

Table S4,2

Intermolecular Distances of the light yellow NDP form

atom	Atom	distance	Atom	atom	distance
O (3)	D (1)	1.75 (4)	O (1)	C (7)	3.347 (4)
O (3)	O (2)	2.694 (3)	O (1)	C (5)	3.491 (4)
O (3)	O (2)	3.143 (3)	O (1)	C (6)	3.579 (4)
O (3)	D (1)	3.32 (4)	N (1)	D (1)	3.10 (4)
O (3)	C (2)	3.348 (3)	N (1)	D (1)	3.31 (4)
O (3)	C (3)	3.415 (3)	N (1)	C (1)	3.449 (4)
O (3)	C (4)	3.484 (3)	C (2)	D (1)	2.68 (4)
O (3)	C (4)	3.531 (4)	C (2)	D (1)	3.26 (4)
O (3)	N (1)	3.590 (3)	C (2)	C (8)	3.446 (4)
O (3)	N (1)	3.594 (3)	C (2)	C (3)	3.515 (4)
O (2)	D (1)	2.75 (4)	C (8)	C (7)	3.491 (4)
O (2)	D (1)	3.13 (4)	C (8)	C (3)	3.525 (4)
O (2)	O (2)	3.317 (3)	C (7)	C (3)	3.521 (4)
O (2)	O (2)	3.317 (3)	C (6)	C (4)	3.524 (4)
O (2)	C (2)	3.349 (3)	C (6)	C (5)	3.535 (5)
O (2)	N (1)	3.377 (3)	C (5)	C (4)	3.485 (5)
O (2)	C (1)	3.448 (3)	C (4)	D (1)	3.50 (4)
O (2)	N (1)	3.482 (4)	D (1)	D (1)	3.05 (6)
O (2)	O (1)	3.490 (3)	D (1)	D (1)	3.05 (6)
O (2)	C (5)	3.532 (4)			
O (2)	D (1)	3.59 (4)			

Contacts out to 3.60 Å. Estimated standard deviations in the least significant figure are given in parentheses.