

**Interconversion of the *cis*-5*R*,6*S*- and *trans*-5*R*,6*R*-Thymine Glycol Lesions in Duplex DNA**

**Supporting Information**

**Revised Manuscript**

Kyle L. Brown, Travis Adams, Ashis K. Basu,<sup>§</sup> and Michael P. Stone\*

Department of Chemistry, Center in Molecular Toxicology, Vanderbilt-Ingram Cancer Center, Vanderbilt University, Nashville, Tennessee 37235, and <sup>§</sup>Department of Chemistry, University of Connecticut, Storrs, Connecticut 06269.

\*Author to whom correspondence should be addressed.

Michael P. Stone

Telephone 615-322-2589

FAX 615-322-7591

email: michael.p.stone@vanderbilt.edu

**Running Title:** *cis*-5*R*,6*S*- and *trans*-5*R*,6*R*-Thymine Glycol Lesions in DNA

Complete Citation Information for Reference 31

Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Montgomery, J. A.; Vreven, T.; Kudin, K. N.; Burant, J. C.; Millam, J. M.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Barone, V.; Mennucci, B.; Cossi, M.; Scalmani, G.; Rega, N.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Klene, M.; Li, X.; Knox, J. E.; Hratchian, H. P.; Cross, J. B.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Pomelli, J.; Ochterski, W.; Ayala, P. Y.; Morokuma, K.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Zakrzewska, V. G.; Daniels, A. D.; Farkas, O.; Rabuck, A. D.; Raghavachari, K.; Ortiz, J. V. **2004** *Gaussian, Inc., Wallingford, CT.*

**Table S1.** Resonance assignments for the unmodified 5'-G<sup>1</sup>T<sup>2</sup>G<sup>3</sup>C<sup>4</sup>G<sup>5</sup>T<sup>6</sup>G<sup>7</sup>T<sup>8</sup>T<sup>9</sup>T<sup>10</sup>G<sup>11</sup>T<sup>12</sup>-3'•5'-A<sup>13</sup>C<sup>14</sup>A<sup>15</sup>A<sup>16</sup>A<sup>17</sup>C<sup>18</sup>A<sup>19</sup>C<sup>20</sup>G<sup>21</sup>C<sup>22</sup>A<sup>23</sup>C<sup>24</sup>-3'

<i>Primary Strand</i>			<i>Complementary Strand</i>		
<i>Residue</i>	<i>Atom</i>	<i>Chemical Shift (ppm)</i>	<i>Residue</i>	<i>Atom</i>	<i>Chemical Shift (ppm)</i>
G <sup>1</sup>	H1'	5.88	A <sup>13</sup>	H1'	6.03
G <sup>1</sup>	H2'	2.50	A <sup>13</sup>	H2'	2.43
G <sup>1</sup>	H2''	2.66	A <sup>13</sup>	H2''	2.61
G <sup>1</sup>	H3'	4.68	A <sup>13</sup>	H3'	4.68
G <sup>1</sup>	H5'	4.09	A <sup>13</sup>	H4'	4.09
G <sup>1</sup>	H8	7.82	A <sup>13</sup>	H5'	3.94
T <sup>2</sup>	CH <sub>3</sub>	1.24	A <sup>13</sup>	H8	8.04
T <sup>2</sup>	H1'	5.78	C <sup>14</sup>	H1'	6.03
T <sup>2</sup>	H2'	2.08	C <sup>14</sup>	H2'	1.86
T <sup>2</sup>	H2''	2.42	C <sup>14</sup>	H2''	2.08
T <sup>2</sup>	H3	13.67	C <sup>14</sup>	H3'	4.99
T <sup>2</sup>	H3'	4.77	C <sup>14</sup>	H42	8.20
T <sup>2</sup>	H4'	4.12	C <sup>14</sup>	H5	5.34
T <sup>2</sup>	H5'	4.00	C <sup>14</sup>	H6	7.26
T <sup>2</sup>	H5''	3.95	A <sup>15</sup>	H1'	5.62
T <sup>2</sup>	H6	7.23	A <sup>15</sup>	H2	7.10
G <sup>3</sup>	H1	12.59	A <sup>15</sup>	H2'	2.59
G <sup>3</sup>	H1'	5.77	A <sup>15</sup>	H2''	2.69
G <sup>3</sup>	H2'	2.47	A <sup>15</sup>	H3'	4.89

G <sup>3</sup>	H2''	2.59	A <sup>15</sup>	H4'	4.22
G <sup>3</sup>	H22	6.38	A <sup>15</sup>	H5'	4.06
G <sup>3</sup>	H3'	4.85	A <sup>15</sup>	H62	6.04
G <sup>3</sup>	H4'	4.23	A <sup>15</sup>	H8	8.06
G <sup>3</sup>	H5'	4.07	A <sup>16</sup>	H1'	5.73
G <sup>3</sup>	H8	7.73	A <sup>16</sup>	H2	6.99
C <sup>4</sup>	H1'	5.55	A <sup>16</sup>	H2'	2.49
C <sup>4</sup>	H2'	1.89	A <sup>16</sup>	H2''	2.69
C <sup>4</sup>	H2''	2.25	A <sup>16</sup>	H3'	4.91
C <sup>4</sup>	H3'	4.69	A <sup>16</sup>	H4'	4.29
C <sup>4</sup>	H4'	4.05	A <sup>16</sup>	H5'	4.09
C <sup>4</sup>	H42	8.13	A <sup>16</sup>	H5''	4.06
C <sup>4</sup>	H5	5.15	A <sup>16</sup>	H61	7.27
C <sup>4</sup>	H5'	4.01	A <sup>16</sup>	H62	6.00
C <sup>4</sup>	H6	7.15	A <sup>16</sup>	H8	7.96
C <sup>4</sup>	H1'	5.55	A <sup>17</sup>	H1'	5.89
G <sup>5</sup>	H1	12.63	A <sup>17</sup>	H2	7.39
G <sup>5</sup>	H1'	5.81	A <sup>17</sup>	H2'	2.38
G <sup>5</sup>	H2'	2.45	A <sup>17</sup>	H2''	2.68
G <sup>5</sup>	H2''	2.63	A <sup>17</sup>	H3'	4.84
G <sup>5</sup>	H22	6.39	A <sup>17</sup>	H4'	4.09
G <sup>5</sup>	H3'	4.81	A <sup>17</sup>	H5'	4.28
G <sup>5</sup>	H4'	4.21	A <sup>17</sup>	H61	7.19
G <sup>5</sup>	H5'	3.91	A <sup>17</sup>	H8	7.89
G <sup>5</sup>	H5''	4.06	C <sup>18</sup>	H1'	5.33
G <sup>5</sup>	H8	7.72	C <sup>18</sup>	H2'	1.70

T <sup>6</sup>	CH <sub>3</sub>	1.31	C <sup>18</sup>	H2''	2.14
T <sup>6</sup>	H1'	5.66	C <sup>18</sup>	H3'	4.60
T <sup>6</sup>	H2'	1.97	C <sup>18</sup>	H4'	3.97
T <sup>6</sup>	H2''	2.36	C <sup>18</sup>	H42	7.82
T <sup>6</sup>	H3	13.46	C <sup>18</sup>	H5	5.00
T <sup>6</sup>	H3'	4.72	C <sup>18</sup>	H5'	3.85
T <sup>6</sup>	H4'	4.05	C <sup>18</sup>	H6	6.98
T <sup>6</sup>	H5'	3.99	A <sup>19</sup>	H1'	5.98
T <sup>6</sup>	H6	7.00	A <sup>19</sup>	H2	7.42
G <sup>7</sup>	H1	12.36	A <sup>19</sup>	H2'	2.47
G <sup>7</sup>	H1'	5.83	A <sup>19</sup>	H2''	2.68
G <sup>7</sup>	H2'	2.65	A <sup>19</sup>	H3'	4.83
G <sup>7</sup>	H2''	2.45	A <sup>19</sup>	H4'	3.97
G <sup>7</sup>	H22	6.36	A <sup>19</sup>	H5'	4.22
G <sup>7</sup>	H3'	4.79	A <sup>19</sup>	H61	5.80
G <sup>7</sup>	H4'	4.12	A <sup>19</sup>	H8	7.99
G <sup>7</sup>	H5'	4.23	C <sup>20</sup>	H1'	5.39
G <sup>7</sup>	H5''	4.01	C <sup>20</sup>	H2'	1.78
G <sup>7</sup>	H8	7.68	C <sup>20</sup>	H2''	2.15
T <sup>8</sup>	CH <sub>3</sub>	1.17	C <sup>20</sup>	H3'	4.83
T <sup>8</sup>	H1'	5.88	C <sup>20</sup>	H4'	3.97
T <sup>8</sup>	H2'	2.00	C <sup>20</sup>	H42	7.99
T <sup>8</sup>	H2''	1.46	C <sup>20</sup>	H5	5.02
T <sup>8</sup>	H3	13.86	C <sup>20</sup>	H6	7.04
T <sup>8</sup>	H3'	4.71	G <sup>21</sup>	H1	12.71
T <sup>8</sup>	H4'	4.02	G <sup>21</sup>	H1'	5.69

T <sup>8</sup>	H5'	4.12	G <sup>21</sup>	H2'	2.45
T <sup>8</sup>	H6	7.10	G <sup>21</sup>	H2''	2.55
T <sup>9</sup>	H1'	5.98	G <sup>21</sup>	H22	6.30
T <sup>9</sup>	H2'	2.45	G <sup>21</sup>	H3'	4.81
T <sup>9</sup>	H2''	1.57	G <sup>21</sup>	H4'	4.19
T <sup>9</sup>	H3	13.85	G <sup>21</sup>	H5'	3.98
T <sup>9</sup>	H3'	4.74	G <sup>21</sup>	H8	7.67
T <sup>9</sup>	H4'	4.07	C <sup>22</sup>	H1'	5.47
T <sup>9</sup>	H5'	4.02	C <sup>22</sup>	H2'	1.86
T <sup>9</sup>	H6	7.31	C <sup>22</sup>	H2''	2.22
T <sup>10</sup>	H1'	5.69	C <sup>22</sup>	H3'	4.67
T <sup>10</sup>	H2'	1.84	C <sup>22</sup>	H4'	4.00
T <sup>10</sup>	H2''	2.23	C <sup>22</sup>	H42	8.25
T <sup>10</sup>	H3	13.77	C <sup>22</sup>	H5	5.25
T <sup>10</sup>	H3'	4.75	C <sup>22</sup>	H6	7.19
T <sup>10</sup>	H4'	4.05	A <sup>23</sup>	H1'	6.10
T <sup>10</sup>	H5'	3.97	A <sup>23</sup>	H2	7.68
T <sup>10</sup>	H6	7.16	A <sup>23</sup>	H2'	2.53
G <sup>11</sup>	H1	12.54	A <sup>23</sup>	H2''	2.72
G <sup>11</sup>	H1'	5.93	A <sup>23</sup>	H3'	4.85
G <sup>11</sup>	H2'	2.57	A <sup>23</sup>	H4'	4.24
G <sup>11</sup>	H2''	1.50	A <sup>23</sup>	H5'	4.11
G <sup>11</sup>	H22	6.53	A <sup>23</sup>	H5''	3.92
G <sup>11</sup>	H3'	4.86	A <sup>23</sup>	H8	8.11
G <sup>11</sup>	H4'	4.26	C <sup>24</sup>	H1'	5.94
G <sup>11</sup>	H5'	3.95	C <sup>24</sup>	H2'	1.95

G <sup>11</sup>	H5''	4.10	C <sup>24</sup>	H2''	1.98
G <sup>11</sup>	H8	7.83	C <sup>24</sup>	H3'	4.33
T <sup>12</sup>	H1'	6.11	C <sup>24</sup>	H4'	3.87
T <sup>12</sup>	H2'	2.11	C <sup>24</sup>	H5	5.29
T <sup>12</sup>	H3'	4.40	C <sup>24</sup>	H6	7.25
T <sup>12</sup>	H4'	3.95			
T <sup>12</sup>	H6	7.30			

**Table S2.** Resonance assignments for the *cis*-5*R*,6*S*-thymine glycol modified 5'-  
G<sup>1</sup>T<sup>2</sup>G<sup>3</sup>C<sup>4</sup>G<sup>5</sup>T<sup>6</sup>G<sup>7</sup>T<sup>8</sup>T<sup>9</sup>T<sup>10</sup>G<sup>11</sup>T<sup>12</sup>-3'•5'-A<sup>13</sup>C<sup>14</sup>A<sup>15</sup>A<sup>16</sup>A<sup>17</sup>C<sup>18</sup>A<sup>19</sup>C<sup>20</sup>G<sup>21</sup>C<sup>22</sup>A<sup>23</sup>C<sup>24</sup>-3'

Primary Strand			Complementary Strand		
<i>Residue</i>	<i>Atom</i>	<i>Chemical Shift (ppm)</i>	<i>Residue</i>	<i>Atom</i>	<i>Chemical Shift (ppm)</i>
G <sup>1</sup>	H1'	5.87	A <sup>13</sup>	H1'	6.02
G <sup>1</sup>	H2'	2.47	A <sup>13</sup>	H2'	2.42
G <sup>1</sup>	H2''	2.64	A <sup>13</sup>	H2''	2.58
G <sup>1</sup>	H3'	4.67	A <sup>13</sup>	H3'	4.66
G <sup>1</sup>	H4'	4.07	A <sup>13</sup>	H4'	4.07
G <sup>1</sup>	H5'	3.62	A <sup>13</sup>	H5'	3.55
G <sup>1</sup>	H5''	3.60	A <sup>13</sup>	H5''	3.59
G <sup>1</sup>	H8	7.79	A <sup>13</sup>	H8	8.01
T <sup>2</sup>	H1'	5.76	C <sup>14</sup>	H1'	5.04
T <sup>2</sup>	H2'	2.04	C <sup>14</sup>	H2'	1.84
T <sup>2</sup>	H2''	2.38	C <sup>14</sup>	H2''	2.09
T <sup>2</sup>	H3	13.67	C <sup>14</sup>	H3'	4.62
T <sup>2</sup>	H3'	4.75	C <sup>14</sup>	H4'	3.93
T <sup>2</sup>	H4'	4.09	C <sup>14</sup>	H42	8.19
T <sup>2</sup>	H5'	3.98	C <sup>14</sup>	H5	5.37
T <sup>2</sup>	H6	7.20	C <sup>14</sup>	H5'	3.92
T <sup>2</sup>	CH <sub>3</sub>	1.24	C <sup>14</sup>	H6	7.25
G <sup>3</sup>	H1	12.62	A <sup>15</sup>	H1'	5.61
G <sup>3</sup>	H1'	5.75	A <sup>15</sup>	H2	7.14



G <sup>3</sup>	H2'	2.46	A <sup>15</sup>	H2'	2.57
G <sup>3</sup>	H2''	2.57	A <sup>15</sup>	H2''	2.67
G <sup>3</sup>	H22	6.36	A <sup>15</sup>	H3'	4.88
G <sup>3</sup>	H3'	4.83	A <sup>15</sup>	H4'	4.20
G <sup>3</sup>	H4'	4.22	A <sup>15</sup>	H5'	3.84
G <sup>3</sup>	H5'	3.93	A <sup>15</sup>	H5''	3.95
G <sup>3</sup>	H5''	4.00	A <sup>15</sup>	H62	6.05
G <sup>3</sup>	H8	7.71	A <sup>15</sup>	H8	8.05
C <sup>4</sup>	H1'	5.61	A <sup>16</sup>	H1'	5.71
C <sup>4</sup>	H2'	1.85	A <sup>16</sup>	H2	7.06
C <sup>4</sup>	H2''	2.25	A <sup>16</sup>	H2'	2.46
C <sup>4</sup>	H3'	4.64	A <sup>16</sup>	H2''	2.65
C <sup>4</sup>	H4'	4.04	A <sup>16</sup>	H3'	4.89
C <sup>4</sup>	H42	8.12	A <sup>16</sup>	H4'	4.26
C <sup>4</sup>	H5	5.14	A <sup>16</sup>	H5'	4.03
C <sup>4</sup>	H5'	4.00	A <sup>16</sup>	H5''	4.05
C <sup>4</sup>	H5''	4.08	A <sup>16</sup>	H61	7.31
C <sup>4</sup>	H6	7.11	A <sup>16</sup>	H62	5.87
C <sup>4</sup>	H1'	5.56	A <sup>16</sup>	H8	7.94
G <sup>5</sup>	H1	12.91	A <sup>17</sup>	H1'	5.86
G <sup>5</sup>	H1'	5.88	A <sup>17</sup>	H2	7.44
G <sup>5</sup>	H2'	2.31	A <sup>17</sup>	H2'	2.36
G <sup>5</sup>	H2''	2.48	A <sup>17</sup>	H2''	2.63
G <sup>5</sup>	H3'	4.73	A <sup>17</sup>	H3'	4.81
G <sup>5</sup>	H4'	4.15	A <sup>17</sup>	H4'	4.25
G <sup>5</sup>	H5'	3.95	A <sup>17</sup>	H5'	4.07

G <sup>5</sup>	H8	7.64	A <sup>17</sup>	H62	5.70
Tg <sup>6</sup>	H1'	5.63	A <sup>17</sup>	H8	7.86
Tg <sup>6</sup>	H2'	2.07	C <sup>18</sup>	H1'	5.53
Tg <sup>6</sup>	H2''	2.28	C <sup>18</sup>	H2'	1.71
Tg <sup>6</sup>	H3'	4.57	C <sup>18</sup>	H2''	2.19
Tg <sup>6</sup>	H4'	4.04	C <sup>18</sup>	H3'	4.57
Tg <sup>6</sup>	H5'	3.79	C <sup>18</sup>	H4'	4.00
Tg <sup>6</sup>	H5''	3.97	C <sup>18</sup>	H41	7.03
Tg <sup>6</sup>	H6 <i>cis</i>	4.58	C <sup>18</sup>	H42	7.83
Tg <sup>6</sup>	H6 <i>trans</i>	4.91	C <sup>18</sup>	H5	5.02
Tg <sup>6</sup>	CH <sub>3</sub> <i>cis</i>	0.49	C <sup>18</sup>	H5'	3.95
Tg <sup>6</sup>	CH <sub>3</sub> <i>trans</i>	1.24	C <sup>18</sup>	H5''	4.07
G <sup>7</sup>	H1	12.28	C <sup>18</sup>	H6	6.99
G <sup>7</sup>	H1'	5.91	A <sup>19</sup>	H1'	5.87
G <sup>7</sup>	H2'	2.50	A <sup>19</sup>	H2	7.46
G <sup>7</sup>	H2''	2.72	A <sup>19</sup>	H2'	2.26
G <sup>7</sup>	H22	6.52	A <sup>19</sup>	H2''	2.51
G <sup>7</sup>	H3'	4.78	A <sup>19</sup>	H3'	4.74
G <sup>7</sup>	H4'	4.27	A <sup>19</sup>	H4'	4.11
G <sup>7</sup>	H5'	3.94	A <sup>19</sup>	H5'	3.89
G <sup>7</sup>	H5''	4.02	A <sup>19</sup>	H5''	3.94
G <sup>7</sup>	H8	7.75	A <sup>19</sup>	H62	6.14
T <sup>8</sup>	H1'	5.91	A <sup>19</sup>	H8	7.83
T <sup>8</sup>	H2'	1.99	C <sup>20</sup>	H1'	5.38
T <sup>8</sup>	H2''	2.45	C <sup>20</sup>	H2'	1.86
T <sup>8</sup>	H3	13.79	C <sup>20</sup>	H2''	2.16

T <sup>8</sup>	H3'	4.73	C <sup>20</sup>	H3'	4.64
T <sup>8</sup>	H4'	4.09	C <sup>20</sup>	H4'	3.97
T <sup>8</sup>	H5'	4.02	C <sup>20</sup>	H5	5.10
T <sup>8</sup>	H6	7.12	C <sup>20</sup>	H5'	3.92
T <sup>8</sup>	CH <sub>3</sub>	1.17	C <sup>20</sup>	H6	7.12
T <sup>9</sup>	H1'	5.95	G <sup>21</sup>	H1	12.67
T <sup>9</sup>	H2'	1.99	G <sup>21</sup>	H1'	5.72
T <sup>9</sup>	H2''	2.43	G <sup>21</sup>	H2'	2.43
T <sup>9</sup>	H3	13.85	G <sup>21</sup>	H2''	2.54
T <sup>9</sup>	H3'	4.73	G <sup>21</sup>	H22	6.30
T <sup>9</sup>	H4'	4.02	G <sup>21</sup>	H3'	4.80
T <sup>9</sup>	H6	7.29	G <sup>21</sup>	H4'	4.18
T <sup>9</sup>	CH <sub>3</sub>	1.47	G <sup>21</sup>	H5'	3.86
T <sup>10</sup>	H1'	5.67	G <sup>21</sup>	H5''	3.95
T <sup>10</sup>	H2'	1.82	G <sup>21</sup>	H8	7.65
T <sup>10</sup>	H2''	2.20	C <sup>22</sup>	H1'	5.50
T <sup>10</sup>	H3	13.80	C <sup>22</sup>	H2'	1.85
T <sup>10</sup>	H3'	4.73	C <sup>22</sup>	H2''	2.22
T <sup>10</sup>	H4'	3.96	C <sup>22</sup>	H3'	4.67
T <sup>10</sup>	H5'	4.05	C <sup>22</sup>	H4'	4.00
T <sup>10</sup>	H6	7.15	C <sup>22</sup>	H42	8.25
T <sup>10</sup>	CH <sub>3</sub>	1.57	C <sup>22</sup>	H5	5.24
G <sup>11</sup>	H1	12.53	C <sup>22</sup>	H5'	4.03
G <sup>11</sup>	H1'	5.93	C <sup>22</sup>	H6	7.19
G <sup>11</sup>	H2''	2.55	A <sup>23</sup>	H1'	6.11
G <sup>11</sup>	H22	6.53	A <sup>23</sup>	H2	7.72

G <sup>11</sup>	H3'	4.84	A <sup>23</sup>	H2'	2.53
G <sup>11</sup>	H4'	4.24	A <sup>23</sup>	H2''	2.71
G <sup>11</sup>	H5'	3.97	A <sup>23</sup>	H3'	4.85
G <sup>11</sup>	H8	7.81	A <sup>23</sup>	H4'	4.23
T <sup>12</sup>	H1'	6.09	A <sup>23</sup>	H5'	3.95
T <sup>12</sup>	H2''	2.10	A <sup>23</sup>	H5''	3.99
T <sup>12</sup>	H3'	4.39	A <sup>23</sup>	H61	8.03
T <sup>12</sup>	H4'	3.93	A <sup>23</sup>	H8	8.10
T <sup>12</sup>	H5'	3.96	C <sup>24</sup>	H1'	5.95
T <sup>12</sup>	H6	7.29	C <sup>24</sup>	H2'	1.94
T <sup>12</sup>	CH <sub>3</sub>	1.50	C <sup>24</sup>	H2''	1.99
			C <sup>24</sup>	H3'	4.32
			C <sup>24</sup>	H4'	3.87
			C <sup>24</sup>	H5	5.31
			C <sup>24</sup>	H5'	4.10
			C <sup>24</sup>	H5''	3.91
			C <sup>24</sup>	H6	7.25

**Table S3.** Resonance assignments for the *cis*-5*R*,6*S*-thymine glycol modified 5'-G<sup>1</sup>T<sup>2</sup>G<sup>3</sup>C<sup>4</sup>G<sup>5</sup>T<sup>6</sup>G<sup>7</sup>T<sup>8</sup>T<sup>9</sup>T<sup>10</sup>G<sup>11</sup>T<sup>12</sup>-3'•5'-A<sup>13</sup>C<sup>14</sup>A<sup>15</sup>A<sup>16</sup>A<sup>17</sup>C<sup>18</sup>G<sup>19</sup>C<sup>20</sup>G<sup>21</sup>C<sup>22</sup>A<sup>23</sup>C<sup>24</sup>-3'

Primary Strand			Complementary Strand		
<i>Residue</i>	<i>Atom</i>	<i>Chemical Shift (ppm)</i>	<i>Residue</i>	<i>Atom</i>	<i>Chemical Shift (ppm)</i>
G <sup>1</sup>	G5'	3.63	A <sup>13</sup>	H1'	6.01
G <sup>1</sup>	H1'	5.85	A <sup>13</sup>	H2	7.82
G <sup>1</sup>	H2'	2.48	A <sup>13</sup>	H2'	2.43
G <sup>1</sup>	H2''	2.63	A <sup>13</sup>	H2''	2.58
G <sup>1</sup>	H3'	4.66	A <sup>13</sup>	H3'	4.66
G <sup>1</sup>	H4'	4.07	A <sup>13</sup>	H4'	4.07
G <sup>1</sup>	H5'	3.59	A <sup>13</sup>	H5'	3.55
G <sup>1</sup>	H5''	3.62	A <sup>13</sup>	H8	8.02
G <sup>1</sup>	H8	7.79	C <sup>14</sup>	H1'	5.02
T <sup>2</sup>	H1'	5.74	C <sup>14</sup>	H2'	1.83
T <sup>2</sup>	H2'	2.02	C <sup>14</sup>	H2''	2.07
T <sup>2</sup>	H2''	2.36	C <sup>14</sup>	H3'	4.62
T <sup>2</sup>	H3	13.62	C <sup>14</sup>	H4'	3.93
T <sup>2</sup>	H3'	4.74	C <sup>14</sup>	H5	5.35
T <sup>2</sup>	H4'	4.08	C <sup>14</sup>	H5'	3.90
T <sup>2</sup>	H5'	3.97	C <sup>14</sup>	H5''	3.88
T <sup>2</sup>	H6	7.20	C <sup>14</sup>	H6	7.25

T <sup>2</sup>	CH <sub>3</sub>	1.23	C <sup>14</sup>	H62	8.16
G <sup>3</sup>	H1	12.61	A <sup>15</sup>	H1'	5.59
G <sup>3</sup>	H1'	5.73	A <sup>15</sup>	H2	7.10
G <sup>3</sup>	H2'	2.45	A <sup>15</sup>	H2'	2.57
G <sup>3</sup>	H2''	2.54	A <sup>15</sup>	H2''	2.66
G <sup>3</sup>	H22	6.37	A <sup>15</sup>	H3'	4.88
G <sup>3</sup>	H3'	4.82	A <sup>15</sup>	H4'	4.20
G <sup>3</sup>	H4'	4.21	A <sup>15</sup>	H5'	3.84
G <sup>3</sup>	H5'	3.85	A <sup>15</sup>	H5''	3.94
G <sup>3</sup>	H8	7.71	A <sup>15</sup>	H62	6.00
C <sup>4</sup>	H1'	5.62	A <sup>15</sup>	H8	8.05
C <sup>4</sup>	H2'	1.71	A <sup>16</sup>	H1'	5.70
C <sup>4</sup>	H2''	2.19	A <sup>16</sup>	H2	7.03
C <sup>4</sup>	H3'	4.66	A <sup>16</sup>	H2'	2.46
C <sup>4</sup>	H4'	4.02	A <sup>16</sup>	H2''	2.65
C <sup>4</sup>	H42	8.10	A <sup>16</sup>	H3'	4.89
C <sup>4</sup>	H5	5.15	A <sup>16</sup>	H4'	4.26
C <sup>4</sup>	H5'	3.97	A <sup>16</sup>	H5'	4.04
C <sup>4</sup>	H5''	4.05	A <sup>16</sup>	H5''	4.05
C <sup>4</sup>	H6	7.08	A <sup>16</sup>	H61	7.29
G <sup>5</sup>	H1	12.82	A <sup>16</sup>	H62	5.82
G <sup>5</sup>	H1'	5.89	A <sup>16</sup>	H8	7.94
G <sup>5</sup>	H2'	2.40	A <sup>17</sup>	H1'	5.87
G <sup>5</sup>	H2''	2.56	A <sup>17</sup>	H2	7.47
G <sup>5</sup>	H3'	4.79	A <sup>17</sup>	H2'	2.35
G <sup>5</sup>	H4'	4.18	A <sup>17</sup>	H2''	2.62

G <sup>5</sup>	H5'	3.91	A <sup>17</sup>	H3'	4.80
G <sup>5</sup>	H5''	3.87	A <sup>17</sup>	H4'	4.25
G <sup>5</sup>	H8	7.72	A <sup>17</sup>	H5'	4.06
G <sup>5</sup>	H5'	4.10	A <sup>17</sup>	H62	5.67
Tg <sup>6</sup>	H1'	5.46	A <sup>17</sup>	H8	7.86
Tg <sup>6</sup>	H2'	2.06	C <sup>18</sup>	H1'	5.56
Tg <sup>6</sup>	H2''	2.06	C <sup>18</sup>	H2'	1.72
Tg <sup>6</sup>	H3'	4.53	C <sup>18</sup>	H2''	2.19
Tg <sup>6</sup>	H4'	4.01	C <sup>18</sup>	H3'	4.53
Tg <sup>6</sup>	H6	4.70	C <sup>18</sup>	H4'	4.01
Tg <sup>6</sup>	CH <sub>3</sub>	0.91	C <sup>18</sup>	H42	7.80
G <sup>7</sup>	H1	12.67	C <sup>18</sup>	H5	4.99
G <sup>7</sup>	H1'	5.88	C <sup>18</sup>	H5'	3.92
G <sup>7</sup>	H2'	2.49	C <sup>18</sup>	H5''	4.05
G <sup>7</sup>	H2''	2.70	C <sup>18</sup>	H6	6.96
G <sup>7</sup>	H22	6.33	G <sup>19</sup>	H1'	5.60
G <sup>7</sup>	H3'	4.77	G <sup>19</sup>	H2'	2.15
G <sup>7</sup>	H4'	4.22	G <sup>19</sup>	H2''	2.36
G <sup>7</sup>	H5'	3.84	G <sup>19</sup>	H3'	4.68
G <sup>7</sup>	H5''	3.84	G <sup>19</sup>	H4'	4.02
G <sup>7</sup>	H8	7.81	G <sup>19</sup>	H5'	3.88
T <sup>8</sup>	H1'	5.93	G <sup>19</sup>	H5''	3.92
T <sup>8</sup>	H2'	2.00	G <sup>19</sup>	H8	7.42
T <sup>8</sup>	H2''	2.45	C <sup>20</sup>	H1'	5.44
T <sup>8</sup>	H3	13.76	C <sup>20</sup>	H2'	1.89
T <sup>8</sup>	H3'	4.73	C <sup>20</sup>	H2''	2.18

T <sup>8</sup>	H4'	4.09	C <sup>20</sup>	H3'	4.66
T <sup>8</sup>	H5'	4.05	C <sup>20</sup>	H4'	3.98
T <sup>8</sup>	H5''	4.00	C <sup>20</sup>	H5	5.17
T <sup>8</sup>	H6	7.13	C <sup>20</sup>	H5'	3.88
T <sup>8</sup>	CH <sub>3</sub>	1.16	C <sup>20</sup>	H6	7.19
T <sup>9</sup>	H1'	5.96	G <sup>21</sup>	H1	12.78
T <sup>9</sup>	H2'	2.00	G <sup>21</sup>	H1'	5.73
T <sup>9</sup>	H2''	2.44	G <sup>21</sup>	H2'	2.47
T <sup>9</sup>	H3	13.84	G <sup>21</sup>	H2''	2.56
T <sup>9</sup>	H3'	4.73	G <sup>21</sup>	H22	6.30
T <sup>9</sup>	H4'	4.02	G <sup>21</sup>	H3'	4.81
T <sup>9</sup>	H5'	3.97	G <sup>21</sup>	H4'	4.20
T <sup>9</sup>	H5''	4.02	G <sup>21</sup>	H5'	3.98
T <sup>9</sup>	H6	7.30	G <sup>21</sup>	H5''	3.84
T <sup>9</sup>	CH <sub>3</sub>	1.47	G <sup>21</sup>	H8	7.72
T <sup>10</sup>	H1'	5.67	C <sup>22</sup>	H1'	5.48
T <sup>10</sup>	H2'	1.83	C <sup>22</sup>	H2'	1.84
T <sup>10</sup>	H2''	2.21	C <sup>22</sup>	H2''	2.21
T <sup>10</sup>	H3	13.76	C <sup>22</sup>	H3'	4.66
T <sup>10</sup>	H3'	4.73	C <sup>22</sup>	H4'	4.02
T <sup>10</sup>	H4'	4.05	C <sup>22</sup>	H42	8.22
T <sup>10</sup>	H5'	3.96	C <sup>22</sup>	H5	5.28
T <sup>10</sup>	H5''	3.93	C <sup>22</sup>	H6	7.19
T <sup>10</sup>	H6	7.16	A <sup>23</sup>	H1'	6.10
T <sup>10</sup>	CH <sub>3</sub>	1.57	A <sup>23</sup>	H2	7.69
G <sup>11</sup>	H1	12.50	A <sup>23</sup>	H2'	2.53



G <sup>11</sup>	H1'	5.91	A <sup>23</sup>	H2''	2.71
G <sup>11</sup>	H2'	2.54	A <sup>23</sup>	H3'	4.85
G <sup>11</sup>	H22	6.49	A <sup>23</sup>	H4'	4.24
G <sup>11</sup>	H3'	4.84	A <sup>23</sup>	H5'	3.99
G <sup>11</sup>	H4'	4.24	A <sup>23</sup>	H5''	3.94
G <sup>11</sup>	H5'	3.97	A <sup>23</sup>	H8	8.10
G <sup>11</sup>	H8	7.80	C <sup>24</sup>	H1'	5.92
T <sup>12</sup>	H1'	6.08	C <sup>24</sup>	H2'	1.94
T <sup>12</sup>	H2'	2.10	C <sup>24</sup>	H2''	1.99
T <sup>12</sup>	H3'	4.38	C <sup>24</sup>	H3'	4.31
T <sup>12</sup>	H4'	3.93	C <sup>24</sup>	H4'	3.86
T <sup>12</sup>	H5'	4.08	C <sup>24</sup>	H5	5.24
T <sup>12</sup>	H6	7.26	C <sup>24</sup>	H5'	3.90
T <sup>12</sup>	CH <sub>3</sub>	1.47	C <sup>24</sup>	H5''	3.87
			C <sup>24</sup>	H6	7.21

**Figure S1.** HPLC analysis of enzyme digest products of control 12mer duplex (panel A) and Tg modified 12mer duplex (Tg•A) (panel B). Cytidine eluted first at 7.7 mins followed by guanosine (11.9 mins), deoxythymidine (13.2 mins), and adenosine (15.9 mins). The thymine glycol nucleoside eluted at 11.2 mins (panel B). The UV trace of Tg nucleoside is show in panel C.

