SUPPLEMENTARY MATERIAL

RNApdbee – a webserver to derive secondary structures from pdb files of knotted and unknotted RNAs

Maciej Antczak[1], Tomasz Zok[1], Mariusz Popenda[2], Piotr Lukasiak[1,2], Ryszard W. Adamiak[1,2], Jacek Blazewicz[1,2] and Marta Szachniuk[1,2]*

[1]Institute of Computing Science, Poznan University of Technology, Piotrowo 2, 60-965 Poznan, Poland
[2]Institute of Bioorganic Chemistry, Polish Academy of Sciences, Noskowskiego 12/14, 61-704 Poznan, Poland

WEB SITE: http://rnapdbee.cs.put.poznan.pl

TABLE OF CONTENTS

Table S1. The major features of RNAView, MC-Annotate and 3DNA/DSSR annotation programs.

<table>
<tr><th>RNAView</th><th>MC-Annotate</th><th>3DNA/DSSR</th></tr>
<tr><td>identifies and classifies the types of base pairs and basic RNA motifs such as loops, bulges that are formed in RNA structures</td><td>provides a structural graph which encodes geometric information based on atom coordinates and torsion angles</td><td>identifies bps covering typical and modified bases that form canonical and non-canonical pairs with at least one H-bond and non-pairing interactions (e.g. base stacking)</td></tr>
<tr><td>provides the implementation of edge-to-edge hydrogen bonding interactions according to Leontis/Westhof nomenclature</td><td rowspan="3">structural graph is built taking into consideration:
every nucleotide residue conformation (based on sugar puckering modes and nitrogen base orientation around the N-glycosyl bond)
base-base interactions (including stacking and hydrogen bonding)
pseudoknots identified in input structure</td><td>characterizes base pairs using both Leontis/Westhof and Saenger nomenclature</td></tr>
<tr><td rowspan="2">identifies tertiary interactions and generates 2D diagrams of RNA secondary structure in Postscript, VRML or RNAML formats</td><td rowspan="2">detects triplets, higher-order base associations and pseudoknots</td></tr>
<tr><td>provides RNA secondary structure in the dot-bracket notation</td></tr>
</table>

Figure S1. The RNApdbee interface snapshots: front page with active 3D tab (panel A); front page for 3D scenario with 1DDY.pdb uploaded (panel B); front page for 2D scenario (panel C); output secondary structure topology derived for 1DDY (panel D).

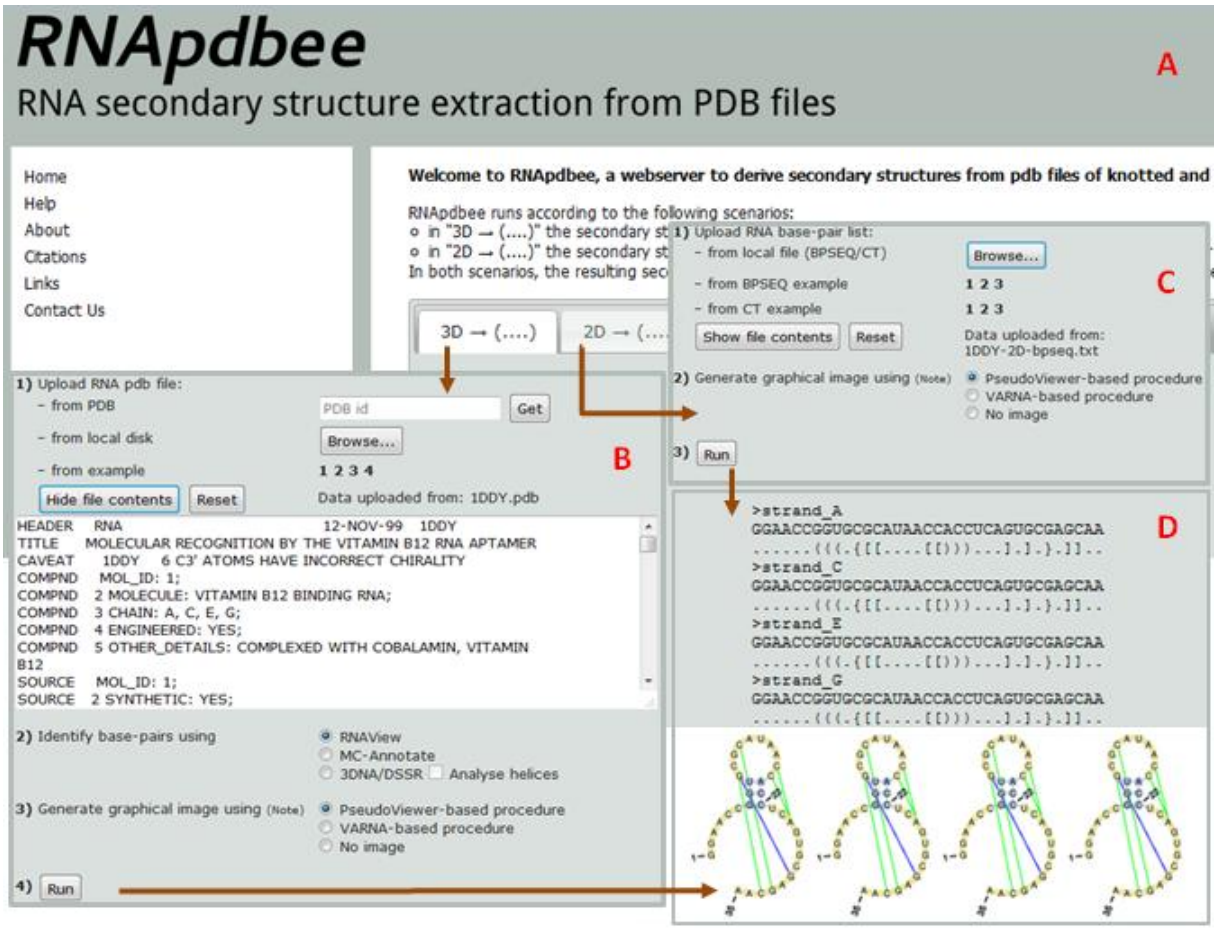


Figure S2. The secondary structure topology of unknotted RNA signal recognition particle (3NDB) provided by RNApdbee in dot-bracket and graphical form.

```
>strand_M
GUCUCGUCCCGUGGGGCUCGGCGGUGGGGGAGCAUCUCCUGUAGGGGAGAUGUAACCCCC
UUUACCUGCCGAACCCCGCCAGGCCCGGAAGGGAGCAACGGUAGGCAGGACGUCGGCGCU
CACGGGGGUGCGGGAC
.(((.(..(((((((((.(((((..(((((.(((((((((....)))))))))..)))))
....(((((.....(((.....(((....))).....))).)))))).)))))))..))
)))))....).)))).
```

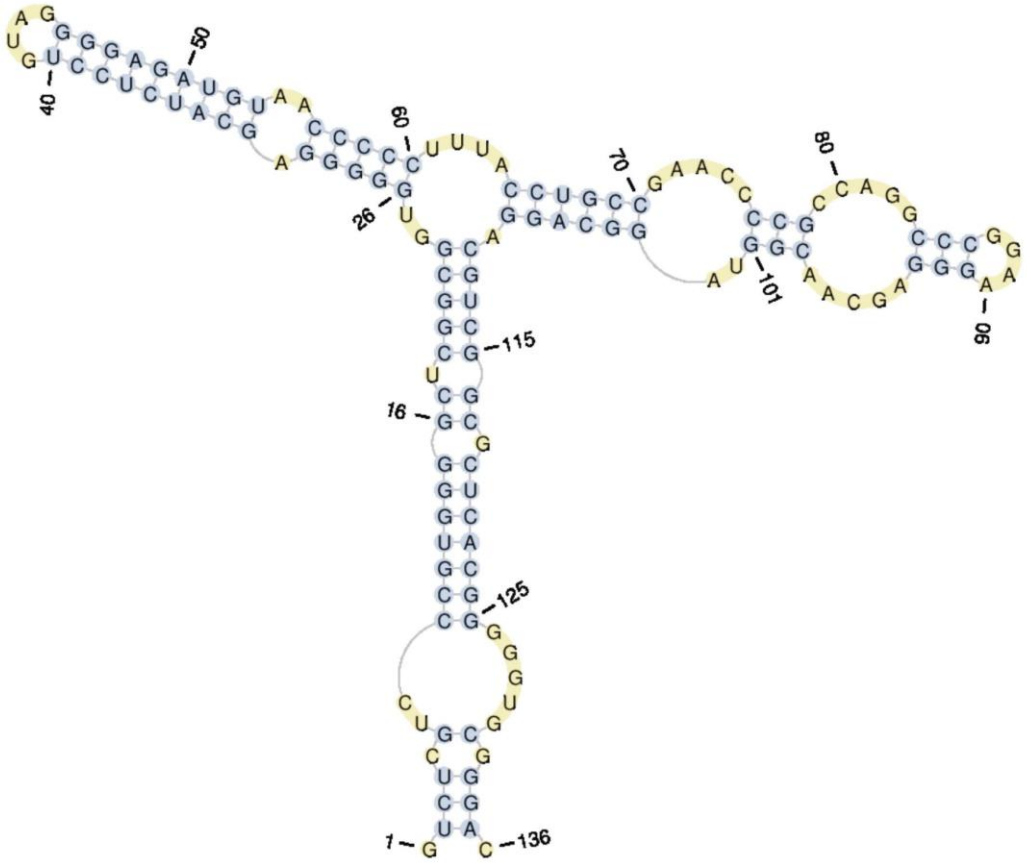


Figure S3. The secondary structure topology of 30S ribosome unit from *E. coli* (1PNX) provided by RNApdbee in extended dot-bracket and graphical form (the first order pseudoknot is shown in dark green).

```
>strand_A
UGGAGAGUUUGAUCCUGGCUCAGGGUGAACGCUGGCGGCGUGCCUAAGACAUGCAAGUCG
UGCGGAUACGCGCGGCCCCUUGGGGCCGUGCGUCAGCGGCGGACGGGUGAGUAACGCGUG
GGUGACCUACCCGGAAGAGGGGGACAACCCGGGGAAACUCGGGCUAAUCCCCCAUGUGGA
CGCAAGUCCAAAGGGGGAAGCCUUCGGGUCCCCCGCUUCCGGAUGGGCCCGCGUCCCAUC
AGCUAGUUGGUGGGGUAAUGGCCCACCAAGGCGACGACGGGUAGCCGGUCUGAGAGGAUG
GCCGGCCACAGGGGCACUGAGACACGGGCCCCACUCCUACGGGAGGCAGCAGUUAGGAAU
CUUCCGCAAUGGGCGCAAGCCUGACGGAGCGACGCCGCUUGGAGGAAGAAGCCCUUCGGG
GUGUAAACUCCUGAACCCGGGACGAAACCAGGGCCACUCAUACUGGCUCUGACUGACGGU
ACCGGGGUAAUAGCGCCGGCCAACUCCGUGCCAGCAGCCGCGGUAAUACGGAGGGCGCGA
GCGUUACCCGGAUUCACUGGGCGUAAAGGGCGUGUAGGCGGCCUGGGGCGUCCCAUGUGA
AAGACCACGGCUCAACCGUGGGGGAGCGUGGGAUACGCUCAGGCUAGACGGUGGGGAGAGG
GUGGUGGAAUUCCCGGAGUAGCGGUGAAAUGCGCAGAUACCGGGAGGAACGCCGAUGGCG
AAGGCAGCCACCUGGUCCACCCGUGACGCUGAGGCGCGAAAGCGUGGGGAGCAAACCGGA
UUAGAUACCCGGGUAGUCCACGCCCUAAACGAUGCGCGCUAGGUCUCUGGCGGCUCAACC
GCUGGGGGCCGAAGCUAACGCGUUAAGCGCGCCGCCUGGGGAGUACGGCCGCAAGGCUGA
AACUCAAAGGAAUUGACGGGGGCCCGCACAAGCGGUGGAGCAUGUGGUUUAAUUCGAAGC
AACGCGAAGAACCUUACCAGGCCUUGACAUGCUAGGCCUCGAACCCGGGUGAAAGCCUGG
GGUGCCUUCGGGAGCCCUAGCACAGGUGCUGCAUGGCCGUCGUCAGCUCGUGCCGUGAGG
UGUUGGGUUAAGUCCCGCAACGAGCGCAACCCCCGCCGUUAGUUGCCAGCGGUUCGGCCG
GGCACUCUAACGGGACUGCCCGCGAAAGCGGGAGGAAGGAGGGGACGACGUCUGGUCAGC
AUGGCCCUUACGGCCUGGGCGACACACGUGCUACAAUGCCCACUACAAAGCGAUGCCACC
CGGCAACGGGGAGCUAAUCGCAAAAAGGUGGGCCCAGUUCGGAUUGGGGUCUGCAACCCG
ACCCCAUGAAGCCGGAAUCGCUAGUAAUCGCGGAUCAGCCAUGCCGCGGUGAAUACGUUC
CCGGGCCUUGUACACACCGCCCGUCACGCCAUGGGAGCGGGCUCUACCCGAAGUCGCCGG
GUAACCUACGGGAAGCAGGCGCCGAGGGUAGGGCCCGUGACUGGGGCGAAGUCGUAACAA
GGUAGCUGUACCGGAAGGUGCGGCUGGAUCACUUUCU
....((((....[[...)))).((((.(((((..(((((((((....(((.(((..(((.
.((.((..((((((((((....))))))))))))).)))))......(((......(((((
(((..((...(((((((.(((((....((((((....))))))).....)))))....(((
(....)))...((((((..((....))))))))).)))))))..)))))))))).(((...
.(((..(((((((((.......)))))))))))).....))).((.((((....)))).
...))))))..(((((.............)))))..((((....))))...)))))).)....
.(.(((...(((((....)))).)))))..)).)))))...(((.....((((....))
))).....)))..(((((...(....(((((((.(.......)))))))).....)...
.)))))......((((((([[...(((((.....((.]]]])).......)))))))))..
)))))))))..........(((.....(.((((...(((.(((((((.(((((((((..
....((((((.....))))))....))))))))..)))))))))..(((((((((...((
((((((...(((((((....((.........)).......)))))))...)........((.
...)).)))))))..)))))..)))..))))...))))....((((((...((...((((.
.........)))...)))))))).........((((((..((((((((((.....))
))))))))))...((....))....))))))))))..(((.....(((....)))))..
..)))....]]...((((.(((((((.((..(((((..(((((((((.....((....
....)).........((((((...(...(((((.----.....(((((....)))))).
....((....))....)))))))..((.(((...(((((.(....(((((((((....))
)..(((.....)))).)))))).....((((.(((((((........(((.....)))
.......))))))).....(((((....)))))..........))))).....).).)))...)
).)))))).....))))))...)).)))))))..(...(((((((.....(((..((..((
((....)))).))....)))).....)))))))......(....(((((((........)
))))))....)..)..)))))).....(((((((..........)))))))......)).
.)))))))))).)...(.(..((.(..(((.(((..((((((((((((...(.((((..
.(..((....))..)..))))..)..)))))))))))))..)))..)))...).))...)..
)..(((((((((....)))))))))............
```

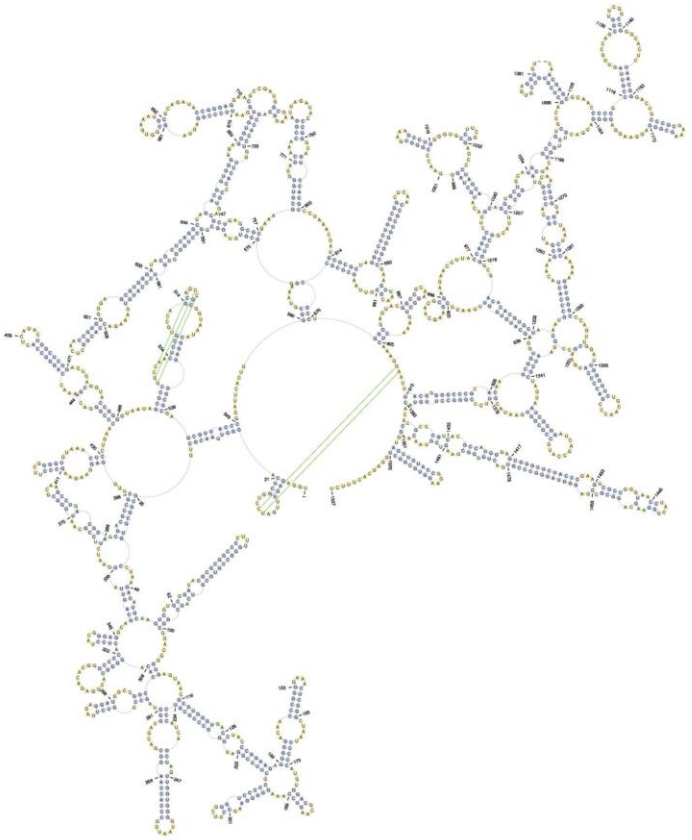


Figure S4. The secondary structure topology of bacterial Rnase P (3DHS) provided by RNApdbee in extended dot-bracket and graphical form (the first and second order pseudoknots are shown in dark green and navy blue, respectively).

```
>strand_A
GUUAAUCAUGCUCGGGUAAUCGCUGCGGCCGGUUUCGGCCGUAGAGGAAAGUCCAUGCUCGCACGGUGCUGAGAUGCCCGUA
GUGUUCGUGGAAACACGAGCGAGAAACCCAAAUGAUGGUAGGGGCACCUUCCCGAAGGAAAUGAACGGAGGGAAGGACAGGC
GGCGCAUGCAGCCUGUAGAUAGAUGAUUACCGCCGGAGUACGAGGCGCAAAGCCGCUUGCAGUACGAAGGUACAGAACAUGG
CUUAUAGAGCAUGAUUAACGUC
...(((...(((((.((((((.((((((.((....)).)))))).{...[[.[[[[[[(((((((.(.((......))).))-
------------------)))))...(((...-------.)))...(((((((...(........)...)))))))((((((
..........))))))........))))))...(((....------------------------......))).}....]]]]]
]]..).))))...)))...---
```

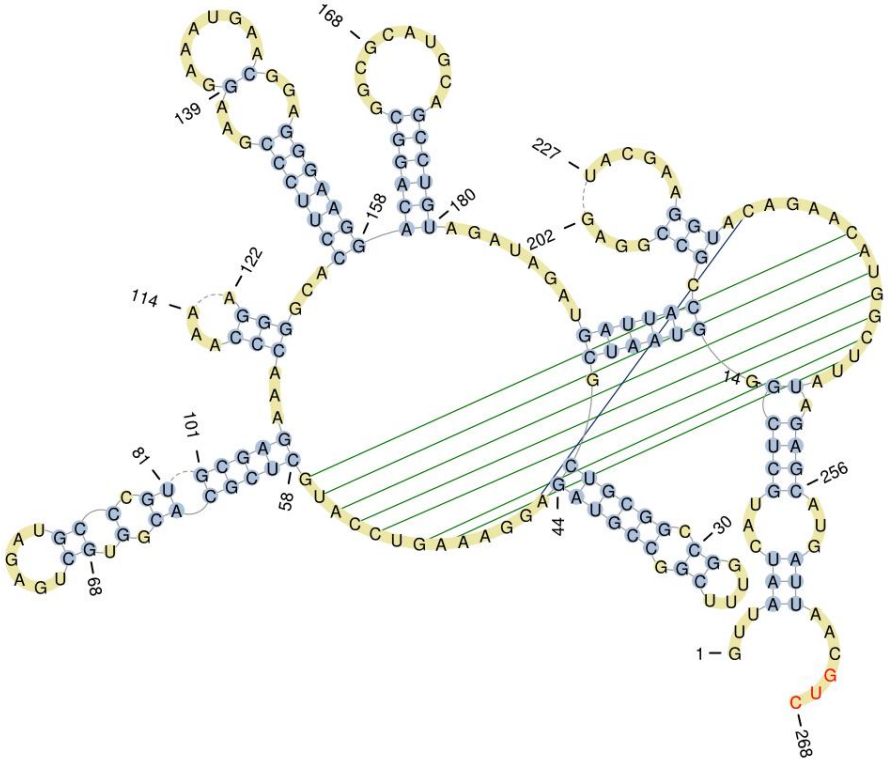


Figure S5. The secondary structure topology of group IIC intron (4FAU) provided by RNApdbee in extended dot-bracket and graphical form (the first, second and third order pseudoknots are shown in dark green, navy blue and red, respectively).

```
>strand_A
GGGGUUAUGUGUGCCCGGCAUGGGUGCAGUCUAUAGGGUGAGAGUCCCGAACUGUGAAGGCAGAAGUAACAGUUAGCCUAA
CGCAAGGGUGUCCGUGGCGACAUGGAAUCUGAAGGAAGCGGACGGCAAACCUUCGGUCUGAGGAACACGAACUUCAUAUGA
GGCUAGGUAUCAAUGGAUGAGUUUGCAUAACAAAACAAAGUCCUUUCUGCCAAAGUUGGUACAGAGUAAAUGAAGCAGAUU
GAUGAAGGGAAAGACUGCAUUCUUACCCGGGGAGGUCUGGAAACAGAAGUCAGCAGAAGUCAUAGUACCCUGUUCGCAGGG
GAAGGACGGAACAAGUAUGGCGUUCGCGCCUAAGCUUGAACCGCCGUAUACCGAACGGUACGUACGGUGGUGUG
---.{{{{--[{.(((((<..(((((((((((...(((.......)))..(((((...[[[[[[[...))))))..(((...
(((..((((.((((((....))))))))))...}>..)))...)))...(((((((((((.(.....)...(((((.....
[(((..(.((((((((((..((((.]}}}}..))))...)))).]]]]]]]...))))))).)..)))...)))))))))).
..))))))...)))))))))))...]))))))(...((((....))))...)........((.(....(((.........)))
...))).....(((((..((((....))))...))))).(.((((((((((((....)))..))))))))).)..-
```

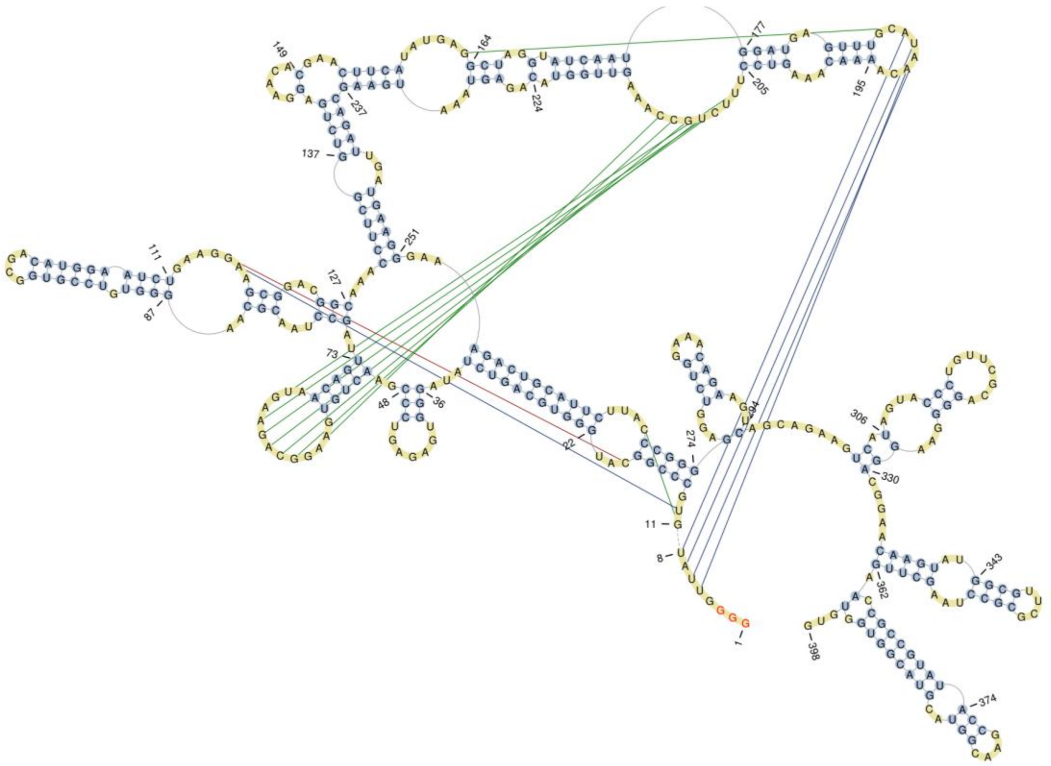


Figure S6. The secondary structure topology of group IIC intron (3BWP) provided by RNApdbee in extended dot-bracket and graphical form (the first, second, third and fourth order pseudoknots are shown in dark green, navy blue, red and violet, respectively).

```
>strand_A
GUGUGCCCGGCAUGGGUGCAGUCUAUAGGGUGAGAGUCCCGAACUGUGAAGGCAGAAGUAACAGUUAGCCUAACGCAAGGGUG
UCCGUGGCGACAUGGAAUCUGAAGGAAGCGGACGGCAAACCUUCGGUCUGAGGAACACGAACUUCAUAUGAGGCUAGGUAUCA
AUGGAUGAGUUUGCAUAACAAAACAAAGUCCUUUCUGCCAAAGUUGGUACAGAGUAAAUGAAGCAGAUUGAUGAAGGGAAAGA
CUGCAUUCUUACCCGGGGAGGUCUGGAAACAGAAGUCAGCAGAAGUCAUAGUACCCUGUUCGCAGGGGAAGGACGGAACAAGU
AUGGCGUUCGCGCCUAAGCUUGAACCGCCGUAUACCGAACGGUACGUACGGUGGUGUGAGAGGAGUUCGCUCUACUCUAU
--[{.(((((<..((((((((((...(((.......)))..(((((..A[[[[[[...)))))..(((...(((..((((-
((((((....))))))))))...}>.{}))...)))...((((((((((-........-.(((((..---[...-------(
((((((..((((.]-....))))...))))a]]]]]]].--)))..----------))))))))))...))))))...)))
))))))))}.]))))))(...((((....))))...)-......(((.(....(((-------.)))-..))))....(((((
.-((((....))))...)))))..((((((((((((....)))..))))))))))..------------------------
```

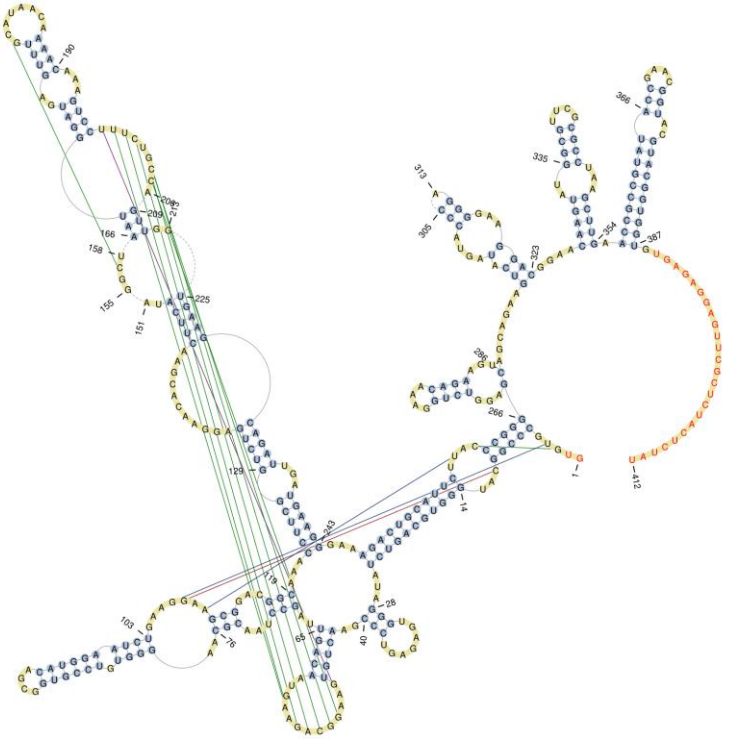


Table S2. Secondary structures of tRNA provided by RNApdbee, based on base-pairs list identified by RNAView, presented in extended dot-bracket notation.

	SEQ	GCGGAUUUAGCUCAGUUGGGAGAGCGCCAGACUGAAGAUCUGGAGGUCCUGUGUUCGAUCCACAGAAUUCGCACCA
PDBId	Chain	Secondary structure
1EHZ	A	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1EVV	A	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1FCW	A	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1FCW	B	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1FCW	C	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1FCW	D	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1FCW	E	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1GIX	B	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1GIX	C	.((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))).....
1JGO	B	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1JGO	C	.((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))).....
1JGP	B	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1JGP	C	.((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))).....
1JGQ	B	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1JGQ	C	.((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))).....
1MJ1	C	.((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))).....
1MJ1	D	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1ML5	B	.((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))).....
1PNS	V	.((((((..(((.....[..)))).(((((.......))))).....(((((..]....))))))))))).....
1PNS	W	(((((((..(((.....[..)))).(((((.......))))).....(((((..]....))))))))))))....
1SZ1	E	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1SZ1	F	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1TN1	A	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1TN2	A	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1TRA	A	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1TTT	D	(((((((..((.(.....[..).)).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1TTT	E	(((((((...(((.....[..)))..((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1TTT	F	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
1YL4	B	((.(.((.....(........).....(............).....((.(((.....)).)))).).))....
1YL4	C	(..(.((..((((........)))).(((((.......))))).....(((((.......))))))).)..)....
1ZO1	F	(.((((((..((((........)))).((((.........)))).....(((((.......)))))))))).)....
1ZO3	A	(.((((((..((((........)))).((((.........)))).....(((((.......)))))))))).)....
1ZO3	B	(.((((((..((((........)))).((((.........)))).....(((((.......)))))))))).)....
2B64	V	.(....(....((........)).....................((............))).....).....
2B9M	V	.(....(....((........)).....................((............))).....).....
2B9O	V	.(....(....((........)).....................((............))).....).....
2GY9	U	(((((((..((((........)))).((((.........)))).....(((((.......))))))))))))....
2GY9	V	(((((((..((((........)))).((((.........)))).....(((((.......))))))))))))....
2GY9	W	(((((((..((((........)))).((((.........)))).....(((((.......))))))))))))....
2GYB	U	(((((((..((((........)))).((((.........)))).....(((((.......))))))))))))....
2GYB	V	(((((((..((((........)))).((((.........)))).....(((((.......))))))))))))....
2GYB	W	(((((((..((((........)))).((((.........)))).....(((((.......))))))))))))....
3DEG	A	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
3E1A	E	.((((((..((((........)))).(((((.......))))).....(((((.......))))))))))).....
3E1C	E	.((((((..((((........)))).(((((.......))))).....(((((.......))))))))))).....
3FIH	Y	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
3IZY	N	...........(...........)..(..(.........).).....................................
4TNA	A	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
4TRA	A	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....
6TNA	A	(((((((..(((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))))....

Table S3. Secondary structures of tRNA provided by RNApdbee, based on base-pairs list identified by MC-Annotate, presented in extended dot-bracket notation.

	SEQ	GCGGAUUUAGCUCAGUUGGGAGAGCGCCAGACUGAAGAUCUGGAGGUCCUGUGUUCGAUCCACAGAAUUCGCACCA
PDBId	Chain	Secondary structure
1EHZ	A	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1EVV	A	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1FCW	A	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1FCW	B	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1FCW	C	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1FCW	D	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1FCW	E	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1GIX	B	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1GIX	C	.((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))).....
1JGO	B	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1JGO	C	.((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))).....
1JGP	B	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1JGP	C	.((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))).....
1JGQ	B	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1JGQ	C	.((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))).....
1MJ1	C	.((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))).....
1MJ1	D	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1ML5	B	.((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))).....
1PNS	V	.((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....))))))))))).....
1PNS	W	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..]....)))))))))))....
1SZ1	E	(.(((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))..)....
1SZ1	F	(((((((...(((.........)))..(((...........)))).....((((.......)))).)))))))....
1TN1	A	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1TN2	A	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1TRA	A	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1TTT	D	(((((((...(.(.....[..).)..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1TTT	E	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1TTT	F	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
1YL4	B	((...((...(............)...(............).....(..(.....)..).))...))....
1YL4	C	(..(.(....(((.........)))..((..(.......)..)).....((..(.....)..)).).)..)....
1ZO1	F	...((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....((((..]....)))).)))).....
1ZO3	A	...((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....((((..]....)))).)))).....
1ZO3	B	...((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....((((..]....)))).)))).....
2B64	V	.....(.............).....
2B9M	V	.....(.............).....
2B9O	V	.....(.............).....
2GY9	U	.((((((..((((.........)))).((((.........)))).....(((((.......))))))))))).....
2GY9	V	.((((((..((((.........)))).((((.........)))).....(((((.......))))))))))).....
2GY9	W	.((((((..((((.........)))).((((.........)))).....(((((.......))))))))))).....
2GYB	U	.(((((....((..........))..((((.........)))).....(((((.......)))))).))))).....
2GYB	V	.(((((....((..........))..((((.........)))).....(((((.......)))))).))))).....
2GYB	W	.(((((....((..........))..((((.........)))).....(((((.......)))))).))))).....
3DEG	A	.((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))).....
3E1A	E	.(((..(..((((.....[..)))).(((((.......))))).....(((((..]....)))))))..))).....
3E1C	E	..((((((..((((.....[..)))).(((((.......))))).....(((((..]....)))))))))).....
3FIH	Y	((.(((....(((.....[..)))...(............).....(((((..]....)))))).))).))....
3IZY	N	...........(...........).....
4TNA	A	(((((((...(((.....[..)))...((...........)).....((((..]....)))).)))))))....
4TRA	A	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....
6TNA	A	(((((((...(((.....[..))))..(((...........)))).....((((..]....)))).)))))))....

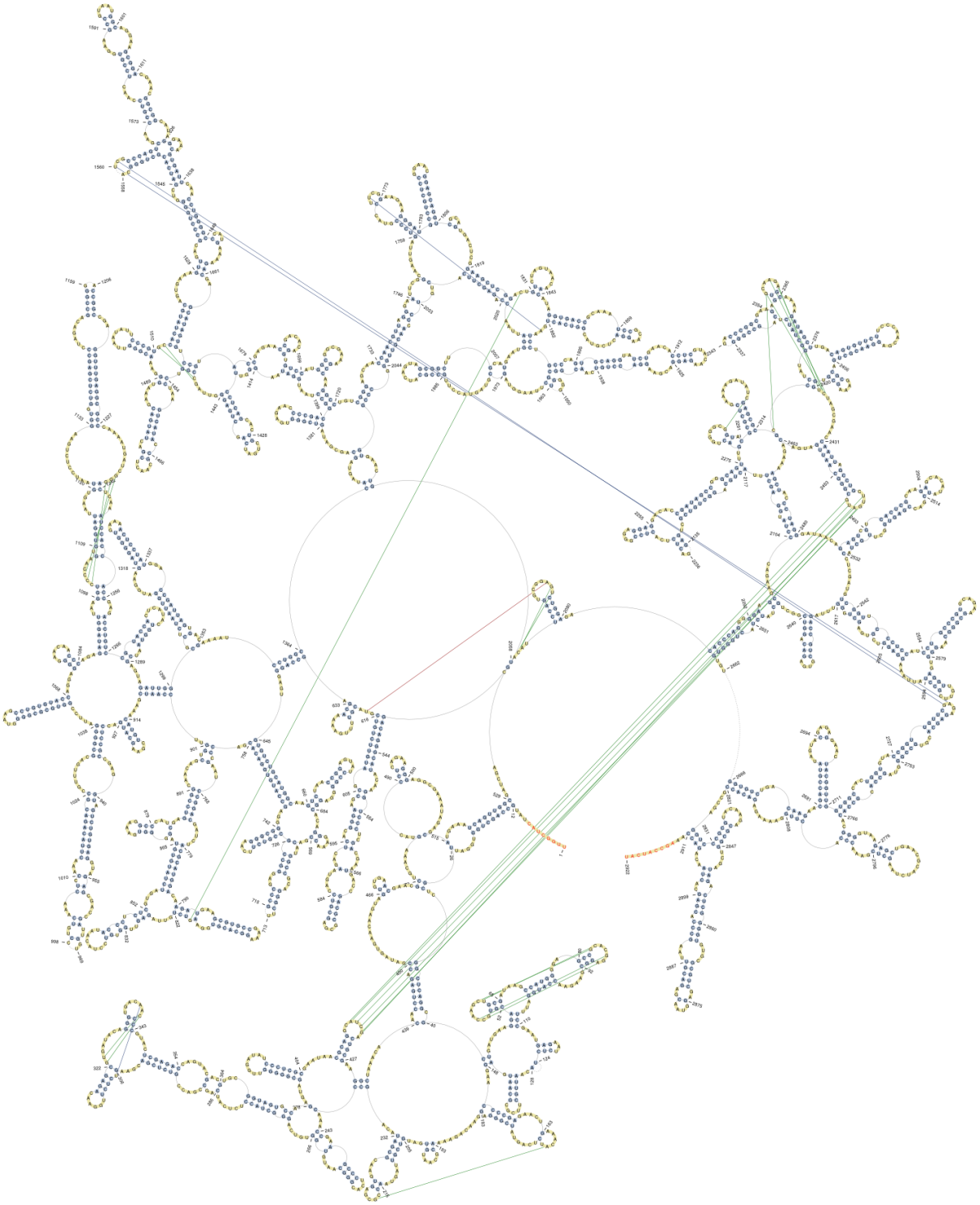
Table S4. Secondary structures of tRNA provided by RNApdbee, based on base-pairs list identified by 3DNA/DSSR without 'Analyse helices' option enabled, presented in extended dot-bracket notation.

	SEQ	GCGGAUUUAGCUCAGUUGGGAGAGCGCCAGACUGAAGAUCUGGAGGUCCUGUGUUCGAUCCACAGAAUUCGCACCA
PDBId	Chain	Secondary structure
1EHZ	A	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1EVV	A	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1FCW	A	(((.(((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....)))))))).)))....
1FCW	B	(((.(((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....)))))))).)))....
1FCW	C	(((.(((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....)))))))).)))....
1FCW	D	(((.(((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....)))))))).)))....
1FCW	E	(((.(((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....)))))))).)))....
1GIX	B	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1GIX	C	.((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))).....
1JGO	B	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1JGO	C	.((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))).....
1JGP	B	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1JGP	C	.((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))).....
1JGQ	B	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1JGQ	C	.((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))).....
1MJ1	C	.((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))).....
1MJ1	D	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1ML5	B	.((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))).....
1PNS	V	.((((((..((((.....[..)))).(((((.......))))).....(((((..].....))))))))))).....
1PNS	W	(((((((..((((.....[..)))).(((((.......))))).....(((((..].....))))))))))))....
1SZ1	E	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1SZ1	F	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1TN1	A	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1TN2	A	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1TRA	A	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1TTT	D	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1TTT	E	(((((((...(((.....[..)))..((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1TTT	F	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1YL4	B	((...((...(((........)))..((............)).....(((.(.......).)))))...))....
1YL4	C	((.((((..((((.....[..)))).((.((.......)).)).....(((((..].....)))))))))).))....
1ZO1	F	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1ZO3	A	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
1ZO3	B	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
2B64	V	.(....(...((..........))..........................(..(........).))....).....
2B9M	V	.(....(...((..........))..........................(..(........)..))....).....
2B9O	V	.(....(...((..........))..........................(..(........)..))....).....
2GY9	U	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
2GY9	V	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
2GY9	W	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
2GYB	U	.((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))).....
2GYB	V	.((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))).....
2GYB	W	.((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))).....
3DEG	A	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
3E1A	E	.((((((..((((.....[..)))).(((((.......))))).....(((((..].....))))))))))).....
3E1C	E	.((((((..((((.....[..)))).(((((.......))))).....(((((..].....))))))))))).....
3FIH	Y	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
3IZY	N	...........(...........).....
4TNA	A	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....
4TRA	A	(((.(((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....)))))))).)))....
6TNA	A	(((((((..((((.....[..)))).((((.........)))).....(((((..].....))))))))))))....

Table S5. Secondary structures of tRNA provided by RNApdbee, based on base-pairs list identified by 3DNA/DSSR with 'Analyse helices' option disabled, presented in extended dot-bracket notation.

	SEQ	GCGGAUUUAGCUCAGUUGGGAGAGCGCCAGACUGAAGAUCUGGAGGUCCUGUGUUCGAUCCACAGAAUUCGCACCA
PDBId	Chain	Secondary structure
1EHZ	A	(((((((([.((((]{[.[<..))))(((((((..).))))))).}(((((]>.)].))))))))))....
1EVV	A	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((..).))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1FCW	A	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1FCW	B	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1FCW	C	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1FCW	D	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1FCW	E	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1GIX	B	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1GIX	C	.(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))).....
1JGO	B	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1JGO	C	.(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))).....
1JGP	B	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1JGP	C	.(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))).....
1JGQ	B	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1JGQ	C	.(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))).....
1MJ1	C	.(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))).....
1MJ1	D	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1ML5	B	.(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))).....
1PNS	V	.(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))).....
1PNS	W	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1SZ1	E	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((..).))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1SZ1	F	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((..).))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1TN1	A	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1TN2	A	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1TRA	A	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1TTT	D	(((((((..((((((..{<A))))))(((((((.....)))))))).](((((}>a)..))))))))))....
1TTT	E	(((((((([.((((]{[.[<A.))))(((((((.....)))))))).}(((((]>a)].))))))))))....
1TTT	F	(((((((([.((((]{[.[<A.))))(((((((..).))))))).}(((((]>a)].))))))))))....
1YL4	B	(((((((([.((((][.....))))(((((((.....)))))))).](((((...)..))))))))))....
1YL4	C	(((((((..((((.....[..))))(((((((.....)))))))....(((((.(].)..))))))))))....
1ZO1	F	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1ZO3	A	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
1ZO3	B	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
2B64	V	.((...(..((((.....)))))(((((.....)))))....((.((.....)).)))...))....
2B9M	V	.((...(..((((.....)))))(((((.....)))))....((.((.....)).)))...))....
2B9O	V	.((...(..((((.....)))))(((((.....)))))....((.((.....)).)))...))....
2GY9	U	(((((((([.((((][...{..))))(((((.....)))))...](((((.}.)..))))))))))....
2GY9	V	(((((((([.((((][...{..))))(((((.....)))))...](((((.}.)..))))))))))....
2GY9	W	(((((((([.((((][...{..))))(((((((..).)))))))...](((((.}.)..))))))))))....
2GYB	U	(((((((([.((((][...{..))))(((((.....)))))...](((((.}.)..))))))))))....
2GYB	V	(((((((([.((((][...{..))))(((((.....)))))...](((((.}.)..))))))))))....
2GYB	W	(((((((([.((((][...{..))))(((((((..).)))))))...](((((.}.)..))))))))))....
3DEG	A	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
3E1A	E	.((((((..((((((...[{.))))))(((((((.....)))))))....((((((]}.)..))))))))).....
3E1C	E	.((((((..((((((...[{.))))))(((((((.....)))))))....((((((]}.)..))))))))).....
3FIH	Y	(((((((([.((((]{[..[..))))(((((((..).)))))))...}((((((.].)].))))))))))....
3IZY	N	.........((((........[]))))((.(..........))))]..............................
4TNA	A	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
4TRA	A	(((((((([.((((]..{<..))))(((((((.....)))))))).](((((}>.)..))))))))))....
6TNA	A	(((((((([.((((][..{<..))))(((((((((..).)))))))...](((((}>.)..))))))))))....

Figure S7. The secondary structures and their visualisations obtained for the 23S rRNA (1FFK large subunit) obtained by RNApdbee based on 3DNA/DSSR base-pairs list with 'Analyse helices' option disabled (this page) or enabled (page 15). It was possible to encode in dot-bracket notation as much as 55% of non-canonical interactions identified in helical regions of considered structure.



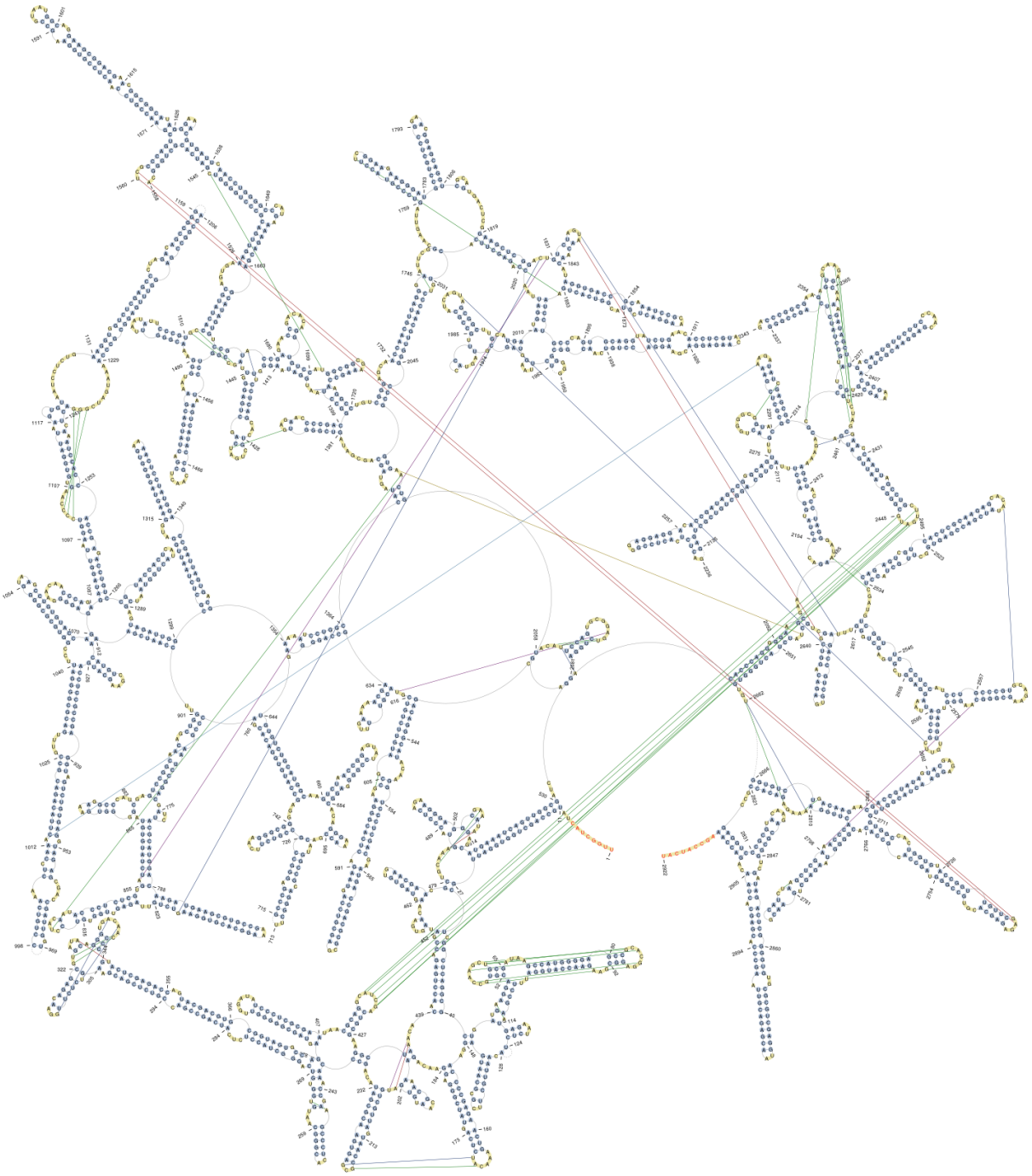
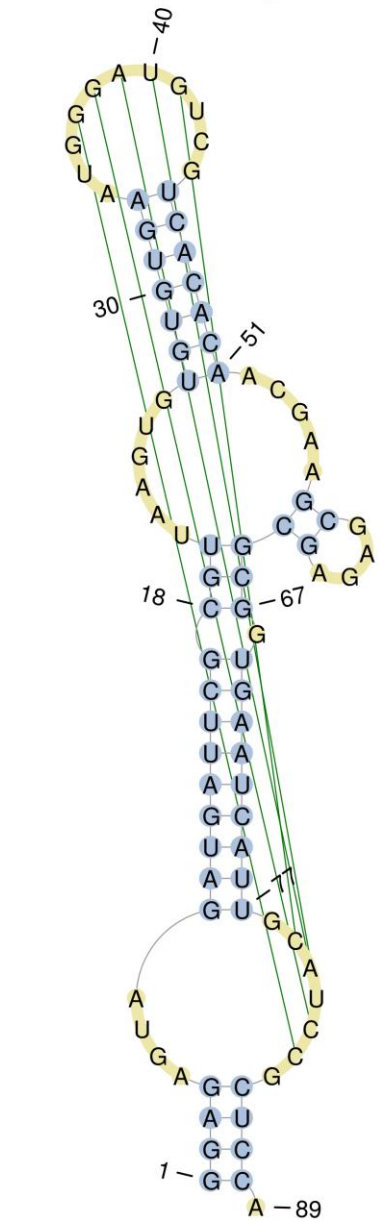


Figure S8. The secondary structure of a riboswitch (4LVV) and its visualization made by RNApdbee (3DNA/DSSR used as a base-pair analyzer) with 'Analyse helices' option disabled (left) or enabled (right). Differences between secondary structures are caused by regions observed as loops or junctions when canonical base-pairs were considered only, and modified when non-canonical interactions were also taken into consideration.

```
>strand_A
GGAGAGUAGAUGAUUCGCGUUAA
GUGUGUGUGAAUGGGAUGUCGUC
ACACAACGAAGCGAGAGCGCGGU
GAAUCAUUGCAUCCGCUCCA
((((....((((((((((((...
...(((((((...[[[[[...))
)))))).....((....)))))).)
)))))))).]]]]].)))).
```




```
>strand_A
GGAGAGUAGAUGAUUCGCGUUAA
GUGUGUGUGAAUGGGAUGUCGUC
ACACAACGAAGCGAGAGCGCGGU
GAAUCAUUGCAUCCGCUCCA
(((((..(((((((((((((..(
(.(((((((((.[[[[[).)))
)))))).)).(((..)))))).)
)))))))))]]]]])))))).
```