

Supplementary Online Materials

		DCACP		BLYP	
		complex	monomer	complex	monomer
stacked	A···T	OG	OG	DCACP geometry	fixed
	G···C	OG	OG	DCACP geometry	fixed
	C···C st	EG	fixed	EG	fixed
	U···U st	EG	fixed	EG	fixed
	A···T	OG	OG	OG	OG
	G···C	OG	OG	OG	OG
H-bonded	A···T	OG	OG	OG	OG

Table 1: Table showing the geometry used in the interaction energy calculations for each complex: OG - optimized geometry, EG - experimental geometry taken from the JSCH2005 data set, fixed - geometry as assumed in the complex, DCACP-geomtry - optimized DCACP geometry.