Supplementary Data – Intermolecular Potential Energy and Force between Two dsDNA_20bp Molecules in Implicit Solvent (0.15 M NaCl), at Different Center-of-Mass Distances and Cutoff Radii.

Tables report raw values of intermolecular potential energy [kJ/mol] and force [kJ/(mol·nm)] between two dsDNA_20bp molecules at different center-of-mass distances. Residuals quantify the differences between successive cutoff radii, showing convergence of nonbonded interactions with increasing cutoff.

Table S1. *Intermolecular potential energy [kJ/mol] between two parallel dsDNA_20bp molecules in implicit solvent (0.15 M NaCl), at different center-of-mass distances. Values are reported for cutoff radii of 36, 48, and 64 nm. Residuals quantify the differences between successive cutoffs (E(48)−E(36), E(64)−E(48)), showing convergence of nonbonded interactions with increasing cutoff.*

Distance [nm]	cut36	cut48	cut64	resid_48-36	resid_64-48
2,40	-33863,40	-33857,10	-33856,40	6,30	0,70
2,45	-33868,10	-33861,70	-33861,00	6,40	0,70
2,50	-33873,00	-33866,00	-33865,20	7,00	0,80
2,55	-33877,00	-33869,90	-33869,20	7,10	0,70
2,60	-33880,60	-33873,50	-33872,80	7,10	0,70
2,65	-33883,90	-33876,90	-33876,10	7,00	0,80
2,70	-33887,10	-33880,10	-33879,40	7,00	0,70
2,75	-33890,00	-33883,20	-33882,40	6,80	0,80
2,80	-33892,70	-33886,20	-33885,30	6,50	0,90
2,85	-33895,50	-33888,90	-33888,00	6,60	0,90
2,90	-33898,20	-33891,40	-33890,50	6,80	0,90
2,95	-33900,40	-33893,80	-33892,90	6,60	0,90
3,00	-33902,70	-33896,10	-33895,10	6,60	1,00
3,25	-33913,00	-33905,70	-33904,60	7,30	1,10
3,50	-33920,20	-33913,30	-33911,80	6,90	1,50
3,75	-33926,10	-33918,80	-33917,20	7,30	1,60
4,00	-33929,40	-33922,90	-33921,30	6,50	1,60
4,25	-33932,10	-33926,00	-33924,40	6,10	1,60
4,50	-33933,90	-33928,50	-33926,80	5,40	1,70
4,75	-33935,10	-33930,40	-33928,60	4,70	1,80
5,00	-33936,00	-33931,80	-33930,00	4,20	1,80

Residuals between cutoffs are consistently small: mean Δ(48−36) ≈ 6.6 kJ/mol, max ≈ 7.3 kJ/mol; mean Δ(64−48) ≈ 1.0 kJ/mol, max ≈ 1.8 kJ/mol. Relative error is <0.006% of the total intermolecular energy, confirming convergence at 64 nm.

Table S2. *Intermolecular force [kJ/(mol·nm)] between two parallel dsDNA_20bp molecules in implicit solvent (0.15 M NaCl), at different center-of-mass distances. Values are reported for cutoff radii of 48, 64, and 86 nm. Residuals quantify the differences between successive cutoffs (E(64)−E(48), E(86)−E(64)), showing convergence of nonbonded interactions with increasing cutoff.*

Distance [nm]	cut48	cut64	cut86	resid_64-48	resid_86-64
2,45	89,00	88,00	88,00	-1,00	0,00
2,50	82,00	82,00	82,00	0,00	0,00
2,55	75,00	76,00	76,00	1,00	0,00
2,60	70,00	69,00	69,00	-1,00	0,00
2,65	66,00	66,00	65,00	0,00	-1,00
2,70	63,00	63,00	63,00	0,00	0,00
2,75	61,00	59,00	60,00	-2,00	1,00
2,80	57,00	56,00	56,00	-1,00	0,00
2,85	52,00	52,00	52,00	0,00	0,00
2,90	49,00	49,00	49,00	0,00	0,00
2,95	47,00	46,00	46,00	-1,00	0,00
3,00	39,67	39,00	39,00	-0,67	0,00
3,25	34,40	33,40	33,40	-1,00	0,00
3,50	26,20	25,20	25,20	-1,00	0,00
3,75	19,20	19,00	19,00	-0,20	0,00
4,00	14,40	14,40	14,40	0,00	0,00
4,25	11,20	11,00	10,80	-0,20	-0,20
4,50	8,80	8,40	8,20	-0,40	-0,20
4,75	6,60	6,40	6,40	-0,20	0,00

Residuals between cutoffs are minimal: mean Δ(64−48) ≈ −0.6 kJ/(mol·nm), max ≈ −2.0 kJ/(mol·nm); mean Δ(86−64) ≈ 0.0 kJ/(mol·nm). Relative error is <0.02% of the total intermolecular force, confirming convergence at 64 nm.

Table S3. *Intermolecular potential energy [kJ/mol] between two head–tail dsDNA_20bp molecules in implicit solvent (0.15 M NaCl), at different center-of-mass distances. Values are reported for cutoff radii of 48, 64, and 86 nm. Residuals quantify the differences between successive cutoffs (E(64)−E(48), E(86)−E(64)), showing convergence of nonbonded interactions with increasing cutoff.*

Distance [nm]	cut48	cut64	cut86	resid_64-48	resid_86-64
6,70	-33894,50	-33893,70	-33893,60	0,80	0,10
6,72	-33922,70	-33921,90	-33921,80	0,80	0,10
6,74	-33932,60	-33931,80	-33931,70	0,80	0,10
6,76	-33935,60	-33934,80	-33934,60	0,80	0,20
6,78	-33935,90	-33935,10	-33935,00	0,80	0,10
6,80	-33935,20	-33934,50	-33934,30	0,70	0,20
6,82	-33934,30	-33933,50	-33933,40	0,80	0,10
6,84	-33933,20	-33932,50	-33932,30	0,70	0,20
6,86	-33932,20	-33931,50	-33931,30	0,70	0,20
6,88	-33931,30	-33930,50	-33930,40	0,80	0,10
6,90	-33930,40	-33929,70	-33929,60	0,70	0,10
6,92	-33929,80	-33929,00	-33928,80	0,80	0,20
6,94	-33929,10	-33928,30	-33928,20	0,80	0,10
6,96	-33928,70	-33927,80	-33927,70	0,90	0,10
6,98	-33928,30	-33927,40	-33927,30	0,90	0,10
7,00	-33927,90	-33927,10	-33927,00	0,80	0,10
7,03	-33927,60	-33926,80	-33926,70	0,80	0,10

7,05	-33927,40	-33926,60	-33926,50	0,80	0,10
7,10	-33927,20	-33926,50	-33926,30	0,70	0,20
7,20	-33927,40	-33926,60	-33926,50	0,80	0,10
7,30	-33927,80	-33927,10	-33927,00	0,70	0,10
7,40	-33928,50	-33927,70	-33927,60	0,80	0,10
7,50	-33929,10	-33928,40	-33928,20	0,70	0,20
7,63	-33929,70	-33929,10	-33928,90	0,60	0,20
7,75	-33930,40	-33929,70	-33929,60	0,70	0,10
7,88	-33931,00	-33930,30	-33930,20	0,70	0,10
8,00	-33931,50	-33930,80	-33930,70	0,70	0,10
8,25	-33932,30	-33931,70	-33931,60	0,60	0,10
8,50	-33933,00	-33932,30	-33932,20	0,70	0,10
8,75	-33933,50	-33932,80	-33932,70	0,70	0,10
9,00	-33933,80	-33933,20	-33933,10	0,60	0,10
9,25	-33934,10	-33933,50	-33933,40	0,60	0,10
9,50	-33934,20	-33933,70	-33933,60	0,50	0,10
9,75	-33934,30	-33933,90	-33933,80	0,40	0,10
10,00	-33934,40	-33934,00	-33933,90	0,40	0,10
10,50	-33934,50	-33934,10	-33934,10	0,40	0,00
11,00	-33934,60	-33934,20	-33934,20	0,40	0,00
11,50	-33934,60	-33934,30	-33934,20	0,30	0,10
12,00	-33934,60	-33934,30	-33934,30	0,30	0,00

Residuals between cutoffs are consistently small: mean Δ(64−48) ≈ 0.7 kJ/mol, max ≈ 0.9 kJ/mol; mean Δ(86−64) ≈ 0.1 kJ/mol, max ≈ 0.2 kJ/mol. Relative error is <0.003% of the total intermolecular energy, confirming convergence at 64 nm.

Table S4. *Intermolecular force [kJ/(mol·nm)] between two head–tail dsDNA_20bp molecules in implicit solvent (0.15 M NaCl), at different center-of-mass distances. Values are reported for cutoff radii of 48, 64, and 86 nm. Residuals quantify the differences between successive cutoffs (F(64)−F(48), F(86)−F(64)), showing convergence of nonbonded interactions with increasing cutoff.*

Distance [nm]	cut48	cut64	cut86	resid_64-48	resid_86-64
6,72	952,50	952,50	952,50	0,00	0,00
6,74	322,50	322,50	322,50	0,00	0,00
6,76	82,50	82,50	82,50	0,00	0,00
6,78	-10,00	-7,50	-7,50	2,50	0,00
6,80	-40,00	-40,00	-40,00	0,00	0,00
6,82	-50,00	-50,00	-50,00	0,00	0,00
6,84	-52,50	-50,00	-50,00	2,50	0,00
6,86	-47,50	-50,00	-50,00	-2,50	0,00
6,88	-45,00	-45,00	-45,00	0,00	0,00
6,90	-37,50	-37,50	-37,50	0,00	0,00
6,92	-32,50	-35,00	-35,00	-2,50	0,00
6,94	-27,50	-30,00	-30,00	-2,50	0,00
6,96	-20,00	-22,50	-22,50	-2,50	0,00
6,98	-20,00	-17,50	-17,50	2,50	0,00
7,00	-15,56	-13,33	-13,33	2,22	0,00

7,03	-10,00	-10,00	-10,00	0,00	0,00
7,05	-5,33	-4,00	-4,00	1,33	0,00
7,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
7,20	3,00	3,00	3,00	0,00	0,00
7,30	5,50	5,50	5,50	0,00	0,00
7,40	6,50	6,50	6,50	0,00	0,00
7,50	5,33	6,22	6,22	0,89	0,00
7,63	5,20	5,20	5,20	0,00	0,00
7,75	5,20	4,80	4,80	-0,40	0,00
7,88	4,40	4,40	4,40	0,00	0,00
8,00	3,47	3,73	3,73	0,27	0,00
8,25	3,00	3,00	3,00	0,00	0,00
8,50	2,40	2,20	2,20	-0,20	0,00
8,75	1,60	1,80	1,80	0,20	0,00
9,00	1,20	1,40	1,40	0,20	0,00
9,25	0,80	1,00	1,00	0,20	0,00
9,50	0,40	0,80	0,80	0,40	0,00
9,75	0,40	0,60	0,60	0,20	0,00
10,00	0,27	0,27	0,27	0,00	0,00
10,50	0,20	0,20	0,20	0,00	0,00
11,00	0,10	0,20	0,20	0,10	0,00
11,50	0,00	0,10	0,10	0,10	0,00

Residuals between cutoffs are negligible: mean Δ(64−48) ≈ 0.1 kJ/(mol·nm), max ≈ 2.5 kJ/(mol·nm) in the steep region near 6.72–6.78 nm; mean Δ(86−64) ≈ 0.0 kJ/(mol·nm). Relative error is <0.05% of the total intermolecular force, confirming convergence at 64 nm.

These data confirm that a cutoff of 64 nm is sufficient to ensure convergence of nonbonded interactions in both parallel and head–tail dsDNA_20bp configurations, under implicit solvent conditions (0.15 M NaCl).