

Supplementary Material

Histidine Behaviors Effect on Structural Properties of A β (1-42) Peptide in Protonation Stage of One, Two, and Three

Yue Sun^a, Changgui Li^a, Jinping Wang^{c,*}, Hu Shi^{a,b,*}

^a School of Chemistry and Chemical Engineering, Shanxi University, Taiyuan 030006, China.

^b Institute of Molecular Science, Shanxi University, Taiyuan 030006, China.

^c Institute of Surface Analysis and Chemical Biology, University of Jinan, Jinan, Shandong 250022, P. R. China

Corresponding author: *Email: hshi@sxu.edu.cn (H. Shi) Email: ila_wangjp@ujn.edu.cn (J. Wang)

Figure S1. The convergence of our REMD simulations.

Table S1. Basic information of our REMD simulations and the averaged β -sheet contents in each system.

Table S2. Probability distributions of secondary structure in each system.

Figure S2. The contact map in each system.

Table S3. Possibility of H-bonding interaction between H6 and other residues in each system.

Table S4. Possibility of H-bonding interaction between H13 and other residues in each system.

Table S5. Possibility of H-bonding interaction between H14 and other residues in each system.

Table S6. The calculation of pKa for all three histidines in each system.

Table S7. PCC and RMSD between our REMD-Calculated and Experimental $^3J_{\text{HNHA}}$ -Coupling Constants.

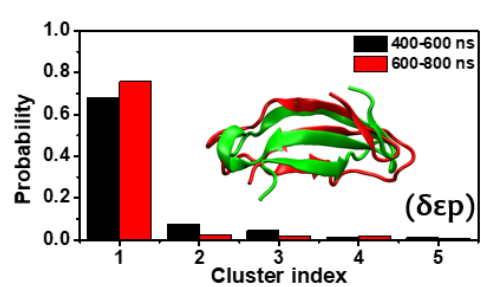
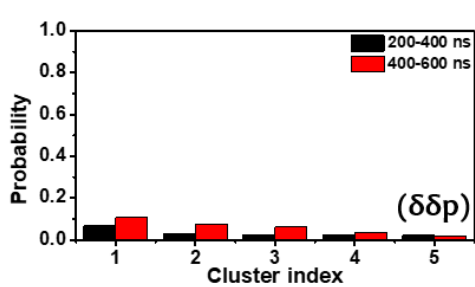
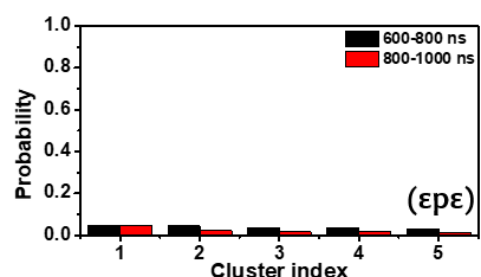
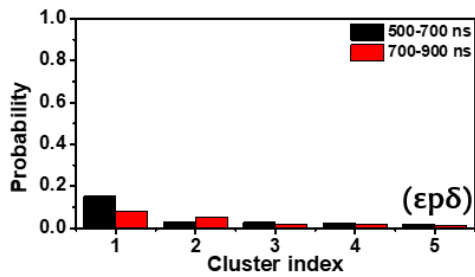
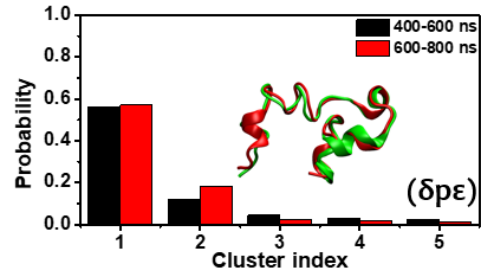
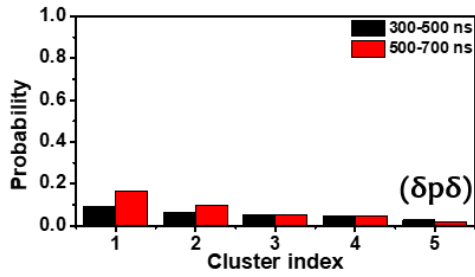
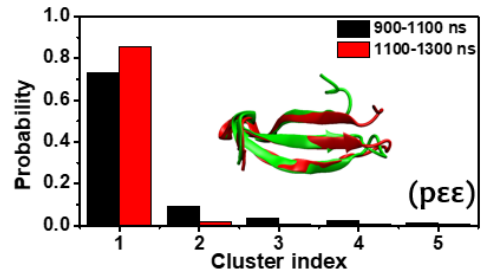
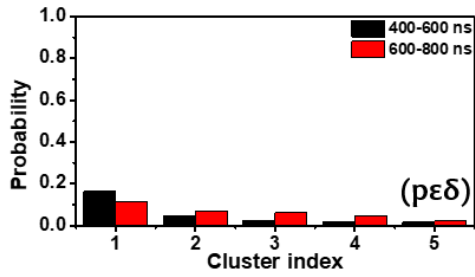
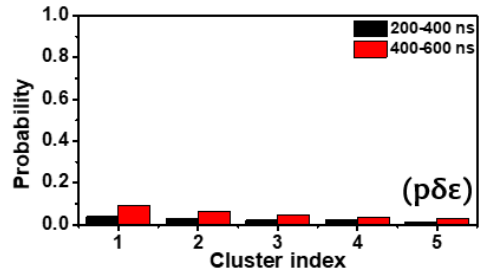
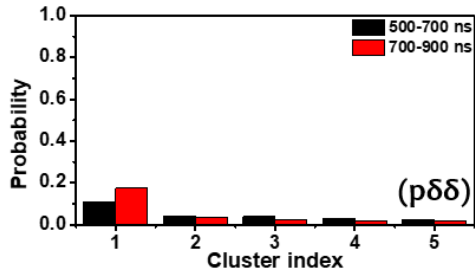


Figure S1. The convergence of our REMD simulations.

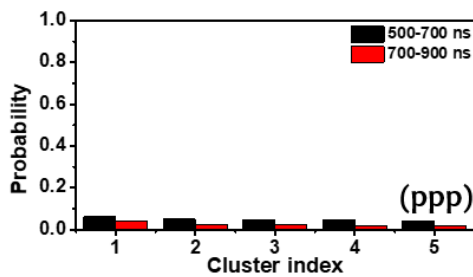
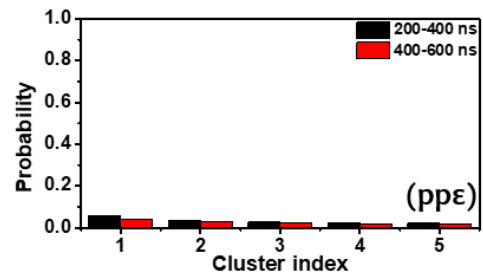
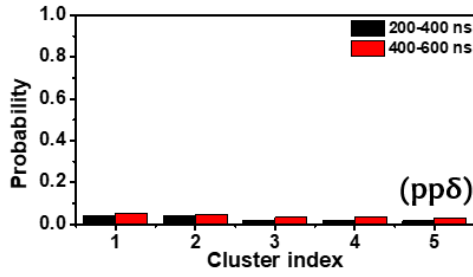
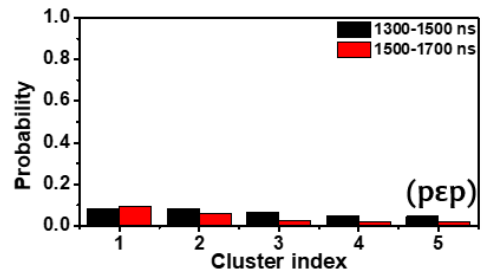
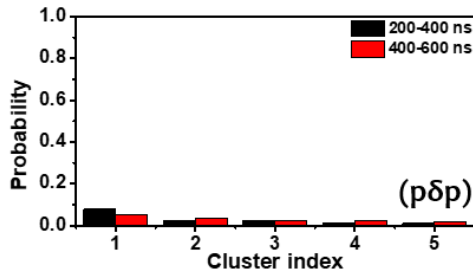
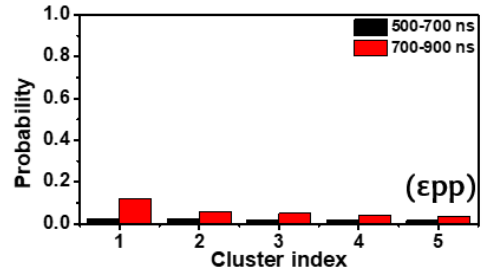
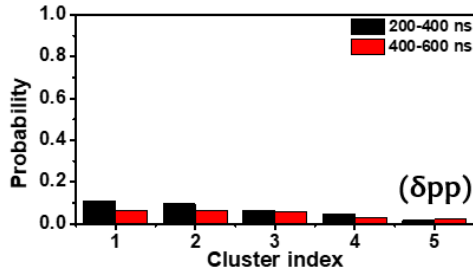
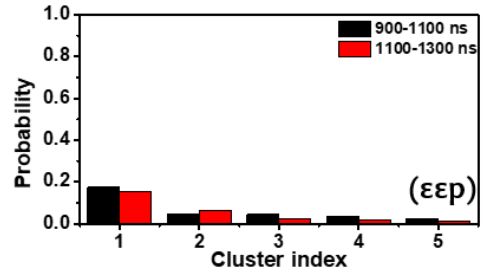
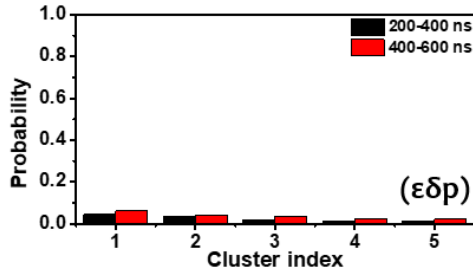


Figure S1. (Continuous figure)

Table S1. Basic information of our REMD simulations and the averaged β -sheet contents in each system.

Systems	REMD times (ns)	Convergence (ns)	Frames	Averaged β -sheet contents
(p $\delta\delta$)	900	500-900	40000	24.1%
(p $\delta\epsilon$)	600	200-600	40000	18.2%
(p $\epsilon\delta$)	800	900-1300	40000	19.1%
(p $\epsilon\epsilon$)	1300	800-1200	40000	46.0%
(δ p δ)	700	300-700	40000	16.0%
(δ p ϵ)	800	400-800	40000	13.1%
(ϵ p δ)	900	500-900	40000	24.5%
(ϵ p ϵ)	1000	600-1000	40000	17.6%
($\delta\delta$ p)	600	200-600	40000	19.2%
($\delta\epsilon$ p)	800	400-800	40000	36.6%
($\epsilon\delta$ p)	600	200-600	40000	16.4%
($\epsilon\epsilon$ p)	1300	900-1300	40000	18.6%
(δ pp)	600	200-600	40000	19.8%
(ϵ pp)	900	500-900	40000	18.7%
(p δ p)	600	200-600	40000	11.5%
(p ϵ p)	1700	1300-1700	40000	23.8%
(pp δ)	600	200-600	40000	17.5%
(pp ϵ)	600	200-600	40000	16.0%
(ppp)	900	500-900	40000	19.3%

Table S2. Probability distributions of secondary structure in each system.

(pδδ)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.001	0.016	0.014	0.003	0.000	0.021	0.000
3	0.007	0.024	0.135	0.035	0.000	0.127	0.195
4	0.027	0.027	0.175	0.156	0.000	0.135	0.128
5	0.030	0.061	0.186	0.170	0.000	0.131	0.062
6	0.024	0.068	0.112	0.169	0.000	0.175	0.133
7	0.005	0.052	0.054	0.151	0.000	0.168	0.225
8	0.044	0.038	0.041	0.074	0.000	0.178	0.234
9	0.001	0.088	0.055	0.104	0.000	0.209	0.222
10	0.000	0.192	0.072	0.152	0.000	0.198	0.250
11	0.000	0.275	0.149	0.202	0.000	0.186	0.068
12	0.109	0.279	0.161	0.245	0.001	0.121	0.037
13	0.000	0.146	0.158	0.247	0.001	0.321	0.026
14	0.001	0.021	0.114	0.235	0.001	0.511	0.045
15	0.006	0.031	0.076	0.173	0.001	0.500	0.113
16	0.112	0.340	0.034	0.066	0.001	0.193	0.068
17	0.015	0.654	0.028	0.054	0.000	0.055	0.042
18	0.015	0.500	0.033	0.056	0.000	0.062	0.088
19	0.022	0.617	0.033	0.051	0.000	0.039	0.058
20	0.024	0.490	0.022	0.054	0.000	0.042	0.041
21	0.004	0.291	0.029	0.117	0.001	0.051	0.119
22	0.000	0.179	0.084	0.175	0.001	0.213	0.198
23	0.000	0.011	0.116	0.176	0.001	0.290	0.216
24	0.005	0.009	0.121	0.174	0.001	0.370	0.193
25	0.002	0.046	0.115	0.141	0.002	0.280	0.256
26	0.001	0.027	0.085	0.067	0.001	0.366	0.301
27	0.001	0.034	0.063	0.058	0.001	0.327	0.309
28	0.006	0.027	0.034	0.064	0.001	0.275	0.369
29	0.003	0.094	0.025	0.061	0.000	0.102	0.283
30	0.008	0.346	0.022	0.066	0.000	0.056	0.069
31	0.011	0.533	0.022	0.082	0.000	0.079	0.048
32	0.101	0.524	0.027	0.131	0.000	0.072	0.050
33	0.011	0.403	0.027	0.125	0.000	0.177	0.105
34	0.024	0.490	0.029	0.121	0.001	0.189	0.057
35	0.024	0.331	0.017	0.117	0.000	0.348	0.090
36	0.112	0.135	0.019	0.043	0.000	0.406	0.107
37	0.036	0.151	0.019	0.016	0.000	0.285	0.334
38	0.012	0.202	0.027	0.009	0.000	0.243	0.175
39	0.022	0.467	0.023	0.008	0.000	0.127	0.115
40	0.041	0.506	0.016	0.008	0.000	0.086	0.082
41	0.048	0.391	0.005	0.002	0.000	0.020	0.000
42	0.001	0.068	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

($p\delta\epsilon$)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.001	0.009	0.015	0.003	0.000	0.018	0.000
3	0.004	0.031	0.127	0.035	0.000	0.118	0.198
4	0.013	0.072	0.163	0.129	0.000	0.158	0.139
5	0.041	0.134	0.163	0.140	0.000	0.120	0.068
6	0.024	0.151	0.090	0.139	0.000	0.127	0.123
7	0.012	0.169	0.042	0.115	0.000	0.140	0.176
8	0.049	0.150	0.057	0.070	0.001	0.181	0.203
9	0.001	0.104	0.087	0.080	0.001	0.239	0.198
10	0.003	0.047	0.109	0.163	0.000	0.211	0.144
11	0.002	0.039	0.139	0.232	0.001	0.230	0.204
12	0.053	0.039	0.132	0.283	0.001	0.217	0.166
13	0.000	0.075	0.116	0.283	0.001	0.271	0.089
14	0.002	0.053	0.097	0.270	0.001	0.360	0.091
15	0.001	0.154	0.082	0.208	0.001	0.278	0.108
16	0.006	0.242	0.076	0.122	0.001	0.272	0.108
17	0.035	0.259	0.070	0.115	0.000	0.123	0.083
18	0.091	0.370	0.091	0.137	0.000	0.111	0.053
19	0.103	0.351	0.087	0.124	0.000	0.088	0.068
20	0.089	0.256	0.053	0.119	0.000	0.101	0.126
21	0.005	0.158	0.034	0.191	0.001	0.122	0.158
22	0.006	0.075	0.048	0.214	0.002	0.206	0.237
23	0.000	0.032	0.088	0.255	0.002	0.304	0.175
24	0.002	0.013	0.096	0.285	0.002	0.297	0.161
25	0.002	0.023	0.120	0.263	0.003	0.234	0.159
26	0.000	0.032	0.123	0.200	0.002	0.307	0.167
27	0.000	0.036	0.092	0.144	0.002	0.373	0.221
28	0.004	0.043	0.057	0.094	0.002	0.418	0.212
29	0.002	0.043	0.034	0.091	0.002	0.255	0.207
30	0.005	0.190	0.036	0.100	0.001	0.137	0.141
31	0.014	0.293	0.031	0.116	0.001	0.123	0.178
32	0.228	0.279	0.026	0.153	0.001	0.109	0.053
33	0.007	0.256	0.031	0.119	0.001	0.387	0.107
34	0.003	0.301	0.032	0.118	0.000	0.379	0.075
35	0.008	0.389	0.022	0.112	0.000	0.351	0.059
36	0.248	0.386	0.017	0.041	0.000	0.183	0.058
37	0.020	0.126	0.010	0.012	0.000	0.372	0.196
38	0.039	0.050	0.036	0.007	0.000	0.387	0.212
39	0.110	0.159	0.035	0.006	0.000	0.301	0.126
40	0.180	0.284	0.032	0.006	0.000	0.083	0.091
41	0.110	0.222	0.005	0.004	0.000	0.030	0.000
42	0.000	0.027	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

($p\epsilon\delta$)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.015	0.015	0.018	0.003	0.000	0.018	0.000
3	0.031	0.058	0.115	0.027	0.000	0.113	0.176
4	0.027	0.104	0.150	0.103	0.000	0.136	0.137
5	0.031	0.116	0.151	0.118	0.000	0.109	0.092
6	0.027	0.127	0.092	0.117	0.001	0.126	0.119
7	0.002	0.084	0.037	0.102	0.001	0.127	0.182
8	0.022	0.092	0.038	0.075	0.000	0.155	0.301
9	0.007	0.101	0.062	0.085	0.000	0.207	0.195
10	0.002	0.111	0.076	0.137	0.000	0.197	0.260
11	0.003	0.218	0.112	0.268	0.000	0.134	0.090
12	0.009	0.157	0.127	0.338	0.001	0.214	0.074
13	0.016	0.043	0.125	0.339	0.001	0.199	0.075
14	0.000	0.116	0.081	0.367	0.001	0.233	0.143
15	0.006	0.130	0.061	0.254	0.001	0.265	0.151
16	0.008	0.181	0.052	0.140	0.001	0.293	0.096
17	0.012	0.247	0.056	0.137	0.000	0.109	0.073
18	0.009	0.411	0.073	0.140	0.001	0.120	0.039
19	0.010	0.403	0.072	0.127	0.001	0.103	0.126
20	0.029	0.434	0.047	0.123	0.000	0.112	0.049
21	0.019	0.257	0.036	0.159	0.001	0.128	0.129
22	0.003	0.113	0.052	0.245	0.001	0.216	0.219
23	0.000	0.019	0.065	0.241	0.001	0.256	0.188
24	0.002	0.008	0.070	0.235	0.001	0.294	0.284
25	0.002	0.023	0.083	0.192	0.001	0.244	0.285
26	0.003	0.033	0.089	0.122	0.001	0.216	0.299
27	0.000	0.020	0.088	0.117	0.000	0.351	0.264
28	0.001	0.025	0.067	0.109	0.000	0.385	0.229
29	0.002	0.078	0.046	0.068	0.001	0.219	0.183
30	0.010	0.315	0.036	0.076	0.000	0.068	0.099
31	0.014	0.443	0.026	0.109	0.000	0.092	0.067
32	0.244	0.383	0.029	0.189	0.001	0.059	0.036
33	0.011	0.369	0.028	0.178	0.001	0.304	0.035
34	0.018	0.184	0.040	0.175	0.001	0.389	0.118
35	0.027	0.210	0.025	0.168	0.001	0.393	0.119
36	0.239	0.186	0.025	0.070	0.001	0.327	0.078
37	0.022	0.037	0.012	0.023	0.001	0.360	0.211
38	0.006	0.097	0.023	0.010	0.001	0.225	0.384
39	0.038	0.381	0.022	0.010	0.001	0.121	0.139
40	0.065	0.397	0.016	0.009	0.001	0.072	0.118
41	0.065	0.252	0.004	0.001	0.001	0.024	0.000
42	0.001	0.011	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

(pεε)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.001	0.004	0.017	0.002	0.000	0.029	0.000
3	0.000	0.037	0.076	0.008	0.000	0.121	0.243
4	0.001	0.087	0.083	0.031	0.000	0.219	0.194
5	0.001	0.243	0.071	0.033	0.000	0.170	0.195
6	0.003	0.693	0.017	0.032	0.000	0.043	0.068
7	0.002	0.817	0.009	0.030	0.000	0.025	0.034
8	0.003	0.815	0.009	0.012	0.000	0.027	0.035
9	0.000	0.801	0.010	0.009	0.000	0.020	0.037
10	0.000	0.858	0.009	0.010	0.000	0.018	0.018
11	0.000	0.035	0.008	0.013	0.000	0.019	0.872
12	0.002	0.849	0.008	0.019	0.000	0.018	0.060
13	0.000	0.063	0.414	0.019	0.000	0.457	0.019
14	0.000	0.065	0.413	0.019	0.000	0.460	0.022
15	0.000	0.004	0.410	0.015	0.000	0.486	0.037
16	0.000	0.037	0.003	0.006	0.000	0.887	0.029
17	0.000	0.958	0.002	0.005	0.000	0.003	0.006
18	0.007	0.969	0.002	0.006	0.000	0.003	0.003
19	0.008	0.966	0.002	0.005	0.000	0.003	0.003
20	0.001	0.951	0.001	0.003	0.000	0.005	0.007
21	0.000	0.928	0.001	0.004	0.000	0.007	0.031
22	0.000	0.877	0.002	0.012	0.000	0.013	0.045
23	0.000	0.445	0.005	0.020	0.000	0.063	0.133
24	0.000	0.106	0.009	0.022	0.000	0.106	0.266
25	0.000	0.068	0.016	0.026	0.000	0.192	0.561
26	0.000	0.014	0.018	0.019	0.000	0.329	0.550
27	0.000	0.049	0.016	0.019	0.000	0.447	0.442
28	0.001	0.172	0.009	0.008	0.000	0.345	0.200
29	0.001	0.185	0.008	0.006	0.000	0.025	0.029
30	0.007	0.670	0.007	0.008	0.000	0.014	0.061
31	0.010	0.939	0.004	0.008	0.000	0.006	0.001
32	0.013	0.030	0.005	0.014	0.000	0.122	0.027
33	0.000	0.824	0.003	0.010	0.000	0.140	0.005
34	0.000	0.815	0.006	0.009	0.000	0.148	0.007
35	0.001	0.929	0.004	0.009	0.000	0.037	0.011
36	0.012	0.906	0.004	0.004	0.000	0.038	0.016
37	0.005	0.104	0.002	0.001	0.000	0.784	0.058
38	0.000	0.122	0.003	0.001	0.000	0.767	0.054
39	0.001	0.174	0.003	0.001	0.000	0.725	0.026
40	0.001	0.870	0.002	0.001	0.000	0.016	0.024
41	0.003	0.747	0.001	0.000	0.000	0.005	0.000
42	0.000	0.045	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

$(\delta p \delta)$	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.003	0.025	0.011	0.003	0.000	0.018	0.000
3	0.003	0.057	0.119	0.042	0.000	0.076	0.176
4	0.064	0.126	0.153	0.135	0.001	0.159	0.091
5	0.011	0.126	0.152	0.143	0.001	0.198	0.059
6	0.008	0.016	0.080	0.144	0.001	0.316	0.122
7	0.008	0.082	0.042	0.113	0.001	0.281	0.165
8	0.095	0.055	0.040	0.047	0.000	0.222	0.181
9	0.007	0.071	0.048	0.111	0.000	0.195	0.240
10	0.069	0.098	0.058	0.156	0.000	0.225	0.185
11	0.099	0.083	0.094	0.206	0.000	0.205	0.190
12	0.100	0.117	0.097	0.275	0.001	0.127	0.140
13	0.030	0.157	0.103	0.264	0.001	0.094	0.080
14	0.001	0.068	0.087	0.379	0.001	0.164	0.099
15	0.001	0.033	0.070	0.344	0.001	0.150	0.128
16	0.003	0.139	0.056	0.191	0.001	0.194	0.195
17	0.004	0.104	0.058	0.236	0.000	0.123	0.128
18	0.013	0.166	0.074	0.262	0.000	0.187	0.082
19	0.071	0.233	0.075	0.263	0.000	0.112	0.047
20	0.016	0.152	0.046	0.271	0.000	0.172	0.038
21	0.004	0.127	0.038	0.333	0.002	0.148	0.170
22	0.002	0.076	0.044	0.298	0.003	0.200	0.275
23	0.049	0.017	0.054	0.419	0.003	0.220	0.117
24	0.006	0.028	0.057	0.360	0.004	0.308	0.130
25	0.000	0.012	0.070	0.328	0.005	0.323	0.155
26	0.001	0.030	0.067	0.259	0.004	0.303	0.193
27	0.000	0.059	0.058	0.226	0.004	0.333	0.163
28	0.009	0.066	0.081	0.235	0.004	0.299	0.156
29	0.007	0.045	0.085	0.186	0.003	0.325	0.170
30	0.032	0.176	0.084	0.194	0.001	0.121	0.160
31	0.005	0.372	0.036	0.201	0.001	0.146	0.062
32	0.189	0.098	0.028	0.216	0.002	0.287	0.034
33	0.004	0.172	0.025	0.090	0.002	0.597	0.070
34	0.007	0.152	0.038	0.095	0.001	0.474	0.097
35	0.015	0.380	0.033	0.090	0.001	0.300	0.101
36	0.186	0.295	0.036	0.038	0.001	0.169	0.138
37	0.023	0.023	0.020	0.018	0.001	0.372	0.347
38	0.007	0.094	0.025	0.007	0.000	0.330	0.274
39	0.079	0.291	0.019	0.006	0.000	0.224	0.112
40	0.123	0.465	0.014	0.006	0.000	0.066	0.086
41	0.129	0.331	0.003	0.002	0.000	0.018	0.000
42	0.026	0.014	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

($\delta p\epsilon$)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.001	0.010	0.011	0.003	0.000	0.016	0.000
3	0.002	0.036	0.128	0.081	0.001	0.103	0.182
4	0.003	0.059	0.212	0.226	0.001	0.130	0.091
5	0.006	0.048	0.230	0.232	0.001	0.171	0.044
6	0.004	0.029	0.177	0.231	0.001	0.264	0.050
7	0.001	0.021	0.083	0.165	0.001	0.318	0.157
8	0.611	0.009	0.030	0.019	0.000	0.086	0.068
9	0.000	0.007	0.035	0.014	0.000	0.709	0.119
10	0.000	0.007	0.038	0.015	0.000	0.769	0.104
11	0.001	0.020	0.028	0.018	0.000	0.759	0.093
12	0.867	0.015	0.022	0.019	0.000	0.033	0.016
13	0.001	0.016	0.015	0.017	0.000	0.906	0.015
14	0.000	0.012	0.009	0.017	0.000	0.907	0.016
15	0.001	0.014	0.005	0.012	0.000	0.894	0.028
16	0.866	0.040	0.005	0.006	0.000	0.021	0.021
17	0.002	0.038	0.008	0.010	0.000	0.016	0.879
18	0.004	0.049	0.010	0.017	0.000	0.007	0.007
19	0.861	0.053	0.012	0.018	0.000	0.009	0.014
20	0.120	0.047	0.007	0.019	0.000	0.015	0.008
21	0.020	0.015	0.071	0.477	0.001	0.213	0.053
22	0.000	0.003	0.070	0.480	0.001	0.230	0.109
23	0.001	0.002	0.076	0.481	0.001	0.265	0.105
24	0.003	0.002	0.017	0.482	0.001	0.200	0.194
25	0.002	0.002	0.027	0.040	0.001	0.143	0.351
26	0.002	0.001	0.027	0.028	0.001	0.063	0.608
27	0.000	0.003	0.160	0.050	0.001	0.505	0.178
28	0.002	0.002	0.199	0.310	0.001	0.393	0.063
29	0.000	0.007	0.200	0.641	0.000	0.092	0.038
30	0.002	0.017	0.187	0.641	0.000	0.080	0.011
31	0.003	0.050	0.024	0.637	0.000	0.257	0.007
32	0.011	0.014	0.015	0.503	0.000	0.401	0.016
33	0.001	0.041	0.010	0.025	0.000	0.874	0.031
34	0.003	0.040	0.010	0.025	0.000	0.032	0.139
35	0.860	0.046	0.004	0.024	0.000	0.032	0.021
36	0.121	0.041	0.176	0.010	0.000	0.425	0.101
37	0.037	0.020	0.178	0.011	0.000	0.452	0.155
38	0.002	0.015	0.210	0.021	0.000	0.180	0.217
39	0.006	0.032	0.181	0.021	0.000	0.223	0.145
40	0.016	0.115	0.084	0.021	0.000	0.210	0.120
41	0.022	0.081	0.012	0.012	0.000	0.090	0.000
42	0.000	0.010	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

($\epsilon\rho\delta$)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.002	0.122	0.007	0.001	0.000	0.013	0.000
3	0.025	0.155	0.043	0.011	0.000	0.083	0.219
4	0.014	0.214	0.054	0.075	0.000	0.106	0.142
5	0.012	0.196	0.056	0.082	0.000	0.082	0.117
6	0.006	0.142	0.071	0.085	0.000	0.178	0.166
7	0.002	0.103	0.080	0.088	0.000	0.227	0.174
8	0.013	0.028	0.091	0.095	0.001	0.215	0.204
9	0.001	0.036	0.074	0.135	0.001	0.181	0.317
10	0.004	0.063	0.073	0.167	0.001	0.174	0.323
11	0.006	0.070	0.111	0.188	0.001	0.165	0.267
12	0.014	0.096	0.130	0.200	0.001	0.227	0.073
13	0.014	0.166	0.116	0.162	0.000	0.263	0.071
14	0.016	0.235	0.054	0.130	0.000	0.254	0.086
15	0.005	0.339	0.018	0.094	0.000	0.126	0.123
16	0.011	0.435	0.023	0.029	0.000	0.114	0.101
17	0.012	0.470	0.038	0.041	0.000	0.075	0.099
18	0.034	0.554	0.059	0.086	0.000	0.054	0.050
19	0.024	0.507	0.059	0.093	0.001	0.062	0.072
20	0.020	0.331	0.038	0.095	0.001	0.077	0.112
21	0.001	0.238	0.024	0.127	0.004	0.090	0.111
22	0.001	0.117	0.051	0.203	0.008	0.229	0.174
23	0.000	0.038	0.076	0.213	0.008	0.430	0.139
24	0.003	0.014	0.091	0.219	0.011	0.436	0.131
25	0.002	0.030	0.113	0.215	0.011	0.286	0.211
26	0.000	0.078	0.111	0.133	0.009	0.305	0.164
27	0.001	0.142	0.089	0.117	0.009	0.300	0.164
28	0.004	0.175	0.051	0.104	0.009	0.272	0.208
29	0.002	0.231	0.035	0.093	0.004	0.167	0.176
30	0.002	0.340	0.035	0.097	0.000	0.104	0.130
31	0.012	0.433	0.025	0.107	0.000	0.084	0.072
32	0.151	0.377	0.056	0.176	0.000	0.083	0.030
33	0.004	0.384	0.055	0.129	0.001	0.288	0.060
34	0.001	0.299	0.069	0.125	0.000	0.295	0.101
35	0.003	0.351	0.032	0.123	0.001	0.279	0.116
36	0.158	0.300	0.031	0.031	0.001	0.279	0.117
37	0.019	0.037	0.017	0.015	0.000	0.455	0.212
38	0.006	0.145	0.018	0.011	0.000	0.379	0.217
39	0.024	0.495	0.016	0.007	0.000	0.142	0.092
40	0.076	0.592	0.011	0.007	0.000	0.051	0.059
41	0.039	0.458	0.003	0.002	0.000	0.015	0.000
42	0.001	0.056	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

($\epsilon\mu\epsilon$)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.001	0.021	0.010	0.002	0.000	0.018	0.000
3	0.002	0.065	0.056	0.014	0.000	0.098	0.216
4	0.004	0.168	0.073	0.126	0.000	0.119	0.134
5	0.015	0.194	0.078	0.135	0.000	0.094	0.093
6	0.015	0.164	0.080	0.139	0.000	0.187	0.160
7	0.001	0.128	0.098	0.138	0.000	0.230	0.186
8	0.015	0.061	0.104	0.078	0.000	0.257	0.200
9	0.008	0.026	0.106	0.104	0.000	0.239	0.195
10	0.015	0.011	0.104	0.149	0.000	0.239	0.260
11	0.014	0.019	0.173	0.214	0.001	0.282	0.150
12	0.019	0.025	0.167	0.285	0.002	0.275	0.099
13	0.002	0.024	0.142	0.271	0.002	0.246	0.085
14	0.005	0.053	0.047	0.252	0.002	0.298	0.153
15	0.013	0.105	0.030	0.165	0.001	0.193	0.229
16	0.007	0.315	0.031	0.074	0.000	0.162	0.125
17	0.022	0.425	0.047	0.070	0.000	0.085	0.050
18	0.019	0.354	0.051	0.080	0.000	0.117	0.047
19	0.037	0.364	0.049	0.054	0.000	0.081	0.085
20	0.031	0.367	0.030	0.063	0.000	0.108	0.090
21	0.002	0.201	0.022	0.199	0.001	0.114	0.114
22	0.004	0.103	0.038	0.294	0.001	0.185	0.198
23	0.000	0.022	0.044	0.337	0.001	0.299	0.152
24	0.002	0.009	0.089	0.337	0.001	0.340	0.150
25	0.001	0.009	0.095	0.292	0.002	0.294	0.192
26	0.002	0.029	0.094	0.155	0.002	0.375	0.187
27	0.000	0.066	0.059	0.142	0.002	0.367	0.167
28	0.013	0.121	0.048	0.103	0.002	0.262	0.231
29	0.002	0.143	0.036	0.075	0.003	0.133	0.240
30	0.017	0.323	0.038	0.084	0.002	0.074	0.075
31	0.024	0.387	0.046	0.116	0.002	0.181	0.066
32	0.161	0.222	0.057	0.241	0.002	0.149	0.037
33	0.001	0.222	0.070	0.239	0.002	0.303	0.090
34	0.001	0.243	0.066	0.237	0.000	0.312	0.054
35	0.011	0.237	0.039	0.228	0.001	0.331	0.053
36	0.178	0.193	0.027	0.078	0.001	0.291	0.117
37	0.062	0.044	0.024	0.026	0.001	0.347	0.241
38	0.009	0.092	0.029	0.015	0.001	0.388	0.226
39	0.028	0.318	0.029	0.014	0.001	0.188	0.150
40	0.070	0.367	0.023	0.011	0.001	0.128	0.089
41	0.099	0.264	0.006	0.003	0.000	0.029	0.000
42	0.001	0.018	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

($\delta\delta_p$)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.003	0.098	0.010	0.003	0.000	0.016	0.000
3	0.010	0.121	0.069	0.029	0.000	0.085	0.182
4	0.011	0.115	0.101	0.123	0.000	0.119	0.126
5	0.037	0.139	0.102	0.133	0.000	0.098	0.072
6	0.024	0.117	0.076	0.149	0.002	0.143	0.114
7	0.017	0.098	0.060	0.133	0.002	0.159	0.178
8	0.006	0.070	0.070	0.115	0.002	0.204	0.234
9	0.000	0.010	0.116	0.207	0.003	0.237	0.260
10	0.000	0.018	0.137	0.260	0.003	0.232	0.155
11	0.000	0.001	0.315	0.328	0.001	0.249	0.058
12	0.002	0.000	0.313	0.380	0.001	0.250	0.033
13	0.000	0.003	0.300	0.343	0.001	0.208	0.070
14	0.001	0.041	0.126	0.296	0.000	0.262	0.079
15	0.002	0.097	0.019	0.231	0.000	0.119	0.206
16	0.004	0.222	0.024	0.087	0.000	0.188	0.164
17	0.004	0.440	0.047	0.066	0.000	0.100	0.075
18	0.008	0.465	0.083	0.101	0.000	0.129	0.079
19	0.022	0.355	0.079	0.093	0.000	0.137	0.076
20	0.005	0.350	0.052	0.094	0.000	0.084	0.179
21	0.002	0.284	0.024	0.108	0.004	0.080	0.207
22	0.003	0.131	0.039	0.119	0.004	0.188	0.273
23	0.001	0.037	0.064	0.135	0.004	0.300	0.278
24	0.019	0.029	0.089	0.207	0.004	0.354	0.159
25	0.001	0.009	0.091	0.224	0.005	0.274	0.206
26	0.001	0.017	0.092	0.190	0.001	0.255	0.244
27	0.002	0.041	0.059	0.178	0.001	0.271	0.272
28	0.015	0.105	0.040	0.102	0.001	0.272	0.311
29	0.002	0.161	0.024	0.102	0.002	0.086	0.176
30	0.007	0.307	0.023	0.105	0.001	0.058	0.193
31	0.003	0.589	0.020	0.115	0.001	0.051	0.049
32	0.074	0.370	0.029	0.164	0.002	0.185	0.044
33	0.001	0.221	0.039	0.127	0.002	0.324	0.171
34	0.003	0.297	0.042	0.124	0.001	0.287	0.112
35	0.007	0.451	0.025	0.120	0.001	0.206	0.084
36	0.087	0.363	0.019	0.035	0.001	0.221	0.131
37	0.023	0.054	0.015	0.012	0.001	0.455	0.233
38	0.007	0.083	0.026	0.010	0.000	0.437	0.217
39	0.021	0.388	0.023	0.008	0.000	0.205	0.108
40	0.043	0.513	0.018	0.008	0.000	0.073	0.066
41	0.050	0.327	0.004	0.003	0.000	0.027	0.000
42	0.005	0.033	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

($\delta\epsilon_p$)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.001	0.048	0.003	0.001	0.000	0.010	0.000
3	0.004	0.113	0.021	0.007	0.000	0.025	0.345
4	0.004	0.624	0.027	0.029	0.000	0.027	0.055
5	0.003	0.816	0.027	0.031	0.000	0.024	0.016
6	0.000	0.746	0.015	0.031	0.000	0.032	0.066
7	0.000	0.529	0.011	0.027	0.000	0.035	0.073
8	0.008	0.170	0.013	0.016	0.000	0.042	0.121
9	0.001	0.008	0.020	0.018	0.000	0.063	0.268
10	0.001	0.002	0.032	0.032	0.000	0.129	0.648
11	0.000	0.035	0.050	0.062	0.000	0.120	0.477
12	0.005	0.037	0.057	0.078	0.000	0.344	0.381
13	0.000	0.039	0.054	0.078	0.000	0.583	0.191
14	0.000	0.041	0.026	0.073	0.000	0.421	0.379
15	0.009	0.401	0.005	0.047	0.000	0.044	0.075
16	0.013	0.817	0.005	0.017	0.000	0.046	0.026
17	0.002	0.848	0.018	0.020	0.000	0.020	0.029
18	0.007	0.868	0.024	0.031	0.000	0.020	0.018
19	0.005	0.868	0.025	0.031	0.000	0.022	0.019
20	0.005	0.729	0.013	0.031	0.000	0.029	0.023
21	0.003	0.217	0.011	0.040	0.002	0.059	0.212
22	0.005	0.102	0.112	0.069	0.002	0.247	0.289
23	0.000	0.028	0.137	0.068	0.001	0.350	0.202
24	0.002	0.006	0.160	0.071	0.001	0.426	0.250
25	0.000	0.003	0.082	0.067	0.002	0.358	0.305
26	0.000	0.017	0.067	0.035	0.000	0.330	0.308
27	0.001	0.076	0.044	0.034	0.000	0.318	0.350
28	0.002	0.112	0.034	0.030	0.000	0.323	0.225
29	0.003	0.103	0.021	0.035	0.000	0.134	0.104
30	0.001	0.314	0.019	0.035	0.000	0.054	0.101
31	0.016	0.808	0.005	0.036	0.000	0.022	0.046
32	0.028	0.061	0.005	0.043	0.000	0.026	0.057
33	0.000	0.810	0.010	0.025	0.000	0.080	0.019
34	0.002	0.819	0.011	0.024	0.000	0.066	0.052
35	0.008	0.854	0.010	0.022	0.000	0.045	0.032
36	0.025	0.795	0.005	0.007	0.000	0.058	0.052
37	0.061	0.051	0.005	0.003	0.000	0.662	0.110
38	0.002	0.086	0.009	0.003	0.000	0.700	0.115
39	0.006	0.682	0.007	0.003	0.000	0.122	0.058
40	0.024	0.765	0.005	0.002	0.000	0.078	0.028
41	0.077	0.581	0.001	0.001	0.000	0.006	0.000
42	0.000	0.031	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

($\epsilon\delta p$)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.000	0.046	0.010	0.002	0.000	0.019	0.000
3	0.011	0.076	0.064	0.019	0.000	0.096	0.201
4	0.030	0.112	0.078	0.128	0.000	0.134	0.118
5	0.005	0.120	0.080	0.136	0.000	0.129	0.091
6	0.003	0.091	0.074	0.140	0.000	0.205	0.172
7	0.010	0.063	0.073	0.137	0.000	0.197	0.184
8	0.005	0.056	0.091	0.158	0.001	0.221	0.190
9	0.001	0.026	0.094	0.250	0.001	0.197	0.190
10	0.001	0.019	0.102	0.344	0.001	0.160	0.172
11	0.006	0.056	0.226	0.424	0.001	0.194	0.046
12	0.002	0.001	0.232	0.432	0.001	0.288	0.022
13	0.000	0.000	0.224	0.367	0.001	0.273	0.080
14	0.001	0.015	0.120	0.324	0.001	0.321	0.048
15	0.002	0.097	0.040	0.247	0.001	0.198	0.104
16	0.004	0.192	0.027	0.098	0.001	0.238	0.122
17	0.007	0.335	0.043	0.056	0.000	0.124	0.124
18	0.056	0.325	0.072	0.106	0.000	0.070	0.124
19	0.020	0.370	0.077	0.123	0.001	0.106	0.062
20	0.009	0.262	0.051	0.129	0.001	0.121	0.081
21	0.001	0.135	0.024	0.176	0.001	0.153	0.126
22	0.000	0.087	0.034	0.227	0.001	0.223	0.245
23	0.000	0.071	0.056	0.213	0.001	0.262	0.188
24	0.039	0.026	0.085	0.230	0.001	0.313	0.150
25	0.003	0.022	0.102	0.214	0.002	0.283	0.186
26	0.001	0.014	0.106	0.117	0.002	0.393	0.170
27	0.036	0.045	0.079	0.111	0.002	0.373	0.207
28	0.041	0.065	0.069	0.099	0.003	0.261	0.205
29	0.002	0.104	0.058	0.107	0.003	0.120	0.209
30	0.007	0.267	0.056	0.111	0.003	0.077	0.114
31	0.017	0.396	0.033	0.121	0.003	0.102	0.060
32	0.235	0.287	0.034	0.148	0.003	0.105	0.046
33	0.032	0.289	0.041	0.111	0.002	0.394	0.063
34	0.007	0.291	0.043	0.113	0.001	0.387	0.061
35	0.013	0.245	0.024	0.109	0.001	0.395	0.102
36	0.193	0.260	0.021	0.047	0.001	0.247	0.121
37	0.055	0.064	0.021	0.025	0.001	0.294	0.296
38	0.003	0.081	0.026	0.016	0.000	0.322	0.279
39	0.041	0.268	0.022	0.016	0.000	0.184	0.141
40	0.033	0.364	0.014	0.015	0.000	0.104	0.100
41	0.061	0.261	0.003	0.002	0.000	0.022	0.000
42	0.000	0.018	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

(ϵp)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.001	0.018	0.008	0.001	0.000	0.015	0.000
3	0.010	0.050	0.045	0.011	0.000	0.075	0.253
4	0.059	0.114	0.056	0.055	0.000	0.108	0.142
5	0.052	0.163	0.056	0.060	0.000	0.089	0.087
6	0.003	0.127	0.069	0.061	0.000	0.202	0.192
7	0.001	0.039	0.081	0.057	0.000	0.258	0.254
8	0.005	0.057	0.086	0.035	0.000	0.204	0.249
9	0.001	0.077	0.078	0.048	0.000	0.167	0.239
10	0.002	0.196	0.080	0.080	0.000	0.181	0.137
11	0.001	0.166	0.136	0.246	0.000	0.228	0.113
12	0.001	0.155	0.148	0.298	0.000	0.268	0.086
13	0.001	0.003	0.141	0.297	0.000	0.377	0.095
14	0.000	0.084	0.064	0.284	0.000	0.349	0.079
15	0.025	0.181	0.026	0.155	0.000	0.334	0.122
16	0.057	0.358	0.028	0.078	0.000	0.193	0.101
17	0.052	0.366	0.065	0.103	0.000	0.065	0.094
18	0.041	0.429	0.099	0.178	0.001	0.097	0.034
19	0.062	0.255	0.097	0.188	0.001	0.078	0.190
20	0.027	0.207	0.059	0.190	0.001	0.115	0.059
21	0.003	0.161	0.020	0.371	0.002	0.147	0.087
22	0.001	0.130	0.029	0.342	0.002	0.217	0.133
23	0.002	0.071	0.051	0.338	0.002	0.242	0.150
24	0.045	0.007	0.083	0.325	0.002	0.347	0.123
25	0.001	0.018	0.094	0.225	0.003	0.433	0.129
26	0.002	0.022	0.091	0.088	0.001	0.492	0.167
27	0.000	0.083	0.054	0.077	0.001	0.364	0.237
28	0.050	0.118	0.068	0.136	0.001	0.180	0.154
29	0.005	0.132	0.067	0.210	0.001	0.132	0.172
30	0.003	0.203	0.073	0.216	0.001	0.102	0.104
31	0.008	0.313	0.049	0.239	0.001	0.174	0.056
32	0.134	0.174	0.039	0.269	0.001	0.204	0.047
33	0.015	0.199	0.041	0.123	0.001	0.463	0.080
34	0.004	0.240	0.074	0.128	0.000	0.327	0.093
35	0.037	0.355	0.065	0.120	0.001	0.281	0.061
36	0.154	0.312	0.059	0.050	0.001	0.224	0.098
37	0.033	0.038	0.021	0.022	0.001	0.405	0.241
38	0.007	0.126	0.021	0.008	0.000	0.403	0.211
39	0.014	0.308	0.021	0.008	0.000	0.319	0.105
40	0.054	0.477	0.017	0.007	0.000	0.076	0.088
41	0.062	0.234	0.004	0.003	0.000	0.027	0.000
42	0.001	0.043	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

(δ_{pp})	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.005	0.009	0.014	0.004	0.000	0.019	0.000
3	0.017	0.014	0.129	0.049	0.001	0.114	0.183
4	0.019	0.065	0.177	0.166	0.001	0.161	0.105
5	0.024	0.058	0.179	0.177	0.001	0.146	0.067
6	0.011	0.049	0.122	0.177	0.001	0.196	0.129
7	0.003	0.048	0.083	0.146	0.001	0.213	0.179
8	0.006	0.052	0.072	0.089	0.001	0.235	0.236
9	0.002	0.052	0.086	0.102	0.000	0.234	0.269
10	0.003	0.132	0.089	0.135	0.000	0.199	0.145
11	0.041	0.185	0.187	0.166	0.000	0.130	0.118
12	0.040	0.191	0.207	0.169	0.001	0.184	0.128
13	0.025	0.021	0.193	0.155	0.001	0.393	0.072
14	0.001	0.041	0.117	0.142	0.001	0.451	0.101
15	0.035	0.163	0.051	0.083	0.001	0.251	0.219
16	0.035	0.362	0.055	0.022	0.001	0.089	0.126
17	0.076	0.424	0.041	0.052	0.000	0.053	0.071
18	0.066	0.412	0.076	0.129	0.000	0.088	0.061
19	0.069	0.437	0.079	0.140	0.001	0.114	0.047
20	0.045	0.378	0.050	0.151	0.001	0.131	0.030
21	0.000	0.197	0.051	0.295	0.002	0.176	0.083
22	0.016	0.143	0.061	0.304	0.002	0.229	0.146
23	0.016	0.057	0.077	0.304	0.002	0.280	0.096
24	0.006	0.050	0.065	0.276	0.002	0.320	0.181
25	0.001	0.035	0.073	0.196	0.002	0.286	0.227
26	0.009	0.047	0.082	0.112	0.001	0.314	0.236
27	0.000	0.056	0.065	0.092	0.000	0.438	0.193
28	0.006	0.032	0.053	0.098	0.001	0.352	0.231
29	0.002	0.045	0.043	0.090	0.001	0.194	0.233
30	0.063	0.205	0.045	0.087	0.000	0.122	0.122
31	0.013	0.280	0.043	0.100	0.000	0.135	0.060
32	0.200	0.180	0.054	0.209	0.001	0.145	0.093
33	0.012	0.121	0.055	0.162	0.001	0.403	0.131
34	0.012	0.141	0.057	0.166	0.001	0.386	0.095
35	0.010	0.300	0.032	0.161	0.001	0.285	0.082
36	0.240	0.225	0.028	0.027	0.001	0.240	0.082
37	0.007	0.124	0.016	0.019	0.000	0.351	0.215
38	0.026	0.129	0.041	0.020	0.000	0.292	0.314
39	0.060	0.426	0.040	0.019	0.000	0.148	0.092
40	0.151	0.454	0.035	0.019	0.000	0.054	0.064
41	0.124	0.376	0.006	0.014	0.000	0.038	0.000
42	0.017	0.048	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

(ϵ_{pp})	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.004	0.010	0.010	0.001	0.000	0.018	0.000
3	0.011	0.026	0.053	0.011	0.000	0.095	0.242
4	0.006	0.126	0.071	0.095	0.000	0.125	0.134
5	0.009	0.125	0.076	0.107	0.000	0.105	0.107
6	0.009	0.017	0.082	0.109	0.000	0.304	0.195
7	0.003	0.007	0.082	0.106	0.000	0.350	0.184
8	0.028	0.007	0.094	0.070	0.000	0.315	0.210
9	0.000	0.107	0.096	0.085	0.000	0.215	0.221
10	0.001	0.126	0.114	0.100	0.000	0.262	0.208
11	0.001	0.060	0.193	0.126	0.000	0.305	0.149
12	0.287	0.052	0.191	0.129	0.000	0.194	0.063
13	0.001	0.016	0.165	0.105	0.000	0.506	0.073
14	0.012	0.060	0.062	0.092	0.000	0.497	0.077
15	0.033	0.063	0.007	0.055	0.000	0.364	0.175
16	0.344	0.168	0.021	0.020	0.000	0.086	0.117
17	0.013	0.150	0.076	0.065	0.000	0.075	0.341
18	0.029	0.375	0.100	0.128	0.000	0.098	0.071
19	0.014	0.357	0.099	0.148	0.000	0.137	0.097
20	0.034	0.304	0.045	0.155	0.000	0.106	0.082
21	0.007	0.272	0.023	0.178	0.004	0.111	0.085
22	0.003	0.246	0.039	0.229	0.004	0.184	0.165
23	0.001	0.103	0.064	0.234	0.004	0.222	0.175
24	0.017	0.024	0.103	0.221	0.005	0.284	0.156
25	0.003	0.066	0.107	0.228	0.006	0.229	0.235
26	0.002	0.022	0.104	0.153	0.003	0.329	0.234
27	0.002	0.013	0.066	0.145	0.003	0.455	0.209
28	0.015	0.063	0.041	0.112	0.003	0.348	0.257
29	0.002	0.100	0.030	0.098	0.003	0.139	0.185
30	0.006	0.309	0.034	0.136	0.001	0.082	0.112
31	0.009	0.408	0.031	0.166	0.001	0.103	0.044
32	0.093	0.150	0.041	0.261	0.002	0.127	0.049
33	0.001	0.291	0.047	0.221	0.001	0.269	0.081
34	0.003	0.281	0.055	0.217	0.001	0.305	0.049
35	0.023	0.337	0.031	0.213	0.001	0.261	0.066
36	0.157	0.226	0.025	0.115	0.001	0.256	0.095
37	0.023	0.077	0.015	0.028	0.001	0.476	0.207
38	0.003	0.110	0.023	0.006	0.001	0.456	0.221
39	0.029	0.353	0.017	0.005	0.000	0.188	0.172
40	0.082	0.441	0.013	0.004	0.000	0.064	0.132
41	0.082	0.384	0.003	0.002	0.000	0.018	0.000
42	0.001	0.047	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

(p δ p)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.002	0.006	0.021	0.005	0.000	0.026	0.000
3	0.005	0.013	0.156	0.039	0.000	0.155	0.199
4	0.011	0.032	0.200	0.178	0.000	0.166	0.111
5	0.017	0.024	0.201	0.205	0.001	0.131	0.086
6	0.016	0.062	0.120	0.205	0.001	0.159	0.128
7	0.006	0.045	0.054	0.185	0.001	0.164	0.170
8	0.006	0.012	0.041	0.110	0.001	0.217	0.225
9	0.002	0.007	0.084	0.136	0.001	0.247	0.247
10	0.006	0.006	0.125	0.272	0.001	0.206	0.154
11	0.005	0.005	0.256	0.355	0.001	0.194	0.090
12	0.002	0.004	0.262	0.487	0.001	0.170	0.026
13	0.001	0.017	0.238	0.471	0.001	0.165	0.039
14	0.000	0.024	0.124	0.371	0.001	0.324	0.048
15	0.000	0.052	0.030	0.286	0.001	0.277	0.147
16	0.004	0.071	0.040	0.116	0.001	0.310	0.168
17	0.019	0.216	0.082	0.095	0.001	0.106	0.137
18	0.048	0.278	0.119	0.142	0.001	0.110	0.085
19	0.058	0.259	0.117	0.132	0.001	0.116	0.069
20	0.011	0.199	0.065	0.134	0.001	0.135	0.180
21	0.004	0.113	0.035	0.166	0.004	0.147	0.172
22	0.003	0.061	0.052	0.210	0.004	0.228	0.238
23	0.002	0.046	0.076	0.241	0.004	0.306	0.175
24	0.014	0.034	0.099	0.244	0.005	0.345	0.154
25	0.001	0.024	0.115	0.254	0.006	0.242	0.184
26	0.001	0.022	0.114	0.203	0.003	0.284	0.203
27	0.001	0.026	0.092	0.187	0.003	0.314	0.207
28	0.014	0.034	0.064	0.170	0.003	0.324	0.233
29	0.006	0.059	0.051	0.197	0.003	0.177	0.230
30	0.045	0.121	0.050	0.196	0.001	0.115	0.129
31	0.051	0.212	0.044	0.214	0.001	0.126	0.071
32	0.153	0.108	0.043	0.275	0.001	0.152	0.063
33	0.003	0.111	0.048	0.167	0.001	0.414	0.138
34	0.013	0.139	0.050	0.162	0.001	0.339	0.151
35	0.010	0.198	0.034	0.150	0.001	0.353	0.139
36	0.212	0.167	0.033	0.055	0.001	0.253	0.119
37	0.048	0.021	0.028	0.023	0.000	0.348	0.251
38	0.008	0.097	0.037	0.015	0.000	0.382	0.236
39	0.013	0.286	0.029	0.012	0.000	0.263	0.123
40	0.068	0.376	0.023	0.009	0.000	0.122	0.105
41	0.078	0.244	0.005	0.003	0.000	0.032	0.000
42	0.001	0.023	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

(pep)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.003	0.011	0.018	0.004	0.000	0.022	0.000
3	0.005	0.029	0.137	0.062	0.000	0.110	0.193
4	0.002	0.073	0.175	0.152	0.000	0.170	0.131
5	0.007	0.125	0.176	0.159	0.000	0.139	0.077
6	0.014	0.119	0.093	0.157	0.000	0.179	0.145
7	0.001	0.094	0.042	0.114	0.000	0.188	0.210
8	0.019	0.026	0.040	0.058	0.000	0.196	0.216
9	0.007	0.012	0.074	0.072	0.000	0.209	0.267
10	0.000	0.014	0.098	0.103	0.000	0.241	0.205
11	0.004	0.001	0.171	0.270	0.000	0.261	0.135
12	0.017	0.003	0.222	0.313	0.001	0.333	0.065
13	0.004	0.013	0.218	0.311	0.001	0.331	0.035
14	0.000	0.014	0.121	0.296	0.001	0.409	0.059
15	0.000	0.140	0.031	0.189	0.000	0.217	0.174
16	0.006	0.224	0.022	0.103	0.000	0.195	0.199
17	0.008	0.340	0.033	0.058	0.000	0.173	0.138
18	0.005	0.541	0.036	0.024	0.000	0.173	0.062
19	0.007	0.746	0.036	0.022	0.000	0.051	0.060
20	0.004	0.726	0.014	0.023	0.000	0.062	0.045
21	0.003	0.513	0.064	0.122	0.000	0.104	0.041
22	0.002	0.461	0.069	0.120	0.000	0.116	0.160
23	0.000	0.510	0.074	0.128	0.000	0.113	0.080
24	0.001	0.010	0.064	0.148	0.000	0.236	0.066
25	0.000	0.007	0.048	0.049	0.001	0.353	0.083
26	0.000	0.003	0.048	0.045	0.000	0.540	0.107
27	0.000	0.001	0.022	0.042	0.000	0.589	0.278
28	0.001	0.094	0.013	0.049	0.000	0.366	0.182
29	0.000	0.122	0.009	0.064	0.000	0.029	0.120
30	0.003	0.160	0.015	0.067	0.000	0.039	0.599
31	0.026	0.802	0.013	0.067	0.000	0.021	0.013
32	0.021	0.019	0.012	0.071	0.000	0.694	0.016
33	0.001	0.084	0.008	0.035	0.000	0.735	0.031
34	0.003	0.068	0.007	0.033	0.000	0.711	0.023
35	0.005	0.762	0.006	0.034	0.000	0.042	0.021
36	0.112	0.711	0.006	0.018	0.000	0.038	0.031
37	0.005	0.544	0.006	0.007	0.000	0.177	0.097
38	0.004	0.350	0.043	0.012	0.000	0.258	0.165
39	0.010	0.418	0.043	0.010	0.000	0.238	0.100
40	0.092	0.378	0.041	0.010	0.000	0.083	0.089
41	0.012	0.347	0.004	0.008	0.000	0.034	0.000
42	0.001	0.026	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

(ppδ)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.001	0.006	0.017	0.005	0.000	0.025	0.000
3	0.002	0.015	0.153	0.048	0.000	0.145	0.186
4	0.012	0.055	0.197	0.158	0.000	0.178	0.123
5	0.012	0.105	0.196	0.172	0.000	0.140	0.078
6	0.014	0.066	0.105	0.171	0.000	0.164	0.160
7	0.004	0.051	0.049	0.144	0.000	0.165	0.186
8	0.049	0.025	0.054	0.115	0.001	0.223	0.188
9	0.001	0.007	0.081	0.166	0.001	0.304	0.197
10	0.000	0.013	0.128	0.217	0.001	0.319	0.183
11	0.001	0.017	0.216	0.291	0.001	0.248	0.087
12	0.045	0.042	0.221	0.294	0.001	0.213	0.070
13	0.001	0.075	0.189	0.261	0.001	0.213	0.085
14	0.004	0.159	0.075	0.232	0.001	0.242	0.064
15	0.004	0.265	0.032	0.130	0.001	0.146	0.198
16	0.014	0.311	0.033	0.030	0.001	0.151	0.161
17	0.051	0.342	0.035	0.040	0.000	0.055	0.111
18	0.024	0.398	0.067	0.094	0.000	0.080	0.087
19	0.017	0.388	0.069	0.096	0.000	0.080	0.067
20	0.004	0.289	0.056	0.108	0.000	0.102	0.102
21	0.001	0.230	0.031	0.149	0.001	0.118	0.118
22	0.004	0.060	0.048	0.172	0.001	0.249	0.257
23	0.004	0.040	0.074	0.176	0.001	0.283	0.214
24	0.007	0.019	0.099	0.180	0.001	0.329	0.234
25	0.001	0.027	0.121	0.156	0.001	0.262	0.262
26	0.001	0.022	0.118	0.093	0.001	0.301	0.276
27	0.002	0.029	0.090	0.078	0.001	0.355	0.274
28	0.013	0.029	0.056	0.092	0.001	0.349	0.269
29	0.001	0.051	0.044	0.141	0.000	0.141	0.251
30	0.006	0.175	0.045	0.149	0.000	0.092	0.126
31	0.017	0.340	0.035	0.160	0.000	0.081	0.057
32	0.234	0.153	0.043	0.203	0.000	0.080	0.041
33	0.005	0.296	0.042	0.163	0.001	0.337	0.077
34	0.014	0.269	0.048	0.159	0.001	0.364	0.048
35	0.021	0.273	0.023	0.151	0.001	0.377	0.069
36	0.214	0.300	0.021	0.034	0.001	0.219	0.094
37	0.047	0.117	0.024	0.021	0.001	0.306	0.241
38	0.010	0.147	0.037	0.021	0.000	0.268	0.231
39	0.032	0.358	0.038	0.020	0.000	0.215	0.083
40	0.080	0.391	0.024	0.019	0.000	0.115	0.095
41	0.059	0.356	0.007	0.004	0.000	0.032	0.000
42	0.001	0.027	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

(ppe)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.002	0.004	0.018	0.004	0.000	0.024	0.000
3	0.005	0.043	0.122	0.033	0.000	0.134	0.182
4	0.014	0.070	0.163	0.142	0.000	0.153	0.124
5	0.016	0.096	0.163	0.161	0.001	0.131	0.078
6	0.010	0.070	0.106	0.160	0.001	0.164	0.117
7	0.003	0.065	0.043	0.142	0.001	0.159	0.172
8	0.061	0.023	0.054	0.084	0.001	0.178	0.245
9	0.002	0.024	0.081	0.085	0.001	0.252	0.279
10	0.002	0.060	0.124	0.110	0.000	0.245	0.222
11	0.002	0.093	0.188	0.152	0.001	0.242	0.123
12	0.061	0.066	0.169	0.132	0.001	0.248	0.121
13	0.014	0.051	0.142	0.117	0.001	0.167	0.143
14	0.005	0.098	0.034	0.106	0.001	0.189	0.165
15	0.000	0.136	0.038	0.068	0.001	0.238	0.278
16	0.022	0.168	0.043	0.045	0.000	0.199	0.217
17	0.057	0.174	0.072	0.088	0.000	0.159	0.111
18	0.060	0.220	0.080	0.137	0.000	0.152	0.121
19	0.041	0.145	0.080	0.130	0.001	0.180	0.115
20	0.038	0.280	0.052	0.146	0.001	0.131	0.101
21	0.005	0.184	0.027	0.228	0.002	0.201	0.136
22	0.002	0.147	0.049	0.228	0.002	0.242	0.197
23	0.000	0.102	0.105	0.233	0.002	0.289	0.098
24	0.002	0.110	0.137	0.210	0.002	0.272	0.110
25	0.013	0.065	0.152	0.166	0.002	0.249	0.174
26	0.020	0.015	0.123	0.088	0.001	0.309	0.223
27	0.003	0.015	0.096	0.073	0.001	0.384	0.272
28	0.004	0.027	0.052	0.054	0.001	0.311	0.345
29	0.005	0.041	0.047	0.054	0.001	0.131	0.315
30	0.072	0.156	0.032	0.057	0.000	0.092	0.148
31	0.087	0.368	0.029	0.073	0.000	0.098	0.074
32	0.236	0.242	0.033	0.166	0.001	0.183	0.035
33	0.002	0.219	0.050	0.167	0.001	0.452	0.040
34	0.003	0.077	0.071	0.170	0.001	0.568	0.038
35	0.008	0.171	0.053	0.166	0.001	0.505	0.049
36	0.203	0.194	0.035	0.056	0.001	0.357	0.068
37	0.063	0.131	0.010	0.015	0.001	0.255	0.252
38	0.006	0.192	0.019	0.006	0.001	0.186	0.292
39	0.026	0.394	0.018	0.005	0.000	0.152	0.107
40	0.062	0.376	0.015	0.004	0.000	0.099	0.101
41	0.069	0.328	0.004	0.002	0.000	0.021	0.000
42	0.004	0.021	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Table S2. (Continuous Table)

(ppp)	Para	Anti	3-10	Alpha	Pi	Turn	Bend
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2	0.000	0.015	0.016	0.004	0.000	0.023	0.000
3	0.011	0.036	0.141	0.029	0.000	0.128	0.198
4	0.008	0.028	0.183	0.095	0.000	0.200	0.136
5	0.003	0.025	0.181	0.108	0.000	0.168	0.112
6	0.003	0.011	0.089	0.107	0.000	0.178	0.187
7	0.017	0.019	0.031	0.092	0.000	0.137	0.219
8	0.033	0.008	0.057	0.141	0.002	0.172	0.219
9	0.006	0.013	0.101	0.183	0.002	0.235	0.218
10	0.015	0.021	0.127	0.209	0.002	0.246	0.178
11	0.011	0.009	0.176	0.229	0.002	0.249	0.129
12	0.046	0.008	0.150	0.146	0.002	0.331	0.115
13	0.011	0.011	0.126	0.099	0.000	0.217	0.134
14	0.004	0.157	0.040	0.075	0.000	0.215	0.075
15	0.020	0.478	0.006	0.050	0.000	0.073	0.088
16	0.058	0.543	0.012	0.015	0.000	0.049	0.084
17	0.014	0.563	0.044	0.044	0.000	0.024	0.071
18	0.015	0.308	0.166	0.131	0.000	0.113	0.071
19	0.029	0.373	0.166	0.143	0.000	0.109	0.039
20	0.016	0.161	0.141	0.164	0.001	0.107	0.125
21	0.001	0.120	0.049	0.271	0.004	0.131	0.115
22	0.000	0.065	0.050	0.324	0.004	0.224	0.165
23	0.001	0.051	0.074	0.333	0.004	0.289	0.125
24	0.036	0.017	0.114	0.306	0.008	0.333	0.082
25	0.000	0.025	0.136	0.281	0.008	0.306	0.122
26	0.001	0.049	0.141	0.161	0.006	0.412	0.106
27	0.000	0.068	0.098	0.109	0.006	0.451	0.132
28	0.035	0.095	0.070	0.098	0.005	0.346	0.184
29	0.003	0.090	0.042	0.085	0.003	0.205	0.199
30	0.011	0.090	0.046	0.088	0.000	0.110	0.129
31	0.018	0.154	0.029	0.101	0.000	0.092	0.101
32	0.174	0.132	0.045	0.148	0.000	0.088	0.109
33	0.005	0.305	0.047	0.109	0.000	0.334	0.095
34	0.005	0.296	0.051	0.105	0.000	0.337	0.103
35	0.006	0.338	0.026	0.098	0.000	0.291	0.094
36	0.129	0.191	0.030	0.024	0.000	0.415	0.109
37	0.013	0.123	0.021	0.011	0.000	0.399	0.168
38	0.006	0.259	0.037	0.009	0.000	0.323	0.186
39	0.038	0.604	0.027	0.007	0.000	0.077	0.097
40	0.061	0.641	0.025	0.007	0.000	0.045	0.055
41	0.044	0.527	0.003	0.002	0.000	0.029	0.000
42	0.002	0.154	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

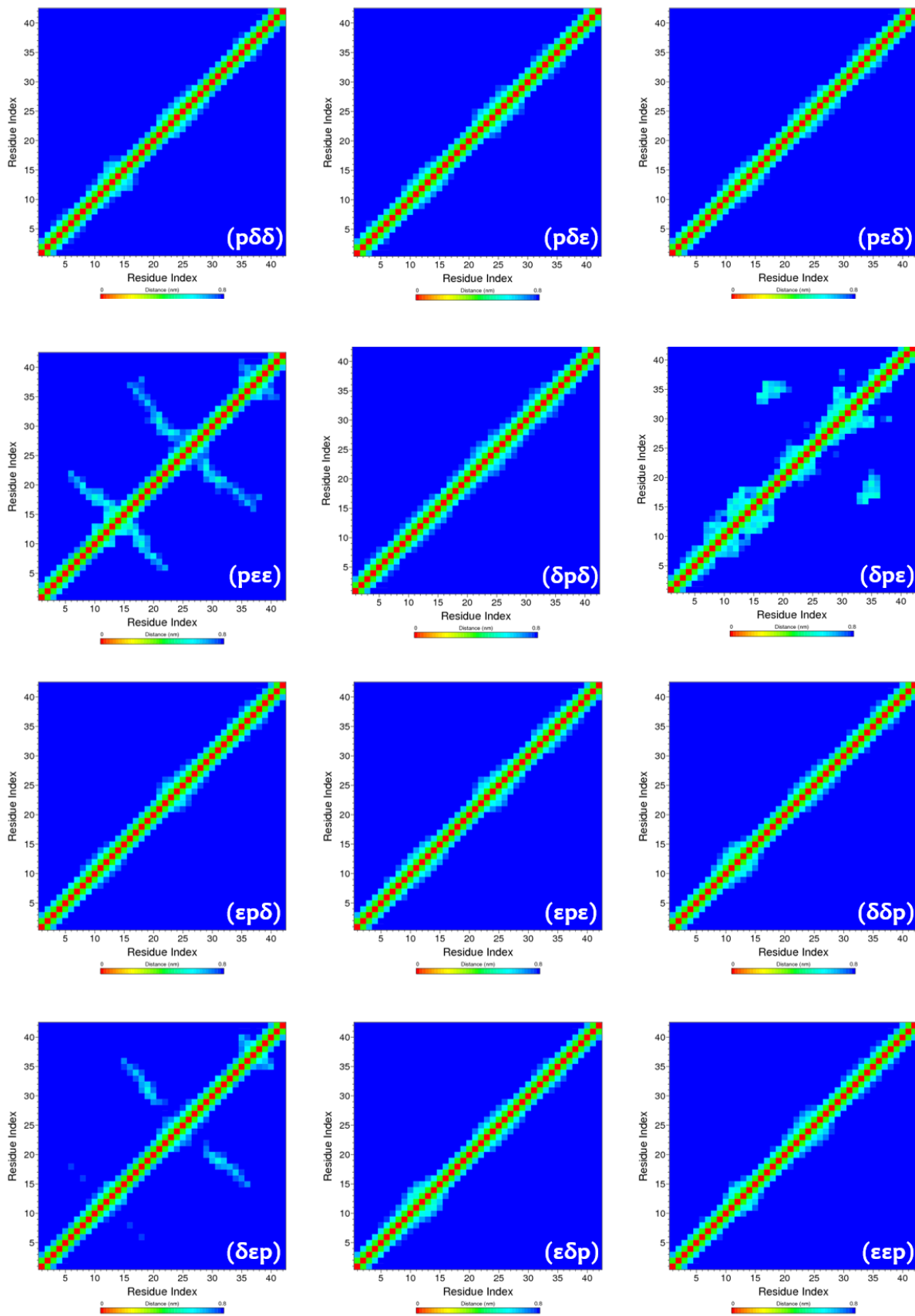


Figure S2. The contact map in each system.

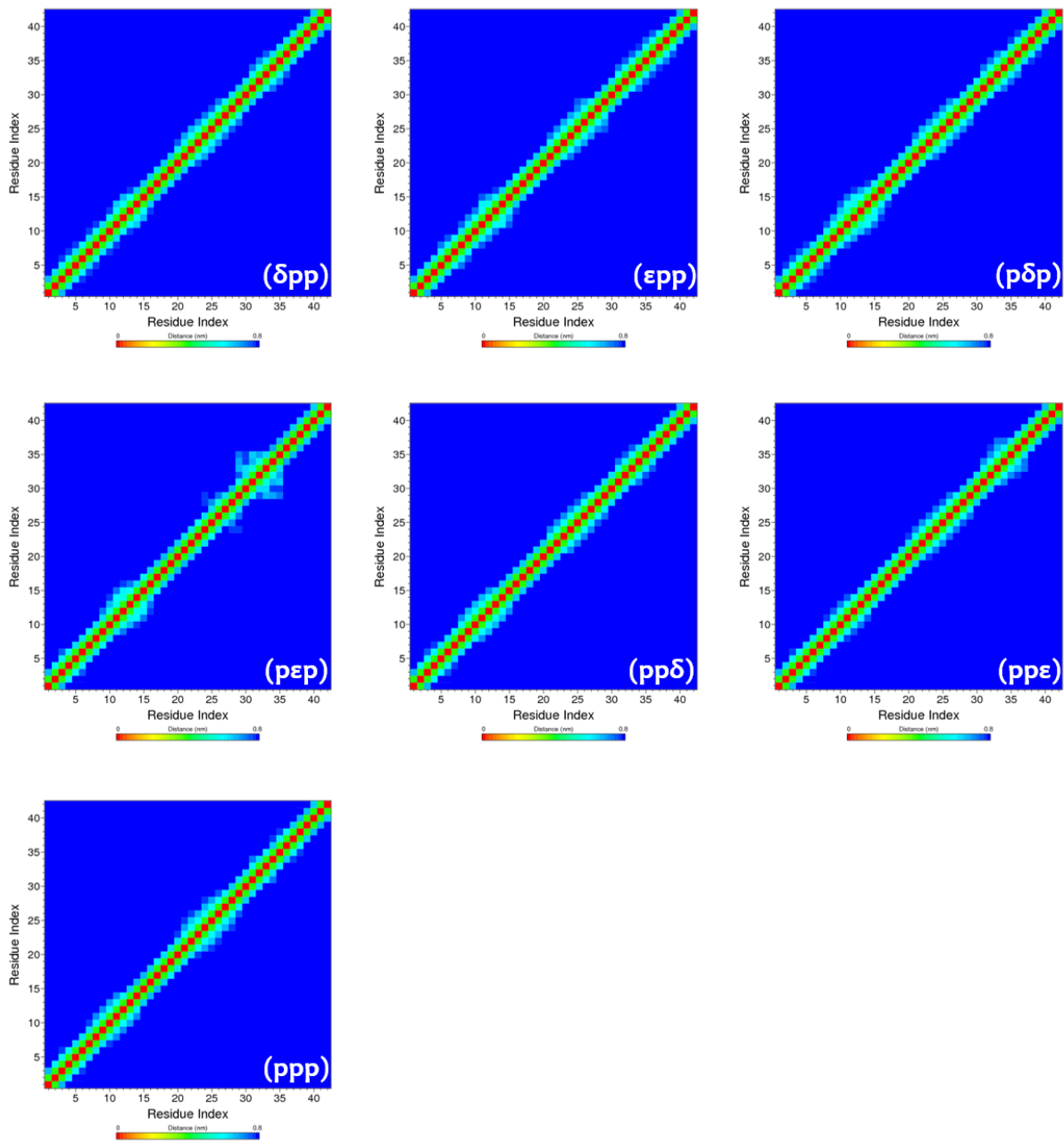


Figure S2. (Continuous figure)

Table S3. Possibility of H-bonding interaction between H6 and other residues in each system^a.

	(pδδ)	(pδε)	(πεδ)	(πεε)	(δpδ)	(δπε)	(εpδ)	(επε)	(δδp)	(δεp)	(εδp)	(εεp)	(δpp)	(εpp)	(pδp)	(πεp)	(ppδ)	(ppe)	(ppp)
E3	0.113	0.089	0.077		0.111	0.104		0.070	0.070	0.108	0.082		0.094	0.060	0.104	0.097	0.111	0.091	0.091
F4				0.197															
D7	0.104	0.084	0.089		0.054	0.117							0.056		0.103	0.115	0.093	0.107	0.083
E11		0.062																	0.082
F19					0.057														
E22				0.123															

^a Only more than 5% possibility data was collected in the table.

Table S4. Possibility of H-bonding interaction between H13 and other residues in each system^a.

	(pδδ)	(pδε)	(πεδ)	(πεε)	(δpδ)	(δπε)	(εpδ)	(επε)	(δδp)	(δεp)	(εδp)	(εεp)	(δpp)	(εpp)	(pδp)	(πεp)	(ppδ)	(ppe)	(ppp)
G9	0.075	0.086			0.089		0.052		0.124		0.157				0.148		0.075		
Y10	0.093	0.085	0.054					0.101	0.148		0.100	0.097	0.058	0.067	0.130	0.098	0.082	0.066	
Q15	0.061																		
K16	0.163	0.069	0.090	0.161	0.085	0.593					0.053			0.174	0.073				
L17			0.064		0.058	0.645					0.054			0.211	0.072	0.067			
A42					0.059								0.063				0.052		

^a Only more than 5% possibility data was collected in the table.

Table S5. Possibility of H-bonding interaction between H14 and other residues in each system^a.

	(pδδ)	(pδε)	(πεδ)	(πεε)	(δpδ)	(δπε)	(εpδ)	(επε)	(δδp)	(δεp)	(εδp)	(εεp)	(δpp)	(εpp)	(pδp)	(πεp)	(ppδ)	(ppe)	(ppp)
S8												0.077			0.067				
Y10	0.126	0.071	0.134		0.125		0.073	0.068	0.084		0.093	0.066		0.093	0.094	0.074	0.149		
E11	0.109	0.096	0.123		0.119	0.071	0.118	0.130	0.275	0.111	0.225	0.212	0.196	0.189	0.250	0.242	0.165	0.079	0.131
V12							0.064			0.081		0.074		0.098					
L17																		0.070	
A42													0.065						0.176

^a Only more than 5% possibility data was collected in the table.

Table S6. The calculation of pKa for all three histidines in each system^a.

	(pδδ)	(pδε)	(πεδ)	(πεε)	(δpδ)	(δπε)	(εpδ)	(επε)	(δδp)	(δεp)	(εδp)	(εεp)	(δpp)	(εpp)	(pδp)	(πεp)	(ppδ)	(ppe)	(ppp)
H6	7.23	6.36	7.62	7.89	7.45	6.93	6.36	6.50	7.32	6.50	6.36	6.43	7.23	6.43	6.52	7.23	7.26	7.77	7.23
H13	7.51	6.50	6.43	6.43	7.30	7.61	8.03	7.32	6.50	6.50	6.86	6.50	6.50	7.86	6.50	6.50	7.54	7.27	7.09
H14	7.30	6.50	6.82	6.43	7.23	6.50	6.44	6.50	8.04	6.60	7.30	7.23	7.30	7.80	6.64	7.23	7.57	6.50	6.94

Table S7. PCC and RMSD between our REMD-Calculated and Experimental ${}^3J_{\text{HNHA}}$ -Coupling Constants^a.

System	PCC	RMSD(Hz)
(p $\delta\delta$)	0.454	0.503
(p $\delta\epsilon$)	0.471	0.473
(p $\epsilon\delta$)	0.497	0.463
(p $\epsilon\epsilon$)	0.125	0.845
($\delta p\delta$)	0.373	0.469
($\delta p\epsilon$)	0.600	0.428
($\epsilon p\delta$)	0.536	0.473
($\epsilon p\epsilon$)	0.405	0.468
($\delta\delta p$)	0.379	0.488
($\delta\epsilon p$)	0.505	0.630
($\epsilon\delta p$)	0.399	0.461
($\epsilon\epsilon p$)	0.416	0.481
($\delta p p$)	0.423	0.474
($\epsilon p p$)	0.350	0.472
(p δp)	0.365	0.472
(p ϵp)	0.347	0.563
(p p δ)	0.473	0.445
(p p ϵ)	0.398	0.483
(p p p)	0.461	0.459

^a PCC is derived from averaged ${}^3J_{\text{HNHA}}$ -coupling constant between simulated and experimental data. RMSD is the standard deviation by calculating the averaged deviation between simulated and experimental data.