:47:A:G:N7   | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:O6   | 2        | 1.02          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8  | 2        | 1.02          |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5   | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8   | 17       | 1.02          |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 1        | 1.02          |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 5        | 1.02          |
| (1,750)  | 1:75:A:A:C5   | 1:75:A:A:C4  | 1:75:A:A:N9  | 1:75:A:A:C8   | 12       | 1.02          |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8   | 10       | 1.02          |
| (1,747)  | 1:67:A:G:C5   | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8   | 20       | 1.02          |
| (1,736)  | 1:47:A:G:C5   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8   | 11       | 1.02          |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8   | 1        | 1.02          |
| (1,735)  | 1:46:A:A:C5   | 1:46:A:A:C4  | 1:46:A:A:N9  | 1:46:A:A:C8   | 16       | 1.02          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 1        | 1.02          |
| (1,732)  | 1:35:A:G:C5   | 1:35:A:G:C4  | 1:35:A:G:N9  | 1:35:A:G:C8   | 4        | 1.02          |
| (1,628)  | 1:91:A:G:C6   | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:N7  | 1:91:A:G:C8   | 8        | 1.02          |
| (1,618)  | 1:72:A:A:C6   | 1:72:A:A:C5  | 1:72:A:A:N7  | 1:72:A:A:C8   | 5        | 1.02          |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 2        | 1.02          |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6   | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8   | 14       | 1.02          |
| (1,457)  | 1:3:A:G:N9    | 1:3:A:G:C8   | 1:3:A:G:N7   | 1:3:A:G:C5    | 17       | 1.02          |
| (1,437)  | 1:100:A:A:C1' | 1:100:A:A:N9 | 1:100:A:A:C4 | 1:100:A:A:N3  | 17       | 1.02          |
| (1,394)  | 1:15:A:A:C1'  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N3   | 15       | 1.02          |
| (1,394)  | 1:15:A:A:C1'  | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N3   | 18       | 1.02          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 17       | 1.02          |
| (1,391)  | 1:2:A:M7G:C1' | 1:2:A:M7G:N9 | 1:2:A:M7G:C4 | 1:2:A:M7G:N3  | 18       | 1.02          |
| (1,374)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:C5  | 5        | 1.02          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 8        | 1.02          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5   | 15       | 1.02          |
| (1,314)  | 1:117:A:A:C1' | 1:117:A:A:N9 | 1:117:A:A:C8 | 1:117:A:A:N7  | 1        | 1.02          |
| (1,314)  | 1:117:A:A:C1' | 1:117:A:A:N9 | 1:117:A:A:C8 | 1:117:A:A:N7  | 16       | 1.02          |
| (1,194)  | 1:357:A:G:C4  | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C8 | 1:357:A:G:H8  | 4        | 1.02          |

*Continued on next page...*

*Continued from previous page...*

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4        | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|---------------|----------|---------------|
| (1,176)  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8  | 1:98:A:G:H8   | 14       | 1.02          |
| (1,176)  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8  | 1:98:A:G:H8   | 17       | 1.02          |
| (1,151)  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C8  | 1:47:A:G:H8   | 18       | 1.02          |
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4  | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8   | 7        | 1.02          |
| (1,75)   | 1:76:A:A:C6  | 1:76:A:A:N1  | 1:76:A:A:C2  | 1:76:A:A:N3   | 3        | 1.02          |
| (1,2271) | 1:68:A:C:C2  | 1:68:A:C:N3  | 1:68:A:C:C4  | 1:68:A:C:N4   | 15       | 1.01          |
| (1,2264) | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:N4   | 12       | 1.01          |
| (1,2252) | 1:5:A:C:C2   | 1:5:A:C:N3   | 1:5:A:C:C4   | 1:5:A:C:N4    | 19       | 1.01          |
| (1,2222) | 1:24:A:C:H42 | 1:24:A:C:N4  | 1:24:A:C:C4  | 1:24:A:C:N3   | 16       | 1.01          |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41 | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5   | 2        | 1.01          |
| (1,2202) | 1:69:A:C:H41 | 1:69:A:C:N4  | 1:69:A:C:C4  | 1:69:A:C:C5   | 20       | 1.01          |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41 | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 2        | 1.01          |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41 | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5   | 7        | 1.01          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 15       | 1.01          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 19       | 1.01          |
| (1,2194) | 1:44:A:C:H41 | 1:44:A:C:N4  | 1:44:A:C:C4  | 1:44:A:C:C5   | 20       | 1.01          |
| (1,2193) | 1:40:A:C:H41 | 1:40:A:C:N4  | 1:40:A:C:C4  | 1:40:A:C:C5   | 9        | 1.01          |
| (1,2190) | 1:30:A:C:H41 | 1:30:A:C:N4  | 1:30:A:C:C4  | 1:30:A:C:C5   | 2        | 1.01          |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41 | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5   | 3        | 1.01          |
| (1,1898) | 1:5:A:C:H6   | 1:5:A:C:C6   | 1:5:A:C:N1   | 1:5:A:C:C2    | 7        | 1.01          |
| (1,1889) | 1:110:A:C:C6 | 1:110:A:C:N1 | 1:110:A:C:C2 | 1:110:A:C:O2  | 1        | 1.01          |
| (1,1889) | 1:110:A:C:C6 | 1:110:A:C:N1 | 1:110:A:C:C2 | 1:110:A:C:O2  | 17       | 1.01          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 2        | 1.01          |
| (1,1888) | 1:109:A:C:C6 | 1:109:A:C:N1 | 1:109:A:C:C2 | 1:109:A:C:O2  | 9        | 1.01          |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2   | 8        | 1.01          |
| (1,1858) | 1:55:A:C:C6  | 1:55:A:C:N1  | 1:55:A:C:C2  | 1:55:A:C:O2   | 20       | 1.01          |
| (1,1843) | 1:19:A:C:C6  | 1:19:A:C:N1  | 1:19:A:C:C2  | 1:19:A:C:O2   | 11       | 1.01          |
| (1,1751) | 1:94:A:U:C5  | 1:94:A:U:C6  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 12       | 1.01          |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5  | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 2        | 1.01          |
| (1,1725) | 1:44:A:C:C5  | 1:44:A:C:C6  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1'  | 20       | 1.01          |
| (1,1723) | 1:40:A:C:C5  | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 2        | 1.01          |
| (1,1723) | 1:40:A:C:C5  | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1'  | 18       | 1.01          |
| (1,1704) | 1:6:A:U:C5   | 1:6:A:U:C6   | 1:6:A:U:N1   | 1:6:A:U:C1'   | 20       | 1.01          |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1'  | 7        | 1.01          |
| (1,1683) | 1:90:A:U:N3  | 1:90:A:U:C2  | 1:90:A:U:N1  | 1:90:A:U:C1'  | 5        | 1.01          |
| (1,1665) | 1:57:A:C:N3  | 1:57:A:C:C2  | 1:57:A:C:N1  | 1:57:A:C:C1'  | 6        | 1.01          |
| (1,1664) | 1:56:A:C:N3  | 1:56:A:C:C2  | 1:56:A:C:N1  | 1:56:A:C:C1'  | 3        | 1.01          |
| (1,1588) | 1:30:A:C:H6  | 1:30:A:C:C6  | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C1'  | 3        | 1.01          |
| (1,1378) | 1:5:A:C:C2   | 1:5:A:C:N1   | 1:5:A:C:C6   | 1:5:A:C:H6    | 7        | 1.01          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5 | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 11       | 1.01          |
| (1,1348) | 1:349:A:A:C5 | 1:349:A:A:C6 | 1:349:A:A:N6 | 1:349:A:A:H61 | 17       | 1.01          |
| (1,1172) | 1:89:A:G:N3  | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N1  | 1:89:A:G:H1   | 16       | 1.01          |
| (1,1140) | 1:107:A:G:C5 | 1:107:A:G:C6 | 1:107:A:G:N1 | 1:107:A:G:H1  | 6        | 1.01          |
| (1,1062) | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:N3 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N2  | 3        | 1.01          |
| (1,1058) | 1:89:A:G:C4  | 1:89:A:G:N3  | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2   | 1        | 1.01          |
| (1,1050) | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 1:47:A:G:N2   | 3        | 1.01          |
| (1,995)  | 1:355:A:G:N3 | 1:355:A:G:C2 | 1:355:A:G:N2 | 1:355:A:G:H21 | 5        | 1.01          |
| (1,994)  | 1:354:A:G:N3 | 1:354:A:G:C2 | 1:354:A:G:N2 | 1:354:A:G:H21 | 4        | 1.01          |
| (1,992)  | 1:350:A:G:N3 | 1:350:A:G:C2 | 1:350:A:G:N2 | 1:350:A:G:H21 | 5        | 1.01          |
| (1,984)  | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 1:98:A:G:H21  | 2        | 1.01          |
| (1,982)  | 1:89:A:G:N3  | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2  | 1:89:A:G:H21  | 17       | 1.01          |

*Continued on next page...*

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1        | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|---------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,982)  | 1:89:A:G:N3   | 1:89:A:G:C2  | 1:89:A:G:N2  | 1:89:A:G:H21 | 20       | 1.01          |
| (1,971)  | 1:35:A:G:N3   | 1:35:A:G:C2  | 1:35:A:G:N2  | 1:35:A:G:H21 | 9        | 1.01          |
| (1,962)  | 1:12:A:G:N3   | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N2  | 1:12:A:G:H21 | 15       | 1.01          |
| (1,860)  | 1:47:A:G:N7   | 1:47:A:G:C5  | 1:47:A:G:C6  | 1:47:A:G:O6  | 15       | 1.01          |
| (1,828)  | 1:101:A:G:N9  | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N3 | 1:101:A:G:C2 | 10       | 1.01          |
| (1,801)  | 1:47:A:G:N9   | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1:47:A:G:C2  | 15       | 1.01          |
| (1,776)  | 1:353:A:G:C5  | 1:353:A:G:C4 | 1:353:A:G:N9 | 1:353:A:G:C8 | 2        | 1.01          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8 | 5        | 1.01          |
| (1,765)  | 1:105:A:G:C5  | 1:105:A:G:C4 | 1:105:A:G:N9 | 1:105:A:G:C8 | 11       | 1.01          |
| (1,733)  | 1:42:A:G:C5   | 1:42:A:G:C4  | 1:42:A:G:N9  | 1:42:A:G:C8  | 15       | 1.01          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8 | 12       | 1.01          |
| (1,638)  | 1:116:A:G:C6  | 1:116:A:G:C5 | 1:116:A:G:N7 | 1:116:A:G:C8 | 18       | 1.01          |
| (1,632)  | 1:100:A:A:C6  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:N7 | 1:100:A:A:C8 | 8        | 1.01          |
| (1,632)  | 1:100:A:A:C6  | 1:100:A:A:C5 | 1:100:A:A:N7 | 1:100:A:A:C8 | 16       | 1.01          |
| (1,628)  | 1:91:A:G:C6   | 1:91:A:G:C5  | 1:91:A:G:N7  | 1:91:A:G:C8  | 10       | 1.01          |
| (1,454)  | 1:357:A:G:C1' | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N3 | 12       | 1.01          |
| (1,454)  | 1:357:A:G:C1' | 1:357:A:G:N9 | 1:357:A:G:C4 | 1:357:A:G:N3 | 15       | 1.01          |
| (1,453)  | 1:355:A:G:C1' | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3 | 11       | 1.01          |
| (1,453)  | 1:355:A:G:C1' | 1:355:A:G:N9 | 1:355:A:G:C4 | 1:355:A:G:N3 | 12       | 1.01          |
| (1,436)  | 1:98:A:G:C1'  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N3  | 3        | 1.01          |
| (1,424)  | 1:73:A:A:C1'  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N3  | 1        | 1.01          |
| (1,424)  | 1:73:A:A:C1'  | 1:73:A:A:N9  | 1:73:A:A:C4  | 1:73:A:A:N3  | 20       | 1.01          |
| (1,374)  | 1:103:A:G:C1' | 1:103:A:G:N9 | 1:103:A:G:C4 | 1:103:A:G:C5 | 2        | 1.01          |
| (1,368)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:C5  | 8        | 1.01          |
| (1,368)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:C5  | 9        | 1.01          |
| (1,368)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:C5  | 10       | 1.01          |
| (1,368)  | 1:91:A:G:C1'  | 1:91:A:G:N9  | 1:91:A:G:C4  | 1:91:A:G:C5  | 20       | 1.01          |
| (1,358)  | 1:72:A:A:C1'  | 1:72:A:A:N9  | 1:72:A:A:C4  | 1:72:A:A:C5  | 13       | 1.01          |
| (1,353)  | 1:58:A:A:C1'  | 1:58:A:A:N9  | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5  | 6        | 1.01          |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4  | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8 | 1        | 1.01          |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4  | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8 | 8        | 1.01          |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4  | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8 | 10       | 1.01          |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4  | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8 | 17       | 1.01          |
| (1,178)  | 1:101:A:G:C4  | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8 | 1:101:A:G:H8 | 13       | 1.01          |
| (1,162)  | 1:67:A:G:C4   | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C8  | 1:67:A:G:H8  | 4        | 1.01          |
| (1,159)  | 1:61:A:G:C4   | 1:61:A:G:N9  | 1:61:A:G:C8  | 1:61:A:G:H8  | 18       | 1.01          |
| (1,154)  | 1:51:A:G:C4   | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8  | 1:51:A:G:H8  | 14       | 1.01          |
| (1,154)  | 1:51:A:G:C4   | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8  | 1:51:A:G:H8  | 16       | 1.01          |
| (1,139)  | 1:22:A:G:C4   | 1:22:A:G:N9  | 1:22:A:G:C8  | 1:22:A:G:H8  | 10       | 1.01          |
| (1,133)  | 1:12:A:G:C4   | 1:12:A:G:N9  | 1:12:A:G:C8  | 1:12:A:G:H8  | 10       | 1.01          |
| (1,102)  | 1:103:A:G:C6  | 1:103:A:G:N1 | 1:103:A:G:C2 | 1:103:A:G:N3 | 7        | 1.01          |
| (1,29)   | 1:30:A:C:C6   | 1:30:A:C:N1  | 1:30:A:C:C2  | 1:30:A:C:N3  | 4        | 1.01          |
| (1,2258) | 1:28:A:C:C2   | 1:28:A:C:N3  | 1:28:A:C:C4  | 1:28:A:C:N4  | 7        | 1.0           |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5  | 7        | 1.0           |
| (1,2208) | 1:93:A:C:H41  | 1:93:A:C:N4  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5  | 14       | 1.0           |
| (1,2205) | 1:83:A:C:H41  | 1:83:A:C:N4  | 1:83:A:C:C4  | 1:83:A:C:C5  | 20       | 1.0           |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41  | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5  | 11       | 1.0           |
| (1,2200) | 1:62:A:C:H41  | 1:62:A:C:N4  | 1:62:A:C:C4  | 1:62:A:C:C5  | 12       | 1.0           |
| (1,2186) | 1:19:A:C:H41  | 1:19:A:C:N4  | 1:19:A:C:C4  | 1:19:A:C:C5  | 17       | 1.0           |
| (1,2089) | 1:8:A:U:C2    | 1:8:A:U:N3   | 1:8:A:U:C4   | 1:8:A:U:O4   | 12       | 1.0           |
| (1,1889) | 1:110:A:C:C6  | 1:110:A:C:N1 | 1:110:A:C:C2 | 1:110:A:C:O2 | 9        | 1.0           |

Continued on next page...

Continued from previous page...

| Key      | Atom-1       | Atom-2       | Atom-3       | Atom-4       | Model ID | Violation (°) |
|----------|--------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------------|
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2  | 7        | 1.0           |
| (1,1868) | 1:70:A:U:C6  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:O2  | 20       | 1.0           |
| (1,1843) | 1:19:A:C:C6  | 1:19:A:C:N1  | 1:19:A:C:C2  | 1:19:A:C:O2  | 14       | 1.0           |
| (1,1815) | 1:93:A:C:N3  | 1:93:A:C:C4  | 1:93:A:C:C5  | 1:93:A:C:H5  | 2        | 1.0           |
| (1,1723) | 1:40:A:C:C5  | 1:40:A:C:C6  | 1:40:A:C:N1  | 1:40:A:C:C1' | 15       | 1.0           |
| (1,1715) | 1:24:A:C:C5  | 1:24:A:C:C6  | 1:24:A:C:N1  | 1:24:A:C:C1' | 1        | 1.0           |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1' | 1        | 1.0           |
| (1,1686) | 1:94:A:U:N3  | 1:94:A:U:C2  | 1:94:A:U:N1  | 1:94:A:U:C1' | 11       | 1.0           |
| (1,1673) | 1:70:A:U:N3  | 1:70:A:U:C2  | 1:70:A:U:N1  | 1:70:A:U:C1' | 15       | 1.0           |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1' | 8        | 1.0           |
| (1,1660) | 1:44:A:C:N3  | 1:44:A:C:C2  | 1:44:A:C:N1  | 1:44:A:C:C1' | 13       | 1.0           |
| (1,1328) | 1:46:A:A:C5  | 1:46:A:A:C6  | 1:46:A:A:N6  | 1:46:A:A:H61 | 10       | 1.0           |
| (1,1326) | 1:26:A:A:C5  | 1:26:A:A:C6  | 1:26:A:A:N6  | 1:26:A:A:H61 | 17       | 1.0           |
| (1,1279) | 1:58:A:A:C4  | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:C6  | 1:58:A:A:N6  | 12       | 1.0           |
| (1,1165) | 1:51:A:G:N3  | 1:51:A:G:C2  | 1:51:A:G:N1  | 1:51:A:G:H1  | 13       | 1.0           |
| (1,1152) | 1:12:A:G:N3  | 1:12:A:G:C2  | 1:12:A:G:N1  | 1:12:A:G:H1  | 4        | 1.0           |
| (1,1140) | 1:107:A:G:C5 | 1:107:A:G:C6 | 1:107:A:G:N1 | 1:107:A:G:H1 | 12       | 1.0           |
| (1,1074) | 1:2:A:M7G:C6 | 1:2:A:M7G:N1 | 1:2:A:M7G:C2 | 1:2:A:M7G:N2 | 17       | 1.0           |
| (1,1053) | 1:61:A:G:C4  | 1:61:A:G:N3  | 1:61:A:G:C2  | 1:61:A:G:N2  | 11       | 1.0           |
| (1,1041) | 1:22:A:G:C4  | 1:22:A:G:N3  | 1:22:A:G:C2  | 1:22:A:G:N2  | 3        | 1.0           |
| (1,984)  | 1:98:A:G:N3  | 1:98:A:G:C2  | 1:98:A:G:N2  | 1:98:A:G:H21 | 8        | 1.0           |
| (1,979)  | 1:78:A:G:N3  | 1:78:A:G:C2  | 1:78:A:G:N2  | 1:78:A:G:H21 | 2        | 1.0           |
| (1,975)  | 1:51:A:G:N3  | 1:51:A:G:C2  | 1:51:A:G:N2  | 1:51:A:G:H21 | 13       | 1.0           |
| (1,812)  | 1:67:A:G:N9  | 1:67:A:G:C4  | 1:67:A:G:N3  | 1:67:A:G:C2  | 9        | 1.0           |
| (1,763)  | 1:101:A:G:C5 | 1:101:A:G:C4 | 1:101:A:G:N9 | 1:101:A:G:C8 | 20       | 1.0           |
| (1,761)  | 1:98:A:G:C5  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8  | 16       | 1.0           |
| (1,755)  | 1:87:A:G:C5  | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C8  | 1        | 1.0           |
| (1,629)  | 1:96:A:A:C6  | 1:96:A:A:C5  | 1:96:A:A:N7  | 1:96:A:A:C8  | 16       | 1.0           |
| (1,613)  | 1:58:A:A:C6  | 1:58:A:A:C5  | 1:58:A:A:N7  | 1:58:A:A:C8  | 7        | 1.0           |
| (1,430)  | 1:87:A:G:C1' | 1:87:A:G:N9  | 1:87:A:G:C4  | 1:87:A:G:N3  | 14       | 1.0           |
| (1,411)  | 1:47:A:G:C1' | 1:47:A:G:N9  | 1:47:A:G:C4  | 1:47:A:G:N3  | 1        | 1.0           |
| (1,394)  | 1:15:A:A:C1' | 1:15:A:A:N9  | 1:15:A:A:C4  | 1:15:A:A:N3  | 4        | 1.0           |
| (1,347)  | 1:49:A:A:C1' | 1:49:A:A:N9  | 1:49:A:A:C4  | 1:49:A:A:C5  | 16       | 1.0           |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8 | 6        | 1.0           |
| (1,181)  | 1:107:A:G:C4 | 1:107:A:G:N9 | 1:107:A:G:C8 | 1:107:A:G:H8 | 14       | 1.0           |
| (1,176)  | 1:98:A:G:C4  | 1:98:A:G:N9  | 1:98:A:G:C8  | 1:98:A:G:H8  | 15       | 1.0           |
| (1,154)  | 1:51:A:G:C4  | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8  | 1:51:A:G:H8  | 8        | 1.0           |
| (1,154)  | 1:51:A:G:C4  | 1:51:A:G:N9  | 1:51:A:G:C8  | 1:51:A:G:H8  | 13       | 1.0           |