Biophysical Journal, Volume *119*

Supplemental Information

Tautomeric Effect of Histidine on β-Sheet Formation of Amyloid Beta 1–40: 2D-IR Simulations

Yeonsig Nam, Mahroof Kalathingal, Shinji Saito, and Jin Yong Lee

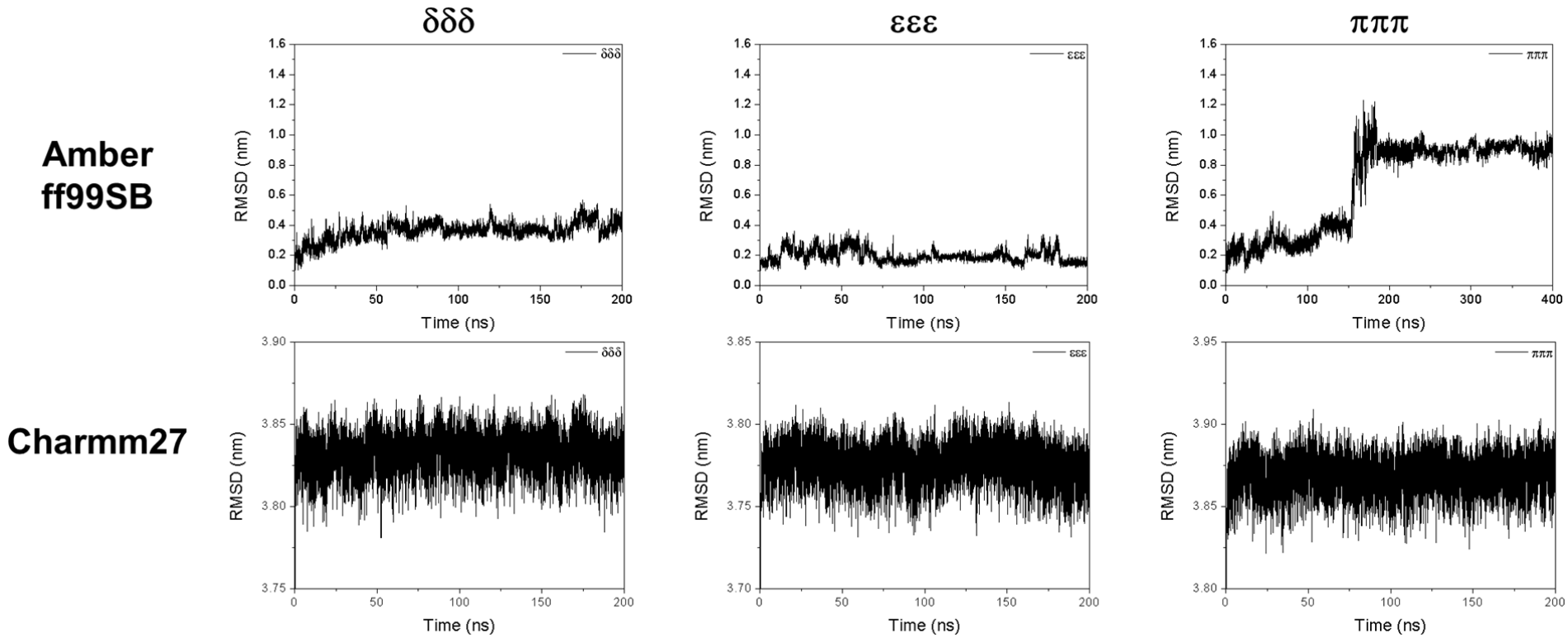

Figure S1. Root mean square deviation (RMSD) of the δδδ, εεε, and πππ tautomers calculated with Amber ff99SB and Charmm27 force field.

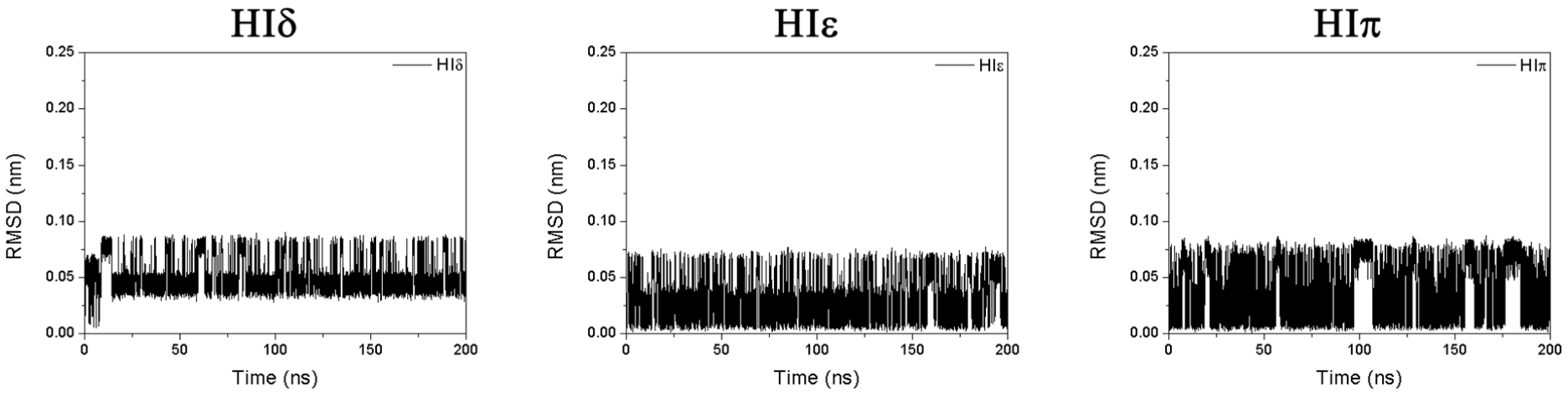

Figure S2. Root mean square deviation (RMSD) of the HIδ, HIε, and HIπ dipeptides calculated with Amber ff99SB force field.

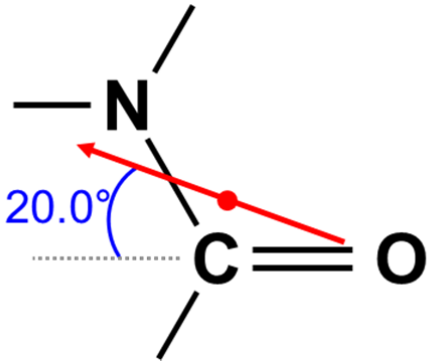

Figure S3. Schematic drawing of the location (red circle) and direction (red arrow) of the transition dipole used in this study.

Table S1. The distance between transition dipoles for δδδ, εεε, and πππ tautomers (unit: nm). The values smaller than 0.5 nm were marked with red except the nearest and the second nearest neighboring transition dipoles.

δδδ

0.35	0.70	0.82	1.21	1.47	1.85	2.18	2.36	2.28	2.11	2.35	2.29	1.95	2.00	2.08	1.89	1.87	1.92	1.78	2.04	2.23	2.23	2.38	2.61	2.74	2.77	2.78	2.73	2.74	2.47	2.33	2.48	2.28	2.02	1.66	1.49	1.14	1.09
0.00	0.37	0.52	0.90	1.18	1.57	1.91	2.06	1.96	1.78	2.03	1.96	1.61	1.68	1.78	1.61	1.62	1.70	1.61	1.91	2.13	2.12	2.22	2.46	2.62	2.62	2.60	2.53	2.51	2.23	2.09	2.21	2.00	1.74	1.37	1.19	0.82	0.78
0.00	0.00	0.33	0.64	0.97	1.34	1.68	1.80	1.69	1.48	1.70	1.62	1.28	1.33	1.43	1.28	1.33	1.46	1.44	1.78	2.04	2.04	2.10	2.33	2.52	2.51	2.44	2.34	2.28	2.00	1.84	1.93	1.72	1.46	1.08	0.85	**0.47**	**0.46**
0.00	0.00	0.00	0.40	0.70	1.07	1.42	1.58	1.52	1.34	1.59	1.58	1.25	1.25	1.36	1.15	1.15	1.23	1.19	1.51	1.76	1.74	1.80	2.04	2.22	2.20	2.14	2.06	2.02	1.73	1.60	1.71	1.49	1.23	0.86	0.74	**0.48**	0.65
0.00	0.00	0.00	0.00	0.38	0.71	1.05	1.19	1.15	0.98	1.22	1.26	0.96	0.90	1.04	0.83	0.87	0.96	1.03	1.35	1.63	1.60	1.59	1.83	2.04	1.98	1.87	1.78	1.69	1.40	1.27	1.35	1.10	0.86	**0.48**	**0.47**	**0.43**	0.72
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.73	0.91	0.92	0.86	1.14	1.25	1.03	0.95	1.15	0.93	0.95	0.94	1.03	1.28	1.53	1.43	1.40	1.67	1.85	1.73	1.62	1.58	1.49	1.18	1.13	1.21	0.92	0.76	**0.47**	0.71	0.79	1.04
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.58	0.73	0.74	0.98	1.19	1.06	0.89	1.07	0.86	0.86	0.80	0.99	1.17	1.42	1.31	1.19	1.45	1.64	1.49	1.32	1.27	1.15	0.83	0.84	0.88	0.56	0.51	**0.45**	0.84	1.07	1.35
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.69	0.83	1.01	1.29	1.25	1.06	1.22	1.05	1.05	0.93	1.14	1.24	1.45	1.31	1.13	1.37	1.54	1.34	1.12	1.11	0.96	0.66	0.78	0.78	**0.47**	0.61	0.74	1.14	1.41	1.68
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.38	0.60	0.73	1.02	1.08	0.92	1.15	1.08	1.18	1.17	1.45	1.59	1.81	1.68	1.48	1.69	1.88	1.66	1.40	1.37	1.15	0.88	0.98	0.85	0.53	0.73	0.86	1.20	1.48	1.70
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.37	0.59	0.76	0.85	0.81	1.13	1.14	1.31	1.38	1.66	1.85	2.10	1.97	1.80	2.03	2.22	2.01	1.77	1.73	1.51	1.24	1.29	1.14	0.81	0.92	0.92	1.16	1.38	1.53
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.34	0.47	0.50	0.46	0.81	0.88	1.10	1.26	1.56	1.82	2.10	2.02	1.86	2.07	2.30	2.14	1.89	1.80	1.56	1.29	1.25	1.09	0.79	0.80	0.73	0.87	1.11	1.25
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.55	0.44	0.70	0.87	1.12	1.32	1.67	1.94	2.22	2.17	1.97	2.14	2.40	2.25	1.96	1.83	1.55	1.33	1.26	1.03	0.82	0.86	0.90	0.99	1.28	1.43
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.50	0.81	1.03	1.32	1.56	1.89	2.19	2.48	2.43	2.26	2.45	2.70	2.56	2.29	2.16	1.90	1.66	1.57	1.36	1.14	1.13	1.06	1.04	1.23	1.28
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.67	0.84	1.13	1.39	1.68	2.01	2.31	2.28	2.15	2.35	2.60	2.49	2.25	2.12	1.89	1.63	1.50	1.35	1.12	1.02	0.84	0.73	0.88	0.93
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.38	0.54	0.83	1.10	1.42	1.74	2.05	2.04	1.88	2.05	2.33	2.23	1.97	1.82	1.58	1.33	1.19	1.03	0.83	0.72	0.63	0.59	0.89	1.07
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.65	0.97	1.31	1.65	1.96	2.01	1.84	1.97	2.27	2.22	1.96	1.75	1.51	1.31	1.09	0.94	0.88	0.72	0.72	0.62	0.97	1.20
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.31	0.64	0.97	1.31	1.63	1.68	1.53	1.67	1.97	1.94	1.70	1.49	1.30	1.09	0.84	0.79	0.73	**0.47**	**0.47**	**0.45**	0.85	1.16
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.37	0.69	1.04	1.35	1.44	1.29	1.41	1.72	1.73	1.51	1.29	1.15	0.96	0.68	0.74	0.74	**0.46**	0.52	0.59	0.95	1.30
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.69	1.00	1.08	0.93	1.06	1.36	1.38	1.19	0.99	0.91	0.73	**0.47**	0.69	0.71	**0.49**	0.63	0.85	1.16	1.53
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	0.72	0.84	0.81	0.95	1.21	1.29	1.22	1.06	1.11	0.95	0.76	1.04	1.05	0.84	0.87	1.05	1.26	1.62
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.48	0.49	0.60	0.82	0.96	0.96	0.84	1.01	0.93	0.84	1.17	1.21	1.08	1.18	1.42	1.63	1.99
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.45	0.49	0.60	0.82	0.93	0.88	1.13	1.11	1.08	1.41	1.47	1.37	1.48	1.74	1.93	2.28
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.34	0.53	0.53	0.63	0.80	0.85	1.11	1.05	1.10	1.42	1.42	1.36	1.46	1.76	1.94	2.28
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.47	0.49	0.51	0.53	0.79	0.76	0.84	1.14	1.18	1.18	1.36	1.68	1.92	2.28
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.53	0.53	0.47	0.79	0.87	0.93	1.22	1.34	1.34	1.57	1.87	2.13	2.50
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.60	0.70	1.04	1.12	1.23	1.51	1.60	1.62	1.81	2.14	2.37	2.72
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.64	0.94	0.99	1.18	1.43	1.46	1.54	1.74	2.10	2.35	2.69
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.58	0.67	0.90	1.10	1.17	1.29	1.56	1.92	2.21	2.55
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.52	0.67	0.88	1.03	1.12	1.42	1.76	2.08	2.44
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.48	0.59	0.78	0.93	1.28	1.62	1.97	2.31
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.47	0.53	0.66	0.99	1.35	1.69	2.03
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.34	0.50	0.50	0.85	1.15	1.51	1.86
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.49	0.88	1.16	1.55	1.87
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.31	0.65	0.99	1.35	1.65
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.72	1.09	1.41
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	0.72	1.04
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	0.73
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.38
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

εεε

0.41	0.59	0.98	1.13	1.52	1.82	1.89	1.91	1.91	1.90	1.63	1.48	1.53	1.54	1.77	1.56	1.60	1.46	1.50	1.33	1.57	1.84	1.87	2.07	1.82	1.81	1.94	1.71	1.48	1.30	1.11	0.95	0.66	0.74	0.85	0.87	1.18	1.12
0.00	0.32	0.67	0.84	1.23	1.55	1.62	1.60	1.56	1.52	1.26	1.13	1.16	1.18	1.39	1.16	1.20	1.11	1.20	1.08	1.30	1.59	1.67	1.89	1.67	1.58	1.66	1.40	1.20	1.03	0.94	0.79	0.51	0.73	0.90	0.90	1.14	1.02
0.00	0.00	0.40	0.57	0.96	1.28	1.33	1.33	1.33	1.34	1.09	0.90	0.97	1.04	1.28	1.11	1.22	1.22	1.38	1.29	1.46	1.77	1.86	2.09	1.84	1.71	1.77	1.46	1.25	1.02	1.03	0.97	0.68	0.83	1.09	1.16	1.40	1.30
0.00	0.00	0.00	0.34	0.68	1.00	0.99	0.96	0.93	0.97	0.72	0.52	0.67	0.84	1.05	0.93	1.09	1.22	1.44	1.42	1.54	1.85	1.99	2.23	2.01	1.81	1.80	1.46	1.30	1.07	1.21	1.21	0.97	1.14	1.42	1.49	1.68	1.56
0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.72	0.81	0.83	0.89	0.98	0.84	**0.48**	0.53	0.66	0.95	0.92	1.15	1.31	1.56	1.50	1.56	1.89	2.00	2.21	1.97	1.74	1.74	1.39	1.20	0.91	1.12	1.21	0.99	1.09	1.41	1.54	1.72	1.67
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.49	0.54	0.70	0.86	0.85	**0.45**	**0.46**	0.62	0.89	0.98	1.27	1.51	1.79	1.76	1.76	2.08	2.20	2.39	2.15	1.89	1.84	1.49	1.33	1.05	1.34	1.49	1.32	1.39	1.72	1.87	2.02	1.99
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.38	0.53	0.77	0.98	1.07	0.70	0.68	0.80	1.03	1.20	1.51	1.77	2.06	2.03	1.99	2.31	2.42	2.59	2.35	2.07	2.01	1.66	1.53	1.25	1.56	1.75	1.59	1.63	1.97	2.15	2.29	2.28
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.62	0.90	0.96	0.68	0.80	1.03	1.21	1.34	1.62	1.90	2.19	2.20	2.20	2.51	2.65	2.85	2.63	2.34	2.27	1.92	1.80	1.52	1.82	1.97	1.77	1.84	2.18	2.33	2.49	2.44
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.31	0.60	0.71	0.52	0.66	0.93	1.02	1.15	1.41	1.72	2.02	2.08	2.07	2.36	2.54	2.75	2.56	2.25	2.14	1.80	1.72	1.50	1.81	1.94	1.77	1.89	2.21	2.32	2.45	2.36
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.31	0.46	0.45	0.61	0.90	0.90	0.99	1.20	1.54	1.84	1.94	1.94	2.21	2.41	2.65	2.49	2.17	2.03	1.70	1.66	1.49	1.81	1.90	1.76	1.92	2.21	2.28	2.39	2.25
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.51	0.58	0.83	0.72	0.78	0.95	1.31	1.61	1.74	1.74	1.98	2.20	2.46	2.32	1.99	1.83	1.52	1.53	1.42	1.73	1.80	1.70	1.90	2.16	2.19	2.26	2.10
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	0.60	0.88	0.85	0.79	0.91	1.21	1.49	1.61	1.68	1.92	2.15	2.42	2.28	1.98	1.86	1.54	1.51	1.38	1.64	1.66	1.52	1.74	1.99	2.00	2.10	1.91
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.62	0.75	0.75	0.99	1.26	1.55	1.59	1.62	1.92	2.09	2.33	2.14	1.86	1.77	1.42	1.33	1.13	1.41	1.48	1.32	1.48	1.78	1.85	1.98	1.86
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.47	0.54	0.84	1.12	1.42	1.44	1.42	1.72	1.88	2.10	1.91	1.60	1.51	1.16	1.08	0.89	1.22	1.34	1.23	1.39	1.67	1.75	1.84	1.75
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.48	0.79	1.02	1.31	1.30	1.22	1.52	1.66	1.85	1.65	1.33	1.25	0.89	0.81	0.63	1.00	1.16	1.12	1.25	1.52	1.61	1.66	1.62
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.60	0.91	1.22	1.29	1.17	1.43	1.61	1.82	1.69	1.33	1.16	0.85	0.89	0.85	1.21	1.33	1.34	1.52	1.75	1.78	1.78	1.70
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.63	0.94	1.02	0.97	1.23	1.43	1.68	1.56	1.22	1.08	0.76	0.80	0.80	1.09	1.14	1.16	1.39	1.58	1.57	1.56	1.43
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.69	0.86	0.84	1.04	1.29	1.57	1.50	1.19	1.02	0.78	0.88	0.98	1.19	1.16	1.22	1.49	1.62	1.54	1.50	1.30
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.49	0.54	0.73	0.98	1.28	1.23	0.98	0.87	0.70	0.80	0.97	1.05	0.94	1.06	1.35	1.40	1.26	1.17	0.95
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.50	0.57	0.82	1.14	1.14	0.97	0.91	0.85	0.95	1.16	1.15	0.97	1.13	1.42	1.40	1.19	1.05	0.78
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.53	0.67	0.96	0.89	0.78	0.83	0.77	0.78	1.00	0.89	0.68	0.89	1.16	1.09	0.88	0.73	0.51
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.48	0.75	0.70	0.48	0.48	0.48	0.58	0.89	0.85	0.76	1.03	1.25	1.20	1.06	0.86	0.78
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.63	0.75	0.60	0.56	0.73	0.90	1.23	1.18	1.06	1.34	1.56	1.47	1.27	1.01	0.90
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.47	0.48	0.59	0.82	0.93	1.25	1.13	1.02	1.34	1.50	1.36	1.18	0.87	0.88
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.54	0.71	0.99	1.07	1.39	1.24	1.18	1.51	1.62	1.45	1.30	0.98	1.09
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.69	0.87	0.85	1.12	0.93	0.90	1.23	1.30	1.14	1.05	0.76	0.97
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.31	0.49	0.56	0.89	0.84	0.88	1.18	1.30	1.24	1.18	0.95	1.05
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.59	0.94	1.01	1.06	1.33	1.49	1.48	1.41	1.19	1.22
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.31	0.64	0.80	0.88	1.10	1.27	1.33	1.31	1.17	1.18
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.50	0.65	0.85	0.98	1.07	1.10	1.03	1.08
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.64	0.71	0.78	0.98	1.11	1.14	1.21
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.47	0.50	0.61	0.74	0.79	0.94
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.50	0.48	0.48	0.54	0.64
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.48	0.56	0.78	0.81
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.63	0.88	1.03
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.61	0.84
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.52
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

$\pi\pi\pi$

0.33	0.60	0.73	1.11	1.36	1.66	1.98	2.22	2.14	2.01	2.15	2.38	2.09	2.02	1.88	1.58	1.41	1.29	1.15	1.41	1.59	1.75	1.92	2.05	2.17	2.37	2.48	2.39	2.06	1.78	1.84	1.61	1.68	1.50	1.49	1.41	1.07	0.95
0.00	0.36	0.49	0.85	1.13	1.44	1.77	1.97	1.86	1.72	1.88	2.09	1.79	1.74	1.63	1.35	1.24	1.19	1.11	1.42	1.62	1.74	1.89	2.06	2.19	2.35	2.49	2.44	2.12	1.85	1.84	1.56	1.56	1.32	1.27	1.13	0.77	0.64
0.00	0.00	0.40	0.71	1.06	1.39	1.74	1.90	1.75	1.55	1.67	1.87	1.55	1.47	1.31	1.03	0.91	0.93	0.93	1.29	1.54	1.65	1.75	1.95	2.12	2.25	2.36	2.32	2.00	1.74	1.66	1.34	1.32	1.06	1.04	0.87	0.52	**0.49**
0.00	0.00	0.00	0.39	0.69	1.01	1.36	1.56	1.47	1.30	1.44	1.68	1.41	1.34	1.27	0.98	0.95	0.89	0.87	1.16	1.36	1.41	1.55	1.77	1.90	2.01	2.18	2.18	1.89	1.67	1.58	1.25	1.17	0.89	0.80	0.74	**0.48**	0.59
0.00	0.00	0.00	0.00	0.38	0.69	1.05	1.20	1.11	0.93	1.06	1.31	1.09	1.02	1.04	0.80	0.91	0.92	0.98	1.23	1.41	1.38	1.49	1.76	1.88	1.93	2.13	2.20	1.94	1.77	1.61	1.25	1.05	0.72	0.51	**0.48**	**0.44**	0.69
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.69	0.89	0.90	0.81	0.97	1.25	1.14	1.10	1.24	1.04	1.20	1.16	1.20	1.36	1.46	1.35	1.49	1.77	1.83	1.86	2.11	2.23	2.01	1.89	1.73	1.41	1.16	0.88	0.62	0.73	0.79	1.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.38	0.64	0.78	0.78	0.90	1.19	1.19	1.16	1.37	1.23	1.42	1.37	1.41	1.49	1.54	1.37	1.52	1.80	1.82	1.80	2.10	2.25	2.08	2.01	1.84	1.54	1.26	1.03	0.77	0.95	1.09	1.31
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.42	0.72	0.87	1.00	1.25	1.35	1.37	1.64	1.55	1.77	1.73	1.77	1.81	1.81	1.61	1.76	2.03	2.01	1.96	2.29	2.48	2.34	2.30	2.13	1.86	1.57	1.37	1.10	1.27	1.42	1.62
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.66	0.80	0.96	1.14	1.24	1.59	1.57	1.86	1.90	1.99	2.08	2.12	1.92	2.01	2.31	2.32	2.23	2.54	2.75	2.61	2.58	2.36	2.06	1.73	1.49	1.19	1.28	1.49	1.69
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.64	0.72	0.84	1.02	1.39	1.40	1.72	1.84	1.98	2.14	2.24	2.07	2.14	2.45	2.50	2.43	2.71	2.89	2.73	2.65	2.42	2.07	1.73	1.43	1.11	1.09	1.29	1.46
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.31	0.47	0.50	0.64	1.00	1.04	1.38	1.54	1.72	1.90	2.04	1.90	1.92	2.24	2.34	2.26	2.50	2.67	2.50	2.41	2.15	1.78	1.44	1.13	0.82	0.78	1.06	1.30
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.47	0.48	0.87	0.96	1.32	1.48	1.69	1.85	1.99	1.83	1.80	2.12	2.24	2.13	2.34	2.54	2.38	2.32	2.02	1.67	1.31	1.04	0.78	0.83	1.19	1.47
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	0.57	0.98	1.15	1.52	1.74	1.97	2.15	2.31	2.15	2.11	2.43	2.55	2.43	2.64	2.83	2.68	2.62	2.30	1.95	1.59	1.31	1.07	1.02	1.37	1.62
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.70	0.85	1.23	1.49	1.74	1.98	2.18	2.08	2.04	2.35	2.51	2.43	2.61	2.76	2.57	2.46	2.16	1.77	1.45	1.12	0.89	0.71	1.04	1.28
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	0.59	0.97	1.23	1.49	1.71	1.92	1.82	1.75	2.06	2.24	2.15	2.30	2.45	2.27	2.17	1.84	1.47	1.14	0.84	0.68	0.61	1.01	1.31
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.64	0.97	1.27	1.52	1.78	1.74	1.63	1.92	2.14	2.09	2.17	2.28	2.07	1.94	1.61	1.23	0.96	0.69	0.68	0.60	0.94	1.25
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.38	0.68	0.97	1.26	1.53	1.51	1.43	1.72	1.94	1.92	2.02	2.09	1.85	1.70	1.40	1.01	0.77	**0.45**	**0.48**	**0.43**	0.72	1.05
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.70	1.03	1.34	1.40	1.31	1.55	1.80	1.84	1.88	1.90	1.63	1.43	1.16	0.78	0.68	**0.48**	0.68	0.69	0.81	1.09
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.63	0.95	1.04	0.98	1.20	1.45	1.52	1.56	1.55	1.26	1.05	0.83	**0.45**	**0.48**	**0.46**	0.74	0.89	0.96	1.23
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	0.73	0.89	0.90	1.06	1.29	1.42	1.47	1.42	1.10	0.86	0.75	**0.47**	0.63	0.68	0.92	1.10	1.09	1.31
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.34	0.54	0.57	0.67	0.89	1.05	1.10	1.04	0.73	0.54	**0.49**	**0.42**	0.66	0.87	1.12	1.39	1.43	1.67
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.31	0.47	0.48	0.60	0.82	0.91	0.87	0.61	0.54	0.61	0.69	0.87	1.11	1.31	1.63	1.68	1.91
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.34	0.47	0.50	0.63	0.84	0.91	0.75	0.79	0.74	0.78	0.82	1.07	1.23	1.59	1.70	1.96
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.52	0.54	0.65	0.76	0.63	0.71	0.53	0.61	0.68	1.01	1.23	1.60	1.76	2.05
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.32	0.46	0.44	0.46	0.37	0.57	0.54	0.79	0.96	1.30	1.53	1.89	2.02	2.29
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.47	0.55	0.58	0.81	0.86	1.08	1.19	1.50	1.69	2.07	2.19	2.44
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.66	0.78	1.03	0.96	1.14	1.18	1.50	1.67	2.07	2.25	2.53
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.36	0.59	0.90	0.84	1.13	1.25	1.62	1.85	2.23	2.40	2.68
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35	0.68	0.76	1.12	1.34	1.71	1.96	2.31	2.43	2.69
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.49	0.86	1.13	1.48	1.74	2.06	2.15	2.39
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.71	1.05	1.35	1.62	1.90	1.94	2.15
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.40	0.72	1.06	1.36	1.66	1.77	2.03
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.38	0.67	0.99	1.26	1.38	1.66
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.39	0.68	1.01	1.22	1.54
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.33	0.62	0.86	1.20
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	0.71	1.05
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.41	0.74
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.35
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

Table S2. The Amide-I Vibrational Frequency of the HIδ, HIε and HIπ for Histidine Residue, Histidine Residue with Solvent, and Dipeptide System Calculated with MP2/6-31G**.

	HIδ	HIε	HIπ
Histidine residue	1736.303	1726.933	1738.286
Histidine residue with implicit solvent	1721.418	1712.814	1712.108
Dipeptide (labeled)	1687.192	1691.288	1667.768
Dipeptide (non-labeled)	1767.503	1762.266	1758.551

Table S3. The Number of Hydrogen Bonds within 0.35 nm from amide-I bond for C/N-terminus Amide-I Bond for the HIδ, HIε and HIπ Tautomers.

C-terminus amide-I bond		
HIδ	HIε	HIπ
2.967	2.054	2.533
N-terminus amide-I bond		
HIδ	HIε	HIπ
3.413	3.450	3.109

Table S4. The atomic charge of C and O atom for C-terminus and N-terminus amide-I bonds based on AMBERff99SB force field.

	Atom type	C-terminus Amide-I bond	N-terminus Amide-I bond
HIδ	C	0.5973	0.5972
	O	-0.5679	-0.5679
HIε	C	0.5973	0.5972
	O	-0.5679	-0.5679
HIπ	C	0.7341	0.5972
	O	-0.5894	-0.5679

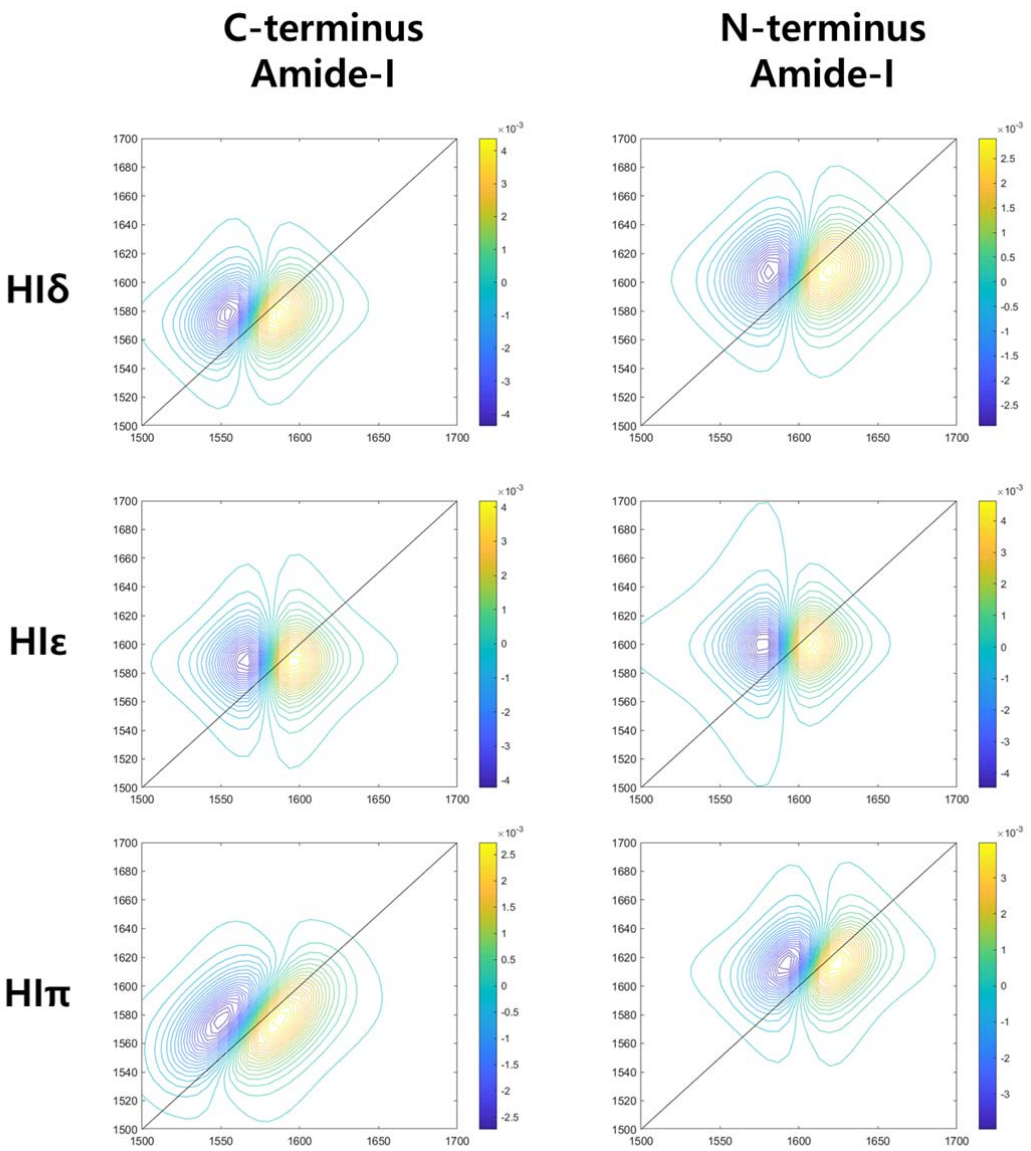

Figure S4. 2DIR spectra for amide-I vibration of HIδ, HIε, and HIπ dipeptides: C-terminus (left) and N-terminus (right) amide bond at waiting time, t_2 = 3 ps.