

A Spectral Marker for C α Damage in Beta Peptides

Mandy C. Green, Sarah Stelzleni and Joseph S. Francisco*

Department of Chemistry, Purdue University, West Lafayette, Indiana 47907-2084

Supplementary Material

Table S1

Species	Frequency(Intensity)					
Strand Reactant	3659(45), 3224(5), 3200(20), 3109(12), 1771(26), 1565(100), 1544(290), 1455(3), 1390(35), 1258(46), 1159(4), 1089(6), 767(2), 595(6), 464(11), 309(1), 230(4), 108(16), 47(1),	3619(109), 3224(6), 3197(20), 3109(5), 1759(369), 1564(15), 1542(16), 1452(18), 1379(11), 1240(14), 1150(2), 1083(10), 756(.5), 572(163), 427(73), 303(15), 228(3), 99(1), 38(1),	3598(116), 3223(6), 3118(5), 3108(18), 1620(109), 1563(40), 1540(7), 1452(14), 1347(18), 1219(10), 1147(.3), 1042(3), 727(4), 556(7), 406(6), 269(2), 183(6), 82(.4), 33(3),	3594(120), 3206(10), 3116(44), 3105(12), 1598(52), 1562(224), 1531(200), 1429(7), 1292(15), 1199(37), 1113(1), 1011(40), 693(1), 523(2), 384(3), 265(4), 176(44), 68(1), 29(1),	3248(1), 3203(18), 3112(13), 1792(198), 1585(50), 1554(492), 1492(26), 1414(11), 1279(46), 1190(.3), 1105(.3), 999(70), 661(8), 506(68), 345(25), 258(3), 133(3), 64(.4), 19(1),	3227(7), 3202(18), 3111(11), 1785(185), 1566(297), 1549(99), 1457(1), 1408(1), 1264(3), 1184(7), 1097(6), 977(3), 649(16), 480(58), 341(19), 241(4), 120(2), 54(1), 13(.1),
Strand C _{α1} Product	3660(45), 3225(7), 3196(20), 3108(16), 1687(191), 1563(48), 1538(53), 1452(34), 1378(9), 1217(13), 1108(5), 1015(45), 700(2), 549(10), 369(7), 267(1), 146(2), 75(1), 32(3),	3606(117), 3224(5), 3183(11), 3101(9), 1644(78), 1561(302), 1537(41), 1452(21), 1323(119), 1199(36), 1099(3), 1003(58), 693(1), 526(1), 351(12), 257(3), 133(5), 66(5), 23(1),	3601(130), 3221(7), 3116(45), 3098(13), 1620(106), 1553(795), 1529(483), 1435(79), 1288(11), 1185(3), 1084(9), 982(10), 650(14), 478(52), 329(35), 239(8), 120(5), 57(.1), 14(.1),	3522(97), 3203(19), 3115(3), 1817(263), 1593(50), 1546(18), 1491(26), 1426(9), 1276(17), 1184(7), 1083(10), 952(3), 607(22), 460(7), 311(10), 228(3), 105(.4), 45(1),	3248(1), 3201(22), 3111(13), 1791(163), 1567(61), 1545(69), 1482(15), 1412(8), 1259(71), 1154(3), 1064(2), 931(12), 592(39), 421(64), 301(5), 192(42), 100(3), 39(.3),	3239(5), 3199(7), 3110(15), 1764(166), 1566(407), 1540(45), 1457(5), 1391(90), 1251(22), 1147(1), 1050(1), 895(9), 582(25), 389(2), 288(1), 176(9), 79(1), 37(3),
Strand C _{α2} Product	3661(44), 3226(6),	3624(103), 3225(5),	3610(134), 3219(9),	3499(107), 3206(9),	3248(0.03), 3203(21),	3229(0.2), 3202(20),

	3197(20), 3103(7), 1692(152), 1565(27), 1537(126), 1454(12), 1380(12), 1215(47), 1107(4), 1027(38), 869(5), 678(3), 516(12), 366(5), 265(5), 141(6), 72(2), 22(0.3),	3184(9), 3100(11), 1641(102), 1562(618), 1533(99), 1452(3), 1329(9), 1203(25), 1102(1), 1011(47), 797(51), 653(4), 493(81), 356(15), 252(4), 133(1), 62(1), 17(0.1),	3118(5), 3099(15), 1618(81), 1551(328), 1530(329), 1435(154), 1294(15), 1195(7), 1090(7), 984(6), 769(17), 630(18), 476(60), 335(41), 241(0.4), 123(6), 56(1), 15(1),	3115(46), 1791(169), 1587(174), 1549(151), 1493(29), 1421(5), 1270(83), 1182(24), 1082(18), 954(5), 754(3), 624(4), 457(8), 318(1), 229(0.5), 123(6), 53(1),	3111(18), 1786(179), 1569(404), 1543(59), 1481(14), 1413(1), 1259(17), 1155(3), 1048(1), 925(1), 712(20), 579(23), 406(1), 305(0.3), 194(14), 95(2), 37(0.5),	3110(11), 1776(207), 1565(30), 1541(55), 1457(24), 1394(109), 1239(2), 1150(1), 1043(2), 911(29), 698(2), 553(98), 405(36), 272(1), 172(35), 81(4), 36(4),
Strand C _{α3} Product	3679(34), 3225(5), 3200(20), 3105(5), 1716(248), 1564(54), 1539(86), 1454(4), 1374(114), 1222(28), 1112(1), 1020(24), 855(8), 688(5), 523(6), 359(5), 269(3), 150(5), 80-0.1 33(0.3),	3621(108), 3224(6), 3182(12), 3104(17), 1649(58), 1562(801), 1535(88), 1452(19), 1352(70), 1203(11), 1102(2), 1011(57), 799(55), 659(7), 502(64), 340(3), 250(1), 130(1), 78(1), 18(1),	3604(112), 3218(7), 3118(5), 3100(10), 1601(234), 1550(6), 1531(239), 1430(129), 1292(11), 1194(12), 1090(7), 989(36), 776(10), 638(10), 467(25), 337(43), 231(0.4), 118(4), 63-0.1 14(0.02),	3493(118), 3206(10), 3112(47), 1790(250), 1590(192), 1545(64), 1498(26), 1425(1), 1270(18), 1178(17), 1086(0.4), 956(7), 754(11), 616(31), 458(92), 322(21), 230(4), 118(4), 55(3),	3245(0.03), 3204(16), 3112(10), 1782(25), 1570(184), 1542(258), 1480(17), 1409(9), 1248(6), 1157(3), 1048(2), 930(13), 709(12), 570(4), 417(21), 298(0.3), 192(1), 99(4), 50(0.3),	3228(0.2), 3202(19), 3109(13), 1764(274), 1566(39), 1540(15), 1458(8), 1392(141), 1240(11), 1147(1), 1042(3), 915(3), 694(10), 546(82), 383(3), 277(6), 178(47), 94(4), 43(2),
Strand C _{β1} Product	3659(45), 3231(5), 3203(19), 3108(12),	3597(231), 3230(6), 3196(20), 3106(13),	3597(2), 3224(5), 3118(5), 3081(12),	3585(118), 3223(6), 3116(44), 1792(204),	3354(0.03), 3205(9), 3112(13), 1785(184),	3248(0.2), 3203(17), 3111(11), 1773(26),

	1761(363), 1563(12), 1528(400), 1428(11), 1286(21), 1199(37), 1110(0.4), 1001(28), 779(10), 650(13), 528(67), 378(2), 259(13), 175(9), 72(2), 31(0.3),	1620(110), 1558(57), 1508(47), 1410(7), 1278(31), 1186(3), 1098(5), 986(31), 765(1), 637(5), 514(6), 352(32), 257(5), 134(4), 67(1), 23(1),	1595(51), 1553(605), 1492(27), 1393(26), 1264(1), 1184(9), 1089(8), 955(8), 754(1), 613(70), 479(59), 340(15), 232(0.4), 119(1), 59(0.3), 13(0.07),	1575(291), 1546(2), 1456(4), 1390(30), 1258(42), 1154(4), 1085(18), 937(19), 728(15), 596(7), 461(13), 306(3), 226(1), 119(1), 51(1),	1564(11), 1543(351), 1453(5), 1375(12), 1235(32), 1147(0.4), 1083(6), 926(1), 704(10), 582(124), 428(53), 303(0.3), 184(3), 97(3), 37(1),	1563(17), 1541(11), 1452(15), 1347(21), 1208(3), 1116(1), 1034(10), 877(2), 667(23), 559(31), 404(12), 267(0.1), 178(36), 88(0.3), 34(2),
Strand C _{β2} Product	3660(44), 3233(4), 3199(20), 3107(12), 1762(361), 1562(11), 1531(240), 1423(13), 1290(13), 1199(34), 1105(1), 1010(34), 781(12), 658(12), 519(11), 385(3), 260(3), 169(1), 70(0.5), 32(0.3),	3620(106), 3227(7), 3196(20), 3106(14), 1619(111), 1559(175), 1509(32), 1413(4), 1279(54), 1184(8), 1098(4), 977(2), 763(2), 640(16), 505(70), 346(44), 245(5), 133(3), 67(0.4), 22(1),	3586(124), 3224(6), 3118(5), 3086(11), 1587(120), 1553(473), 1492(26), 1393(8), 1258(21), 1178(4), 1090(6), 957(21), 755(0.5), 626(18), 478(47), 341(4), 236(0.4), 121(3), 55(1), 14(0.3),	3580(123), 3223(6), 3116(45), 1793(189), 1584(59), 1545(212), 1456(2), 1391(40), 1253(8), 1155(2), 1088(1), 938(21), 720(6), 584(91), 448(43), 312(8), 224(0.2), 121(3), 48(0.5),	3356(0.03), 3206(10), 3112(13), 1785(188), 1566(42), 1543(465), 1454(11), 1380(21), 1236(32), 1150(3), 1072(35), 924(1), 689(7), 575(52), 430(38), 305(0.3), 182(4), 100(2), 37(2),	3248(0.2), 3204(18), 3109(10), 1772(47), 1564(14), 1540(11), 1452(12), 1341(7), 1222(12), 1112(1), 1042(3), 876(2), 675(51), 557(43), 411(1), 267(5), 178(50), 89(0.1), 32(1),
Strand C _{β3} Product	3649(51), 3230(4), 3200(20), 3109(13), 1760(355), 1564(41),	3619(108), 3227(7), 3197(19), 3105(11), 1619(144), 1560(230),	3598(114), 3224(6), 3118(5), 3088(11), 1596(41), 1553(499),	3576(130), 3223(6), 3116(47), 1794(217), 1577(26), 1546(648),	3353(0.03), 3206(10), 3113(9), 1785(190), 1566(27), 1542(31),	3247(0.2), 3201(17), 3109(10), 1772(24), 1565(41), 1540(7),

	1531(220), 1423(1), 1292(14), 1200(23), 1113(0.1), 1011(45), 779(13), 658(20), 515(22), 387(3), 264(6), 173(36), 73(1), 30(0.3),	1510(9), 1410(3), 1283(45), 1184(8), 1104(2), 992(47), 766(0.2), 634(7), 507(75), 348(41), 239(6), 141(6), 64(0.5), 20(1),	1492(30), 1396(1), 1267(9), 1177(2), 1095(3), 963(12), 752(1), 625(28), 506(54), 340(9), 232(0.4), 119(2), 55(1), 14(0.09),	1457(3), 1393(58), 1251(9), 1157(2), 1089(7), 932(9), 724(5), 580(3), 462(24), 323(5), 225(2), 119(2), 49(1),	1455(9), 1375(10), 1240(17), 1149(1), 1042(4), 922(2), 705(38), 568(171), 423(47), 307(0.3), 188(1), 99(1), 42(2),	1452(20), 1341(31), 1209(40), 1125(3), 1036(3), 875(2), 675(18), 557(8), 411(5), 269(2), 182(13), 87(1), 37(1),
Strand N1 Product	3659(45), 3224(5), 3197(19), 3109(4), 1756(293), 1563(17), 1537(4), 1440(58), 1303(17), 1201(19), 1147(0.3), 1033(9), 877(2), 659(12), 544(33), 377(8), 267(1), 159(18), 83(1), 32(0.3),	3616(121), 3218(11), 3122(2), 3108(22), 1620(110), 1561(117), 1525(18), 1426(7), 1300(199), 1198(19), 1109(0.4), 997(75), 826(27), 643(16), 502(3), 355(5), 259(3), 140(3), 78(2), 16(0.1),	3595(118), 3217(3), 3116(44), 3038(1), 1594(73), 1553(434), 1492(25), 1407(7), 1281(66), 1188(5), 1098(15), 984(8), 772(2), 621(20), 478(56), 332(1), 243(0.4), 131(4), 69(1), 10(1),	3250(6), 3204(18), 3112(12), 1944(687), 1573(357), 1551(70), 1471(9), 1389(32), 1269(4), 1184(8), 1097(10), 958(2), 765(2), 594(6), 453(34), 315(53), 231(2), 131(4), 46(2),	3248(0.03), 3203(17), 3112(14), 1792(188), 1565(10), 1544(167), 1456(5), 1366(5), 1258(43), 1164(10), 1082(9), 933(19), 755(1), 572(26), 431(18), 308(0.3), 222(4), 107(8), 37(1),	3224(0.2), 3201(17), 3111(10), 1770(135), 1564(9), 1540(18), 1453(15), 1360(25), 1225(19), 1151(2), 1075(6), 927(1), 708(3), 568(95), 409(25), 301(4), 212(10), 89(1), 35(0.3),
Strand N2 Product	3659(44), 3225(4), 3197(19), 3110(16), 1766(308), 1562(18), 1541(112), 1452(17),	3617(89), 3220(10), 3122(10), 3064(13), 1620(126), 1559(21), 1530(158), 1417(5),	3604(128), 3215(14), 3117(12), 3038(1), 1581(245), 1555(147), 1491(24), 1403(14),	3251(3), 3209(14), 3117(5), 1886(538), 1576(282), 1550(4), 1471(5), 1385(22),	3248(0.03), 3203(18), 3117(42), 1790(166), 1566(12), 1549(33), 1454(27), 1380(112),	3231(0.2), 3203(9), 3112(11), 1784(212), 1563(25), 1543(51), 1453(6), 1337(25),

	1323(57), 1209(14), 1141(13), 1046(2), 877(5), 673(9), 510(47), 379(5), 263(2), 167(16), 72(2), 33(0.3),	1302(3), 1199(36), 1110(4), 1009(31), 867(22), 649(17), 498(54), 360(18), 261(3), 158(8), 64(2), 20(0.08),	1278(10), 1184(5), 1102(5), 991(47), 769(3), 631(6), 481(49), 342(5), 247(0.4), 139(9), 59(2), 7(0.4),	1267(148), 1182(0.5), 1090(7), 966(6), 755(1), 605(14), 461(10), 309(12), 240(4), 139(9), 54(1),	1259(54), 1168(1), 1083(12), 942(14), 704(13), 576(1), 418(65), 307(0.3), 229(2), 110(4), 44(1),	1233(47), 1152(22), 1056(0.1), 919(6), 697(10), 551(83), 397(1), 273(1), 214(1), 86(7), 39(1),
Strand N3 Product	3660(46), 3227(5), 3198(20), 3107(12), 1767(293), 1563(25), 1540(10), 1450(4), 1316(4), 1210(2), 1136(5), 1042(4), 885(3), 697(2), 504(81), 360(17), 266(2), 179(18), 79(2), 29(0.3),	3620(110), 3224(5), 3120(12), 3085(11), 1605(148), 1559(1), 1531(140), 1421(29), 1294(16), 1203(6), 1116(11), 1010(44), 852(18), 658(8), 500(7), 345(34), 258(2), 160(11), 65(0.3), 19(1),	3608(92), 3216(8), 3119(10), 3056(9), 1596(58), 1550(20), 1498(17), 1409(2), 1275(6), 1178(22), 1104(2), 990(32), 766(3), 632(8), 476(106), 329(8), 250(0.4), 129(2), 57(1), 16(0.4),	3246(1), 3213(15), 3118(5), 1868(473), 1570(555), 1547(47), 1458(18), 1407(36), 1270(93), 1166(2), 1089(7), 974(4), 757(5), 618(21), 468(13), 312(51), 234(2), 129(2), 52(1),	3245(0.03), 3207(16), 3118(30), 1792(247), 1566(27), 1544(14), 1455(7), 1384(47), 1260(117), 1154(2), 1075(16), 936(13), 733(10), 555(4), 425(14), 289(0.3), 218(0.2), 105(2), 46(1),	3228(0.2), 3206(10), 3109(11), 1785(134), 1566(7), 1542(219), 1452(17), 1359(53), 1240(31), 1144(41), 1054(1), 930(5), 715(12), 521(54), 393(2), 274(10), 203(4), 91(5), 32(8),
Strand N4 Product	3620(109), 3225(5), 3148(5), 3105(12), 1760(337), 1561(33), 1539(1), 1450(8), 1347(22), 1217(11),	3610(107), 3224(6), 3119(8), 3102(10), 1599(47), 1550(13), 1531(187), 1428(26), 1292(14), 1191(2),	3599(109), 3217(8), 3118(5), 3069(5), 1586(38), 1546(13), 1460(14), 1412(31), 1275(40), 1173(17),	3233(17), 3206(10), 3111(11), 1865(414), 1566(87), 1545(381), 1457(9), 1407(24), 1264(3), 1158(4),	3229(0.03), 3202(18), 3109(12), 1785(218), 1564(19), 1542(57), 1454(5), 1383(10), 1252(95), 1149(3),	3227(0.2), 3200(20), 3108(9), 1774(42), 1563(777), 1540(4), 1452(19), 1375(55), 1241(19), 1144(8),

	1113(0.3), 1021(3), 921(1), 671(3), 530(31), 369(21), 265(5), 173(11), 77(0.3), 29(0.3),	1105(1), 1011(41), 826(3), 657(17), 512(10), 343(6), 261(0.3), 134(1), 73(1), 19(1),	1098(4), 999(66), 793(3), 628(13), 503(67), 326(3), 236(0.4), 123(2), 64(0.2), 13(0.2),	1089(7), 976(3), 766(2), 597(7), 462(23), 310(0.2), 233(7), 123(2), 55(2),	1042(17), 947(6), 760(4), 583(25), 430(53), 295(0.3), 221(10), 103(7), 49(1),	1042(6), 932(11), 724(3), 559(111), 407(3), 269(2), 187(32), 98(1), 42(1),
Strand N' Cap Product	3659(45), 3242(1), 3200(20), 3109(5), 1760(366), 1564(13), 1540(10), 1430(3), 1299(30), 1199(39), 1113(1), 999(87), 778(4), 656(2), 523(1), 383(3), 265(3), 183(5), 82(0.4), 30(0.3),	3612(95), 3226(6), 3197(20), 3108(11), 1620(104), 1563(27), 1506(55), 1414(21), 1279(41), 1190(0.2), 1104(0.09), 978(3), 767(2), 636(31), 498(1), 345(23), 258(3), 177(48), 69(1), 20(1),	3597(116), 3224(5), 3116(44), 3108(22), 1616(238), 1562(82), 1491(26), 1408(2), 1265(1), 1184(6), 1097(6), 950(4), 756(1), 596(5), 480(56), 342(19), 242(0.4), 133(2), 65(0.5), 13(0.08),	3594(124), 3224(6), 3112(14), 1812(425), 1596(28), 1555(433), 1456(5), 1390(25), 1258(46), 1159(4), 1082(10), 932(11), 732(7), 575(261), 463(11), 310(1), 240(1), 133(2), 50(1),	3370(0.03), 3203(18), 3111(11), 1792(204), 1573(872), 1547(2), 1452(18), 1380(28), 1242(20), 1150(1), 1041(24), 919(1), 722(1), 562(11), 427(78), 303(0.3), 229(3), 110(17), 38(1),	3248(0.2), 3203(18), 3110(9), 1773(73), 1566(14), 1543(82), 1452(12), 1350(7), 1220(10), 1147(0.3), 1019(1), 877(2), 697(2), 554(32), 405(4), 270(3), 228(3), 101(1), 34(3),
Strand C' Cap Product	3648(53), 3227(7), 3202(18), 3109(8), 1759(370), 1563(39), 1531(200), 1429(6), 1295(37), 1201(2), 1113(2),	3619(109), 3226(5), 3200(20), 3105(11), 1606(94), 1561(1136), 1501(14), 1414(9), 1288(33), 1189(4), 1104(1),	3600(116), 3224(6), 3118(5), 3104(12), 1597(52), 1550(18), 1458(1), 1408(1), 1269(5), 1160(7), 1094(7),	3597(116), 3223(6), 3111(10), 1791(206), 1583(76), 1544(346), 1455(3), 1389(29), 1263(17), 1151(4), 1089(7),	3420(0.03), 3206(10), 3111(14), 1785(180), 1566(52), 1542(3), 1453(16), 1378(9), 1241(10), 1148(5), 1042(3),	3279(0.2), 3203(17), 3109(13), 1771(21), 1564(18), 1540(12), 1452(16), 1347(16), 1225(0.4), 1135(31), 1011(40),

	999(72), 772(4), 648(18), 524(1), 382(1), 269(2), 185(1), 82(1), 29(0.3),	977(4), 766(2), 628(22), 505(67), 344(21), 265(4), 177(48), 69(1), 19(1),	950(3), 748(0.3), 595(6), 465(17), 341(22), 262(0.4), 148(1), 65(1), 13(0.03),	932(11), 724(4), 580(221), 434(69), 318(7), 242(3), 148(1), 54(1),	921(1), 688(0.5), 563(58), 428(21), 307(0.3), 230(3), 108(16), 47(0.5),	863(1), 661(7), 549(8), 408(1), 297(10), 228(1), 99(1), 35(3),
Turn Reactant	3636(44), 3234(10), 3203(11), 3119(10), 1756(3), 1576(128), 1549(7), 1461(17), 1385(8), 1293(29), 1182(1), 1090(8), 795(5), 645(43), 431(54), 338(5), 233(.3), 173(4), 106(9),	3558(122), 3220(9), 3201(12), 3118(11), 1746(46), 1570(8), 1547(9), 1459(17), 1384(11), 1229(13), 1180(3), 1067(6), 779(6), 627(18), 405(95), 302(5), 226(8), 169(5), 80(2),	3545(105), 3219(8), 3150(5), 3111(33), 1627(157), 1559(16), 1545(64), 1456(27), 1356(7), 1220(5), 1144(3), 1052(5), 738(94), 599(19), 389(7), 275(6), 215(4), 165(1), 66(1),	3490(207), 3213(12), 3137(4), 3109(15), 1614(187), 1555(12), 1541(55), 1431(6), 1340(12), 1219(14), 1105(9), 1007(3), 730(24), 594(15), 364(25), 266(8), 207(1), 142(14), 56(1),	3249(3), 3212(10), 3134(7), 1784(478), 1606(168), 1551(9), 1494(5), 1424(4), 1314(36), 1188(23), 1104(5), 985(5), 713(81), 503(2), 348(16), 253(1), 196(2), 127(8), 45(.2),	3235(5), 3204(13), 3120(14), 1767(153), 1580(25), 1550(9), 1463(15), 1408(21), 1298(43), 1185(11), 1097(15), 952(5), 666(137), 473(14), 340(16), 248(4), 189(.4), 111(16), 28(5),
Turn C _{α1} Product	3595(36), 3243(1), 3189(25), 3115(15), 1696(63), 1569(2), 1547(25), 1459(10), 1356(10), 1221(13), 1099(4), 1018(20), 721(18), 568(57),	3550(147), 3234(7), 3157(14), 3100(44), 1663(241), 1554(4), 1533(14), 1453(28), 1349(25), 1218(6), 1094(7), 997(3), 709(91), 555(12),	3480(285), 3221(10), 3153(5), 3074(13), 1624(214), 1553(9), 1530(45), 1449(6), 1319(245), 1187(10), 1087(10), 954(3), 674(55), 504(5),	3463(406), 3214(13), 3122(8), 1793(381), 1618(251), 1549(7), 1495(9), 1418(2), 1302(26), 1180(10), 1076(4), 947(2), 658(55), 466(16),	3245(3), 3201(6), 3119(11), 1788(91), 1589(275), 1548(5), 1466(45), 1417(15), 1295(28), 1176(2), 1063(11), 902(10), 633(17), 408(13),	3244(), 3200(16), 3117(2), 1752(168), 1570(7), 1547(24), 1464(19), 1390(3), 1264(24), 1142(2), 1057(5), 895(5), 621(58), 385(6),

	365(11), 265(8), 170(2), 96(.5), 42(2),	353(18), 254(1), 148(3), 74(.4), 20(1),	349(13), 233(1), 142(1), 65(4), 14(2),	338(12), 227(5), 127(2), 62(1),	309(6), 207(9), 119(3), 53(.2),	299(6), 195(5), 116(6), 47(6),
Turn C _{α2} Product	3643(51), 3249(3), 3203(9), 3112(25), 1747(54), 1568(127), 1539(127), 1433(9), 1340(13), 1188(21), 1104(9), 988(3), 805(9), 670(152), 516(26), 363(34), 256(8), 198(2), 141(15), 56(0.3),	3559(120), 3235(3), 3200(14), 3111(8), 1627(157), 1555(11), 1494(4), 1424(4), 1298(42), 1186(10), 1099(8), 986(1), 791(3), 654(31), 498(4), 348(15), 253(1), 189(1), 127(9), 44(0.1),	3535(118), 3235(11), 3150(5), 3109(17), 1617(169), 1551(11), 1494(7), 1409(21), 1296(31), 1183(3), 1090(11), 949(4), 777(6), 645(31), 436(39), 341(16), 234(0.4), 184(4), 112(13), 28(5),	3496(200), 3220(9), 3134(7), 1784(479), 1606(181), 1549(9), 1463(16), 1384(4), 1292(16), 1181(1), 1078(8), 928(13), 737(95), 630(17), 428(50), 335(2), 230(9), 184(4), 106(9),	3377(0.03), 3213(11), 3120(14), 1767(155), 1579(2), 1547(8), 1460(19), 1371(23), 1220(5), 1159(10), 1065(7), 894(9), 726(32), 603(6), 400(93), 300(0.3), 215(4), 169(5), 81(2),	3251(0.2), 3205(12), 3119(10), 1754(6), 1570(7), 1543(31), 1455(28), 1356(8), 1219(14), 1126(13), 1020(3), 886(3), 708(76), 597(29), 390(5), 275(9), 207(0.4), 165(1), 66(1),
Turn C _{α3} Product	3629(37), 3234(13), 3197(17), 3110(47), 1749(30), 1569(9), 1543(7), 1460(20), 1360(9), 1217(9), 1106(8), 1012(3), 877(8), 716(3), 546(1), 369(10), 267(8),	3518(167), 3233(3), 3154(4), 3106(10), 1647(217), 1557(17), 1539(20), 1455(37), 1338(126), 1215(1), 1100(5), 997(9), 820(130), 706(30), 509(18), 352(23), 247(0.5),	3498(156), 3220(9), 3148(13), 3071(15), 1635(356), 1550(7), 1534(37), 1452(8), 1321(44), 1187(13), 1096(15), 959(3), 786(3), 673(48), 477(63), 338(3), 238(0.4),	3430(230), 3216(9), 3147(2), 1788(577), 1622(113), 1549(8), 1498(7), 1429(9), 1312(20), 1179(4), 1077(21), 942(4), 781(52), 649(8), 447(87), 325(4), 231(4),	3246(0.03), 3207(10), 3121(12), 1778(344), 1573(115), 1547(53), 1465(14), 1412(18), 1296(35), 1179(9), 1054(1), 924(4), 748(126), 610(3), 430(20), 302(0.3), 209(5),	3244(0.2), 3198(8), 3120(9), 1763(92), 1570(7), 1546(2), 1464(15), 1379(21), 1254(36), 1144(6), 1052(6), 894(4), 723(32), 591(14), 401(3), 272(10), 193(2),

	180(3), 116(0.4), 40(0.3),	174(0.4), 105(8), 37(2),	166(1), 95(0.4), 27(0.3),	166(1), 86(5),	151(4), 73(8),	125(13), 58(0.4),
Turn C _{β1} Product	3643(51), 3249(3), 3203(9), 3112(25), 1747(54), 1568(127), 1539(127), 1433(9), 1340(13), 1188(21), 1104(9), 988(3), 805(9), 670(152), 516(26), 363(34), 256(8), 198(2), 141(15), 56(0.3),	3559(120), 3235(3), 3200(14), 3111(8), 1627(157), 1555(11), 1494(4), 1424(4), 1298(42), 1186(10), 1099(8), 986(1), 791(3), 654(31), 498(4), 348(15), 253(1), 189(1), 127(9), 44(0.1),	3535(118), 3235(11), 3150(5), 3109(17), 1617(169), 1551(11), 1494(7), 1409(21), 1296(31), 1183(3), 1090(11), 949(4), 777(6), 645(31), 436(39), 341(16), 234(0.4), 184(4), 112(13), 28(5),	3496(200), 3220(9), 3134(7), 1784(479), 1606(181), 1549(9), 1463(16), 1384(4), 1292(16), 1181(1), 1078(8), 928(13), 737(95), 630(17), 428(50), 335(2), 230(9), 184(4), 106(9),	3377(0.03), 3213(11), 3120(14), 1767(155), 1579(2), 1547(8), 1460(19), 1371(23), 1220(5), 1159(10), 1065(7), 894(9), 726(32), 603(6), 400(93), 300(0.3), 215(4), 169(5), 81(2),	3251(0.2), 3205(12), 3119(10), 1754(6), 1570(7), 1543(31), 1455(28), 1356(8), 1219(14), 1126(13), 1020(3), 886(3), 708(76), 597(29), 390(5), 275(9), 207(0.4), 165(1), 66(1),
Turn C _{β2} Product	3636(44), 3235(4), 3203(11), 3112(33), 1751(46), 1559(14), 1541(53), 1430(4), 1317(11), 1218(13), 1104(11), 996(1), 811(8), 682(150), 503(1), 362(18), 265(8), 196(3), 134(3),	3559(124), 3234(11), 3202(12), 3110(15), 1628(152), 1555(9), 1505(5), 1423(4), 1311(39), 1187(19), 1099(9), 965(2), 794(2), 652(26), 478(16), 346(16), 250(4), 190(1), 127(6),	3550(99), 3221(9), 3137(4), 3068(6), 1608(216), 1551(7), 1494(5), 1386(16), 1298(20), 1184(11), 1091(13), 945(1), 781(8), 645(50), 437(26), 340(16), 234(0.4), 172(1), 109(17),	3487(201), 3219(8), 3130(7), 1786(512), 1598(148), 1550(8), 1463(15), 1385(2), 1282(37), 1183(2), 1074(3), 931(1), 744(32), 633(55), 419(56), 332(7), 229(6), 172(1), 105(9),	3365(0.03), 3213(12), 3119(10), 1769(129), 1581(21), 1549(8), 1461(14), 1369(20), 1230(14), 1144(0.2), 1053(5), 906(3), 734(75), 600(11), 404(97), 303(0.3), 218(3), 168(1), 80(2),	3246(0.2), 3212(10), 3117(11), 1757(3), 1577(134), 1545(70), 1455(26), 1339(14), 1220(5), 1124(10), 1012(3), 892(11), 712(80), 597(30), 383(8), 275(7), 207(1), 144(14), 67(1),

	57(0.3),	47(0.2),	26(5),			
Turn C _{β3} Product	3636(44), 3250(3), 3202(16), 3112(32), 1745(67), 1570(12), 1541(66), 1432(6), 1319(9), 1187(18), 1105(9), 1005(2), 807(13), 666(101), 529(5), 361(28), 266(9), 196(2), 142(12), 57(0.3),	3554(133), 3236(5), 3201(7), 3109(16), 1630(149), 1559(16), 1494(1), 1423(6), 1313(36), 1185(11), 1099(9), 979(3), 794(5), 652(28), 474(13), 348(13), 253(1), 187(1), 128(8), 45(0.2),	3549(97), 3233(9), 3149(5), 3101(6), 1611(154), 1551(9), 1491(13), 1409(22), 1295(47), 1184(5), 1088(11), 947(4), 778(5), 644(53), 435(45), 342(13), 247(0.4), 180(2), 112(13), 30(4),	3501(203), 3219(8), 3137(4), 1787(446), 1592(211), 1550(9), 1461(18), 1384(15), 1292(22), 1180(2), 1066(4), 923(8), 733(99), 626(28), 430(67), 335(2), 228(7), 180(2), 110(11),	3378(0.03), 3212(11), 3120(14), 1768(181), 1580(9), 1547(8), 1459(13), 1372(10), 1229(12), 1150(16), 1053(5), 896(7), 730(19), 597(29), 406(98), 303(0.3), 214(5), 170(6), 81(1),	3252(0.2), 3205(12), 3117(11), 1755(3), 1577(134), 1545(54), 1458(29), 1356(8), 1220(5), 1131(9), 1033(4), 886(8), 706(86), 595(14), 387(2), 270(6), 208(1), 164(2), 65(1),
Turn N1 Product	3567(144), 3232(9), 3204(11), 3115(29), 1750(61), 1555(16), 1538(17), 1437(58), 1356(8), 1218(17), 1135(3), 1044(21), 887(1), 727(74), 590(15), 360(19), 254(2), 203(3), 139(5), 53(0.3),	3563(109), 3220(8), 3146(6), 3112(12), 1623(165), 1552(6), 1525(12), 1420(3), 1331(17), 1186(17), 1105(9), 989(4), 833(23), 699(113), 578(63), 349(19), 248(5), 188(1), 125(8), 48(1),	3523(117), 3213(11), 3129(7), 3089(17), 1619(149), 1549(7), 1494(5), 1411(10), 1324(183), 1185(6), 1099(17), 974(8), 793(2), 651(59), 500(2), 340(18), 239(0.4), 172(2), 106(5), 40(0.3),	3255(3), 3212(10), 3123(14), 1879(855), 1597(163), 1549(10), 1464(16), 1408(25), 1297(50), 1183(13), 1089(9), 947(2), 774(4), 624(34), 442(3), 330(4), 222(2), 172(2), 97(10),	3246(0.03), 3206(9), 3121(14), 1780(275), 1578(7), 1548(3), 1460(20), 1386(4), 1292(40), 1182(0.3), 1078(1), 928(31), 753(26), 621(60), 425(22), 299(0.3), 216(1), 157(8), 71(1),	3239(0.2), 3205(10), 3118(10), 1777(99), 1567(11), 1547(20), 1455(9), 1370(30), 1222(4), 1162(8), 1065(6), 894(8), 739(36), 604(12), 380(13), 279(6), 208(8), 145(0.4), 70(1),
Turn N2 Product	3651(46),	3557(157),	3547(129),	3235(6),	3234(0.03),	3224(0.2),

	3220(10), 3204(15), 3118(44), 1750(37), 1560(7), 1543(6), 1445(6), 1343(33), 1222(13), 1112(6), 1046(1), 894(7), 689(26), 586(37), 369(50), 273(3), 201(3), 126(6), 72(0.3),	3217(7), 3136(1), 3112(19), 1630(163), 1555(11), 1527(49), 1434(34), 1333(8), 1217(16), 1105(4), 1001(5), 854(15), 662(45), 506(3), 350(19), 263(9), 176(4), 115(3), 47(1),	3214(8), 3133(5), 3111(11), 1604(233), 1553(15), 1483(7), 1419(3), 1308(39), 1185(20), 1094(20), 974(12), 792(4), 643(37), 474(8), 340(8), 251(0.4), 160(2), 92(3), 33(1),	3213(12), 3126(5), 1792(649), 1579(4), 1548(6), 1463(17), 1392(5), 1302(32), 1175(14), 1092(2), 960(0.2), 783(5), 637(57), 408(14), 325(7), 236(1), 160(2), 84(5),	3208(11), 3119(10), 1783(76), 1571(75), 1546(149), 1463(25), 1384(2), 1271(90), 1166(10), 1077(9), 948(9), 749(11), 632(8), 394(14), 295(0.3), 219(11), 138(8), 83(0.08),	3206(16), 3118(5), 1758(185), 1562(9), 1544(3), 1454(25), 1380(29), 1243(7), 1146(9), 1057(5), 905(4), 743(122), 590(16), 376(95), 279(10), 214(4), 135(5), 76(12),
Turn N3 Product	3669(55), 3235(3), 3206(16), 3117(31), 1747(150), 1553(9), 1543(8), 1449(27), 1339(42), 1213(3), 1135(1), 1053(22), 878(0.5), 714(1), 570(22), 385(10), 271(11), 206(9), 116(3), 49(0.3),	3517(331), 3224(12), 3139(2), 3101(6), 1614(201), 1553(8), 1537(20), 1420(3), 1311(16), 1196(18), 1104(4), 1007(6), 859(11), 689(60), 494(30), 338(12), 252(4), 184(6), 99(7), 30(0.2),	3497(152), 3220(9), 3129(16), 3039(7), 1613(230), 1552(4), 1497(22), 1412(4), 1304(66), 1183(20), 1097(17), 984(4), 795(1), 670(29), 488(10), 329(5), 241(0.4), 168(2), 93(2), 23(3),	3263(2), 3217(12), 3123(16), 2175(1741), 1607(136), 1548(15), 1466(9), 1392(21), 1274(2), 1179(9), 1089(11), 951(14), 778(13), 616(15), 465(69), 307(7), 230(1), 168(2), 72(0.4),	3243(0.03), 3216(10), 3121(4), 1772(198), 1571(3), 1547(21), 1460(43), 1379(35), 1264(200), 1165(5), 1075(13), 932(8), 766(61), 604(33), 447(4), 302(0.3), 228(3), 138(9), 59(1),	3242(0.2), 3211(3), 3119(10), 1766(299), 1568(14), 1543(29), 1454(6), 1349(7), 1224(6), 1144(2), 1061(5), 929(2), 719(133), 591(24), 424(17), 289(21), 215(2), 129(6), 55(1),
Turn N4 Product	3608(75), 3219(12), 3158(2),	3500(174), 3217(10), 3151(5),	3492(196), 3214(7), 3145(1),	3245(4), 3210(3), 3130(8),	3238(0.03), 3207(10), 3121(11),	3228(0.2), 3204(13), 3119(3),

	3119(15), 1749(26), 1554(18), 1532(24), 1453(21), 1358(5), 1214(12), 1105(8), 1019(4), 897(8), 715(96), 577(12), 369(20), 260(3), 192(5), 116(13), 53(0.3),	3111(9), 1617(178), 1554(4), 1530(17), 1420(19), 1338(17), 1192(15), 1100(6), 1004(5), 843(1), 703(42), 557(187), 354(25), 255(1), 184(3), 106(2), 40(0.3),	3079(7), 1595(184), 1551(23), 1465(12), 1418(6), 1321(34), 1183(12), 1095(24), 982(2), 797(7), 665(46), 475(18), 350(11), 248(0.4), 167(1), 92(2), 36(2),	1773(351), 1584(142), 1549(8), 1462(20), 1411(13), 1301(52), 1181(10), 1074(5), 970(2), 795(3), 624(29), 465(4), 307(1), 242(14), 167(1), 87(5),	1764(73), 1572(6), 1544(5), 1460(19), 1379(29), 1270(110), 1149(5), 1055(4), 945(7), 768(14), 619(11), 446(20), 284(0.3), 234(6), 124(9), 84(3),	1751(238), 1559(22), 1540(8), 1455(30), 1378(10), 1239(23), 1141(6), 1039(18), 923(4), 754(77), 606(1), 394(0.1), 269(5), 214(2), 118(8), 60(2),
Turn N' Cap Product	3613(69), 3248(3), 3203(13), 3119(15), 1725(221), 1564(5), 1546(6), 1433(7), 1340(20), 1211(14), 1106(8), 987(3), 815(32), 701(71), 576(321), 364(24), 286(13), 216(5), 123(24), 52(0.3),	3560(105), 3239(5), 3202(21), 3116(9), 1622(204), 1557(14), 1511(6), 1417(9), 1333(26), 1193(17), 1097(14), 959(5), 800(6), 699(47), 541(7), 348(11), 266(5), 200(1), 118(2), 47(2),	3497(202), 3220(13), 3152(5), 3114(30), 1619(147), 1552(10), 1492(12), 1410(15), 1306(50), 1181(15), 1091(6), 943(7), 787(4), 652(22), 497(6), 341(13), 254(0.4), 193(6), 115(4), 32(5),	3475(192), 3218(10), 3145(1), 1778(460), 1607(179), 1552(12), 1465(14), 1386(30), 1293(34), 1179(5), 1067(6), 922(3), 775(70), 616(13), 462(3), 328(27), 247(1), 193(6), 100(12),	3380(0.03), 3218(8), 3122(14), 1764(102), 1605(173), 1549(5), 1460(21), 1382(2), 1234(17), 1176(11), 1042(3), 892(8), 723(11), 606(95), 443(27), 305(0.3), 243(2), 164(2), 87(2),	3252(0.2), 3211(11), 3121(10), 1749(64), 1571(6), 1548(24), 1459(16), 1353(5), 1213(9), 1142(3), 1035(4), 886(2), 706(40), 579(14), 394(3), 298(1), 225(4), 156(1), 61(1),
Turn C' Cap Product	3599(61), 3249(3), 3213(2), 3121(3), 1742(18),	3559(113), 3244(2), 3204(12), 3119(15), 1622(191),	3487(192), 3220(10), 3153(4), 3119(10), 1613(220),	3478(219), 3220(9), 3142(1), 1776(512), 1608(175),	3407(0.03), 3217(10), 3123(11), 1759(87), 1580(135),	3271(0.2), 3214(11), 3121(10), 1754(68), 1570(6),

1556(14),	1552(23),	1550(11),	1550(4),	1549(15),	1546(7),
1529(46),	1508(5),	1466(12),	1462(22),	1461(12),	1460(29),
1424(6),	1421(7),	1410(15),	1384(2),	1382(24),	1354(6),
1342(20),	1317(35),	1302(54),	1301(19),	1240(8),	1216(5),
1215(12),	1190(18),	1184(11),	1181(5),	1143(4),	1134(15),
1106(5),	1102(2),	1096(20),	1072(9),	1058(4),	1010(3),
985(3),	955(4),	942(4),	924(4),	889(4),	871(6),
809(18),	792(4),	782(32),	768(61),	733(121),	716(59),
702(88),	667(37),	639(8),	624(22),	609(12),	585(8),
524(77),	508(104),	501(37),	459(21),	444(25),	393(2),
366(33),	352(15),	345(12),	341(2),	336(0.3),	305(2),
287(12),	266(7),	253(0.4),	246(2),	241(2),	228(4),
217(1),	209(2),	190(5),	190(5),	165(2),	141(4),
136(1),	119(19),	112(1),	107(8),	76(8),	63(0.3),
51(0.3),	47(1),	25(7),			

Table S2

Strand $C_{\alpha 1}^{\bullet \bullet}$	3661(46), 3242(4), 3182(10), 3104(11), 1667(83), 1557(10), 1532(118), 1449(35), 1322(92), 1187(8), 1067(5), 950(4), 757(26), 595(5), 453(45), 304(4), 205(31), 110(0.5), 40(1),	3634(114), 3227(5), 3138(8), 3074(10), 1630(52), 1555(452), 1527(458), 1440(192), 1283(22), 1184(7), 1053(0.3), 911(15), 754(22), 584(12), 393(27), 282(1), 170(16), 101(1), 39(3),	3524(92), 3214(14), 3115(32), 1824(88), 1619(70), 1546(67), 1491(26), 1432(186), 1262(81), 1144(2), 1046(2), 888(16), 693(8), 569(33), 370(5), 274(1), 143(1), 73(2), 33(2),	3518(103), 3200(22), 3115(2), 1789(196), 1573(1030), 1545(101), 1484(4), 1419(12), 1254(61), 1098(7), 1032(46), 870(5), 691(1), 528(5), 357(8), 258(7), 140(7), 73(2), 31(4),	3259(5), 3198(6), 3113(31), 1758(572), 1564(9), 1543(267), 1477(36), 1388(174), 1202(40), 1084(23), 1015(38), 780(87), 675(38), 485(127), 346(13), 253(4), 138(0.4), 52(2), 21(2),	3246(1), 3194(21), 3109(21), 1683(215), 1563(100), 1537(73), 1451(81), 1370(315), 1199(49), 1082(8), 989(9), 764(3), 634(3), 471(7), 316(36), 241(6), 126(1), 48(0.7), 12(0.3),
Strand $C_{\alpha 1}^{\bullet \bullet}$	3678(34), 3226(6), 3183(11), 3100(10), 1650(41), 1546(30), 1535(89), 1452(38), 1329(117), 1187(14), 1064(0.3), 959(7), 767(7), 593(27), 459(65), 314(5), 197(32), 110(0.3), 59(0.4),	3615(124), 3221(7), 3181(13), 3094(14), 1646(79), 1545(130), 1529(544), 1435(114), 1288(27), 1178(18), 1050(1), 926(22), 721(17), 580(15), 393(13), 304(9), 183(0.3), 101(2), 53(1),	3524(96), 3217(8), 3115(2), 1819(265), 1598(270), 1544(36), 1498(27), 1429(116), 1257(13), 1151(1), 1048(2), 890(5), 699(1), 574(20), 368(3), 289(8), 150(0.4), 97(3), 47(4),	3498(116), 3203(20), 3112(49), 1784(110), 1571(402), 1539(29), 1482(17), 1423(46), 1243(21), 1104(5), 1020(21), 855(10), 694(9), 541(60), 366(5), 275(0.2), 145(1), 97(3), 35(2),	3244(0.03), 3201(20), 3111(13), 1715(246), 1566(41), 1538(37), 1480(14), 1394(235), 1222(50), 1086(1), 1015(66), 797(62), 684(4), 525(10), 341(6), 252(0.3), 131(2), 76(4), 24(2),	3240(0.2), 3199(6), 3102(9), 1687(202), 1562(1034), 1537(73), 1456(33), 1372(119), 1203(8), 1084(10), 998(27), 774(79), 631(17), 463(39), 329(59), 230(6), 117(5), 63(2), 14(0.1),
Strand $C_{\alpha 2}^{\bullet \bullet}$	3675(34), 3230(6),	3628(103), 3225(5),	3520(99), 3212(11),	3498(115), 3206(9),	3258(0.03), 3201(19),	3244(0.2), 3199(21),

	3180(12), 3101(13), 1670(26), 1554(93), 1533(223), 1453(9), 1341(50), 1199(7), 1053(0.3), 956(3), 760(47), 627(9), 457(11), 293(19), 205(8), 113(8), 55(0.3),	3144(7), 3075(9), 1634(10), 1550(9), 1529(330), 1439(162), 1293(9), 1177(14), 1046(3), 924(4), 713(16), 593(26), 406(12), 290(6), 178(0.3), 101(2), 51(3),	3118(5), 1805(102), 1589(513), 1545(8), 1498(31), 1422(55), 1244(12), 1152(1), 1043(3), 896(33), 691(16), 570(4), 365(7), 276(7), 153(0.4), 90(2), 41(0.2),	3110(52), 1781(121), 1575(455), 1542(380), 1481(4), 1416(96), 1234(61), 1106(2), 1033(44), 855(4), 680(4), 519(13), 357(4), 266(0.2), 139(9), 90(2), 40(0.3),	3110(12), 1749(481), 1566(103), 1540(17), 1475(36), 1397(691), 1218(36), 1090(6), 1013(58), 796(67), 678(30), 486(87), 339(5), 251(0.3), 136(2), 70(8), 18(1),	3102(13), 1708(425), 1564(392), 1537(59), 1457(32), 1378(88), 1204(55), 1088(4), 1008(15), 775(13), 651(6), 465(90), 328(60), 226(1), 125(2), 64(0.2), 14(0.2),
Strand $C_{\alpha 1} \cdot \alpha 2 \cdot \alpha 3$	3673(33), 3243(8), 3179(11), 3074(10), 1651(2), 1544(119), 1528(875), 1444(115), 1280(30), 1088(4), 1034(0.3), 856(5), 682(2), 571(29), 347(13), 259(7), 141(1), 88(0.1), 31(0.3),	3535(96), 3220(6), 3140(8), 1828(81), 1618(69), 1543(57), 1498(33), 1431(32), 1234(51), 1081(7), 1021(14), 777(82), 679(64), 522(1), 340(15), 252(5), 138(0.3), 73(2), 19(2),	3530(97), 3209(13), 3114(2), 1769(53), 1580(840), 1541(46), 1484(0.2), 1419(34), 1201(13), 1066(8), 1011(40), 766(11), 671(5), 470(105), 319(58), 212(27), 133(0.4), 59(9), 16(0.2),	3520(104), 3198(5), 3109(55), 1759(1037), 1563(556), 1537(27), 1480(14), 1399(1795), 1198(112), 1054(0.4), 959(1), 748(48), 609(1), 457(3), 299(4), 180(0.2), 123(3), 59(9),	3259(0.03), 3198(22), 3102(14), 1710(350), 1557(51), 1536(49), 1477(30), 1371(81), 1187(94), 1047(2), 898(35), 747(70), 584(11), 370(5), 284(3), 161(0.3), 110(0.3), 46(1),	3244(0.2), 3179(12), 3099(8), 1668(19), 1547(25), 1533(40), 1450(47), 1334(155), 1177(18), 1047(5), 887(17), 695(14), 576(15), 360(4), 274(5), 144(0.4), 98(1), 41(0.2),
Strand R****	3677(34), 3258(21), 3179(10), 1778(218), 1567(1635), 1529(840),	3542(96), 3247(1), 3169(19), 1768(17), 1543(35), 1508(36),	3539(104), 3226(3), 3101(8), 1761(1183), 1541(144), 1495(87),	3535(80), 3217(7), 3099(7), 1662(66), 1536(15), 1483(6),	3401(0.03), 3215(6), 3094(15), 1644(4), 1536(23), 1481(12),	3380(0.2), 3180(12), 1999(984), 1610(90), 1534(14), 1479(13),

	1443(77), 1300(31), 1057(2), 1013(30), 768(0.3), 678(52), 521(4), 353(14), 268(4), 159(0.1), 114(1), 35(1),	1430(8), 1267(24), 1048(3), 963(0.2), 740(19), 670(4), 510(18), 348(1), 256(6), 143(2), 93(0.3), 23(2),	1419(1), 1191(16), 1047(0.4), 899(28), 738(138), 630(94), 498(75), 336(37), 240(7), 140(1), 87(0.4), 17(0.01),	1397(2267), 1188(138), 1046(7), 889(37), 709(100), 608(3), 461(10), 302(3), 208(36), 135(0.2), 60(7),	1376(58), 1183(97), 1036(4), 839(2), 696(12), 573(25), 382(3), 289(3), 188(2), 128(0.3), 55(5),	1341(112), 1123(52), 1025(54), 772(11), 687(0.2), 570(15), 369(14), 271(2), 185(15), 118(5), 46(4),
Turn $C_{\alpha 1} \bullet \alpha 2 \bullet$	3584(34), 3232(2), 3163(10), 3073(12), 1621(415), 1550(24), 1531(17), 1454(51), 1315(42), 1206(4), 1076(2), 953(1), 745(4), 619(64), 450(5), 324(11), 228(8), 145(2), 82(1),	3571(108), 3231(2), 3161(12), 3072(9), 1618(104), 1550(4), 1527(16), 1439(17), 1304(42), 1185(11), 1059(3), 910(7), 722(35), 608(24), 410(7), 303(12), 218(1), 138(1), 74(1),	3550(144), 3219(10), 3140(8), 1783(423), 1611(190), 1549(15), 1497(3), 1427(9), 1295(15), 1172(3), 1050(1), 891(11), 711(182), 582(10), 367(3), 279(3), 202(0.2), 132(1), 54(0.3),	3402(246), 3213(11), 3118(11), 1773(39), 1581(242), 1548(6), 1466(11), 1404(39), 1249(63), 1097(15), 1029(14), 882(5), 685(4), 527(10), 358(18), 264(6), 186(6), 129(6), 53(1),	3242(4), 3199(9), 3111(13), 1725(229), 1576(18), 1545(5), 1463(1), 1354(19), 1221(2), 1090(13), 1004(9), 800(3), 658(107), 520(91), 340(17), 245(8), 183(1), 104(16), 44(1),	3233(9), 3198(12), 3106(22), 1706(159), 1557(7), 1537(53), 1462(35), 1328(52), 1212(14), 1085(4), 958(2), 778(11), 644(44), 486(9), 334(16), 236(2), 166(2), 97(15), 31(4),
Turn $C_{\alpha 1} \bullet \alpha 3 \bullet$	3576(80), 3230(3), 3166(8), 3075(7), 1646(144), 1553(14), 1530(6), 1462(25), 1325(86), 1202(27), 1063(3),	3555(155), 3226(5), 3159(13), 3072(12), 1610(396), 1551(6), 1527(9), 1448(39), 1317(26), 1179(5), 1062(4),	3444(171), 3221(8), 3131(1), 1813(636), 1591(201), 1549(2), 1486(13), 1418(14), 1263(23), 1177(13), 1054(0.2),	3404(164), 3217(11), 3121(9), 1767(282), 1582(134), 1549(12), 1468(35), 1382(16), 1254(16), 1103(2), 1029(8),	3239(3), 3206(1), 3116(10), 1751(93), 1573(6), 1546(2), 1466(11), 1379(18), 1214(41), 1099(14), 1003(3),	3235(4), 3192(24), 3110(32), 1718(129), 1555(24), 1534(41), 1465(12), 1326(57), 1204(9), 1087(12), 984(1),

	944(1), 768(42), 629(45), 463(5), 326(3), 222(6), 141(1), 80(9),	924(1), 759(31), 617(16), 443(14), 309(33), 208(3), 134(4), 73(3),	911(15), 731(113), 606(10), 368(1), 295(5), 196(2), 133(6), 55(),	864(4), 695(4), 539(152), 348(16), 270(10), 191(9), 123(10), 45(1),	823(54), 687(128), 493(9), 337(6), 249(1), 177(3), 107(4), 40(1),	779(50), 636(18), 482(10), 331(13), 245(3), 150(2), 91(5), 25(8),
Turn $C_{\alpha_2 \alpha_3}^{\bullet \bullet}$	3596(37), 3243(1), 3156(14), 3074(9), 1673(179), 1554(1), 1534(12), 1453(30), 1323(265), 1182(6), 1071(18), 949(1), 733(9), 631(3), 465(13), 326(4), 217(9), 121(3), 67(4),	3523(222), 3241(3), 3155(4), 3074(22), 1662(331), 1551(10), 1529(47), 1451(15), 1311(65), 1173(2), 1057(5), 910(23), 720(36), 622(49), 409(8), 312(3), 181(1), 109(3), 57(0.1),	3470(374), 3229(15), 3148(14), 1790(238), 1655(417), 1549(11), 1498(11), 1450(9), 1302(40), 1142(2), 1057(3), 895(5), 716(3), 574(53), 392(1), 298(4), 166(4), 106(1), 46(1),	3368(506), 3204(12), 3117(12), 1773(275), 1589(282), 1546(20), 1470(49), 1416(17), 1264(51), 1103(4), 1021(21), 873(5), 702(14), 562(14), 370(13), 259(5), 157(9), 90(1), 44(5),	3245(0.4), 3201(6), 3117(3), 1750(326), 1571(3), 1543(6), 1464(14), 1360(19), 1262(11), 1088(13), 1007(7), 860(95), 678(64), 540(5), 353(5), 253(1), 146(2), 75(1), 24(0.4),	3244(0.2), 3192(22), 3107(57), 1690(63), 1568(4), 1538(16), 1459(7), 1354(96), 1218(0.4), 1083(19), 968(5), 762(13), 668(71), 509(21), 350(17), 229(4), 136(1), 69(5), 17(2),
Turn $C_{\alpha_1 \alpha_2 \alpha_3}^{\bullet \bullet \bullet}$	3548(187), 3234(1), 3161(8), 3070(13), 1602(567), 1548(3), 1526(21), 1453(39), 1308(62), 1097(9), 1034(15), 864(5), 691(92), 518(148), 347(17),	3534(55), 3232(3), 3155(15), 1848(764), 1587(132), 1546(8), 1485(10), 1428(21), 1259(14), 1087(13), 1011(4), 829(64), 680(23), 499(37), 338(7),	3477(151), 3230(3), 3115(5), 1776(217), 1579(139), 1545(0.2), 1467(56), 1377(41), 1209(41), 1082(4), 985(3), 780(65), 630(23), 477(12), 325(5),	3367(237), 3205(0.4), 3108(36), 1749(361), 1574(23), 1534(41), 1464(4), 1337(46), 1206(33), 1060(3), 953(1), 763(96), 609(2), 466(3), 316(16),	3239(3), 3190(24), 3076(8), 1709(152), 1555(29), 1530(5), 1462(9), 1322(95), 1198(35), 1054(1), 911(10), 752(99), 606(18), 400(4), 306(22),	3237(3), 3167(8), 3073(12), 1650(144), 1553(7), 1527(18), 1461(33), 1318(23), 1177(12), 1046(2), 900(5), 732(11), 581(19), 372(3), 296(11),

	260(9), 170(4), 109(9), 46(1),	250(2), 147(0.3), 96(13), 43(2),	229(6), 136(2), 90(6), 31(6),	205(3), 132(1), 74(2),	202(5), 127(4), 66(5),	191(11), 122(5), 54(1),
Turn R*****	3520(188), 3274(3), 3162(6), 1774(382), 1579(120), 1526(15), 1447(13), 1318(34), 1072(3), 990(3), 783(106), 680(33), 500(14), 352(20), 301(2), 194(15), 122(1), 48(1),	3514(67), 3253(2), 3161(14), 1757(401), 1549(4), 1513(16), 1423(42), 1276(14), 1063(3), 957(3), 780(159), 630(21), 485(16), 336(10), 271(0.4), 194(5), 107(26), 45(3),	3484(158), 3233(2), 3077(8), 1708(125), 1546(9), 1505(5), 1382(43), 1210(16), 1054(1), 910(1), 749(39), 618(2), 480(27), 328(1), 261(16), 148(1), 94(7), 40(5),	3410(1), 3231(3), 3071(15), 1635(306), 1543(4), 1467(31), 1340(53), 1204(51), 1052(5), 893(7), 747(69), 581(76), 469(1), 322(6), 252(1), 145(4), 77(3), 40(5),	3383(0.1), 3224(5), 3071(7), 1598(621), 1531(4), 1465(10), 1328(29), 1201(37), 1035(7), 851(27), 733(18), 576(88), 402(3), 317(17), 227(4), 133(0.3), 65(5),	3372(239), 3167(7), 1814(656), 1586(163), 1528(17), 1462(12), 1323(86), 1129(27), 1022(8), 833(37), 704(30), 524(101), 375(3), 312(18), 205(1), 129(1), 52(1),

Table S3 Vibrational Mode Assignments and Frequency Shifts for the Strand and Strand C α Hydrogen Abstraction Products

<u>Mode</u>	<u>ID</u>	<u>v</u>	<u>ID</u>	<u>v</u>	<u>Δv</u>	<u>ID</u>	<u>v</u>	<u>Δv</u>	<u>ID</u>	<u>v</u>	<u>Δv</u>
C1=O	Strand	1785	Cα1	1817	32	Cα2	1776	-9	Cα3	1782	-3
C2=O	Strand	1759	Cα1	1687	-72	Cα2	1791	32	Cα3	1764	5
C3=O	Strand	1771	Cα1	1764	-7	Cα2	1692	-79	Cα3	1789	18
C4=O	Strand	1792	Cα1	1791	-1	Cα2	1786	-6	Cα3	1715	-77
N1-H	Strand	3619	Cα1	3522	-97	Cα2	3624	5	Cα3	3621	2
N1-H	Strand	1585	Cα1	1644	59	Cα2	1587	2	Cα3	1589	4
N1-H	Strand	1292	Cα1	1288	-4	Cα2	1294	2	Cα3	1292	0
N2-H	Strand	3598	Cα1	3606	8	Cα2	3499	-99	Cα3	3604	6
N2-H	Strand	1598	Cα1	1644	46	Cα2	1641	43	Cα3	1601	3
N2-H	Strand	1264	Cα1	1251	-13	Cα2	1240	-24	Cα3	1270	6
N3-H	Strand	3594	Cα1	3601	7	Cα2	3610	16	Cα3	3493	-101
N3-H	Strand	1585	Cα1	1593	8	Cα2	1641	56	Cα3	1649	64
N3-H	Strand	1258	Cα1	1259	1	Cα2	1259	1	Cα3	1221	-37
N4-H	Strand	3659	Cα1	3660	1	Cα2	3661	2	Cα3	3679	20
N4-H	Strand	1620	Cα1	1620	0	Cα2	1618	-2	Cα3	1649	29
N4-H	Strand	1279	Cα2	1276	-3	Cα2	1270	-9	Cα3	1248	-31

Table S4 Vibrational Mode Assignments and Frequency Shifts for the Turn and Turn C α Hydrogen Abstraction Products

<u>mode</u>	<u>ID</u>	<u>v</u>	<u>ID</u>	<u>v</u>	<u>Δv</u>	<u>ID</u>	<u>v</u>	<u>Δv</u>	<u>ID</u>	<u>v</u>	<u>Δv</u>
C1=O	Turn	1756	Ca1	1788	32	Ca2	1752	-4	Ca3	1763	7
C2=O	Turn	1767	Ca1	1696	-71	Ca2	1767	0	Ca3	1749	-18
C3=O	Turn	1746	Ca1	1752	6	Ca2	1711	-35	Ca3	1778	32
C4=O	Turn	1784	Ca1	1793	9	Ca2	1775	-9	Ca3	1788	4
N1-H	Turn	3636	Ca1	3595	-41	Ca2	3579	-57	Ca3	3629	-7
N1-H	Turn	1580	Ca1	1589	9	Ca2	1582	2	Ca3	1573	-7
N1-H	Turn	1314	Ca1	1302	-12	Ca2	1317	3	Ca3	1296	-18
N2-H	Turn	3545	Ca1	3480	-65	Ca2	3434	-111	Ca3	3498	-47
N2-H	Turn	1614	Ca1	1663	49	Ca2	1599	-15	Ca3	1622	8
N2-H	Turn	1293	Ca1	1319	26	Ca2	1254	-39	Ca3	1321	28
N3-H	Turn	3490	Ca1	3463	-27	Ca2	3516	26	Ca3	3430	-60
N3-H	Turn	1605	Ca1	1618	13	Ca2	1624	19	Ca3	1635	30
N3-H	Turn	1340	Ca1	1349	9	Ca2	1272	-68	Ca3	1338	-2
N4-H	Turn	3558	Ca1	3550	-8	Ca2	3594	36	Ca3	3518	-40
N4-H	Turn	1627	Ca1	1624	-3	Ca2	1620	-7	Ca3	1647	20
N4-H	Turn	1298	Ca1	1295	-3	Ca2	1295	-3	Ca3	1254	-44

Table S5 Vibrational Mode Assignments and Frequency Shifts for the Strand and Polyradical Strand C α Hydrogen Abstraction Products

Mode	ID	y	ID	y	Δy	ID	y	Δy	ID	y	Δy	ID	y	Δy	ID	y	Δy
C1=O	Strand	1785	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1824	39	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1819	34	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1781	-4	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1828	43	R.....	1999	214
C2=O	Strand	1759	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1758	-1	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1687	-72	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1805	46	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1759	0	R.....	1768	9
C3=O	Strand	1771	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1683	-88	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1784	13	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1749	-22	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1769	-2	R.....	1761	-10
C4=O	Strand	1792	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1789	-3	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1715	-77	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1708	-84	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1710	-82	R.....	1778	-14
N1-H	Strand	3619	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	3518	-101	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	3524	-95	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	3628	9	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	3520	-99	R.....	3534	-85
N1-H	Strand	1585	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1630	45	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1646	61	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1575	-10	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1651	66	R.....	1609	24
N1-H	Strand	1292	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1283	-9	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1288	-4	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1293	1	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1280	-12	R.....	1300	8
N2-H	Strand	3598	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	3524	-74	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	3615	17	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	3498	-100	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	3535	-63	R.....	3542	-56
N2-H	Strand	1598	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1667	69	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1571	-27	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1634	36	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1668	70	R.....	1662	64
N2-H	Strand	1264	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1202	-62	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1244	-20	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1220	-44	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1334	70	R.....	1191	-73
N3-H	Strand	3594	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	3634	40	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	3498	-96	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	3520	-74	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	3530	-64	R.....	3539	-55
N3-H	Strand	1585	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1573	-12	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1650	65	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1670	85	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1618	33	R.....	1644	59
N3-H	Strand	1258	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1254	-4	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1222	-36	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1341	83	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1334	76	R.....	1183	-75
N4-H	Strand	3659	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	3661	2	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	3678	19	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	3676	17	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	3673	14	R.....	3677	18
N4-H	Strand	1620	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1619	-1	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1598	-22	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1589	-31	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1580	-40	R.....	1567	-53
N4-H	Strand	1279	$C_{\alpha 1 \alpha 2}$	1262	-17	$C_{\alpha 1 \alpha 3}$	1203	-76	$C_{\alpha 2 \alpha 3}$	1234	-45	$C_{\alpha 1 \alpha 2 \alpha 3}$	1234	-45	R.....	1187	-92

Table S6 Vibrational Mode Assignments and Frequency Shifts for the Turn and Polyradical Turn C α Hydrogen Abstraction Products

mode	ID	y	ID	y	Δy	ID	y	Δy	ID	y	Δy	ID	y	Δy	ID	y	Δy
C1=O	Turn	1756	$C_{a1\ a2}$	1783	27	$C_{a1\ a3}$	1790	34	$C_{a2\ a3}$	1750	-6	$C_{a1\ a2\ a3}$	1776	20	R.....	1757	1
C2=O	Turn	1767	$C_{a1\ a2}$	1725	-42	$C_{a1\ a3}$	1690	-77	$C_{a2\ a3}$	1767	0	$C_{a1\ a2\ a3}$	1749	-18	R.....	1774	7
C3=O	Turn	1746	$C_{a1\ a2}$	1706	-40	$C_{a1\ a3}$	1773	27	$C_{a2\ a3}$	1813	67	$C_{a1\ a2\ a3}$	1848	102	R.....	1814	68
C4=O	Turn	1784	$C_{a1\ a2}$	1773	-11	$C_{a1\ a3}$	1750	-34	$C_{a2\ a3}$	1718	-66	$C_{a1\ a2\ a3}$	1709	-75	R.....	1708	-76
N1-H	Turn	3636	$C_{a1\ a2}$	3584	-52	$C_{a1\ a3}$	3596	-40	$C_{a2\ a3}$	3576	-60	$C_{a1\ a2\ a3}$	3534	-102	R.....	3514	-122
N1-H	Turn	1580	$C_{a1\ a2}$	1581	1	$C_{a1\ a3}$	1589	9	$C_{a2\ a3}$	1582	2	$C_{a1\ a2\ a3}$	1587	7	R.....	1586	6
N1-H	Turn	1314	$C_{a1\ a2}$	1304	-10	$C_{a1\ a3}$	1302	-12	$C_{a2\ a3}$	1317	3	$C_{a1\ a2\ a3}$	1308	-6	R.....	1340	26
N2-H	Turn	3545	$C_{a1\ a2}$	3402	-143	$C_{a1\ a3}$	3470	-75	$C_{a2\ a3}$	3404	-141	$C_{a1\ a2\ a3}$	3367	-178	R.....	3372	-173
N2-H	Turn	1614	$C_{a1\ a2}$	1621	7	$C_{a1\ a3}$	1662	48	$C_{a2\ a3}$	1591	-23	$C_{a1\ a2\ a3}$	1602	-12	R.....	1579	-35
N2-H	Turn	1293	$C_{a1\ a2}$	1212	-81	$C_{a1\ a3}$	1311	18	$C_{a2\ a3}$	1263	-30	$C_{a1\ a2\ a3}$	1206	-87	R.....	1318	25
N3-H	Turn	3490	$C_{a1\ a2}$	3550	60	$C_{a1\ a3}$	3368	-122	$C_{a2\ a3}$	3444	-46	$C_{a1\ a2\ a3}$	3477	-13	R.....	3484	-6
N3-H	Turn	1605	$C_{a1\ a2}$	1611	6	$C_{a1\ a3}$	1655	50	$C_{a2\ a3}$	1610	5	$C_{a1\ a2\ a3}$	1602	-3	R.....	1598	-7
N3-H	Turn	1340	$C_{a1\ a2}$	1249	-91	$C_{a1\ a3}$	1354	14	$C_{a2\ a3}$	1325	-15	$C_{a1\ a2\ a3}$	1322	-18	R.....	1318	-22
N4-H	Turn	3558	$C_{a1\ a2}$	3571	13	$C_{a1\ a3}$	3523	-35	$C_{a2\ a3}$	3555	-3	$C_{a1\ a2\ a3}$	3548	-10	R.....	3520	-38
N4-H	Turn	1627	$C_{a1\ a2}$	1618	-9	$C_{a1\ a3}$	1662	35	$C_{a2\ a3}$	1646	19	$C_{a1\ a2\ a3}$	1650	23	R.....	1635	8
N4-H	Turn	1298	$C_{a1\ a2}$	1296	-2	$C_{a1\ a3}$	1354	56	$C_{a2\ a3}$	1254	-44	$C_{a1\ a2\ a3}$	1322	24	R.....	1323	25

Figure Captions

Figure S1. Spectra for the strand damaged at C_{α}

Figure S2. Spectra for the strand damaged at C_{β}

Figures S3. Spectra for the strand damaged at N

Figure S4. Spectra for the strand damaged at the caps

Figure S5. Spectra for the turn damaged at C_{α}

Figure S6. Spectra for the turn damaged at C_{β}

Figures S7. Spectra for the turn damaged at N

Figure S8. Spectra for the turn damaged at the caps

Figure S9. Spectra for the poly radical damage at C_{α} in the strand

Figure S10. Spectra for the poly radical damage at C_{α} in the turn

Figure S11. Frequency shifts for C_{α} damage in the strand

Figure S12. Frequency shifts for C_{α} damage in the turn

Figure S13. Frequency shifts for poly radical C_{α} damage in the strand

Figure S14. Frequency shifts for poly radical C_{α} damage in the turn

Figure S14. Spectra for the aerobic oxidation products

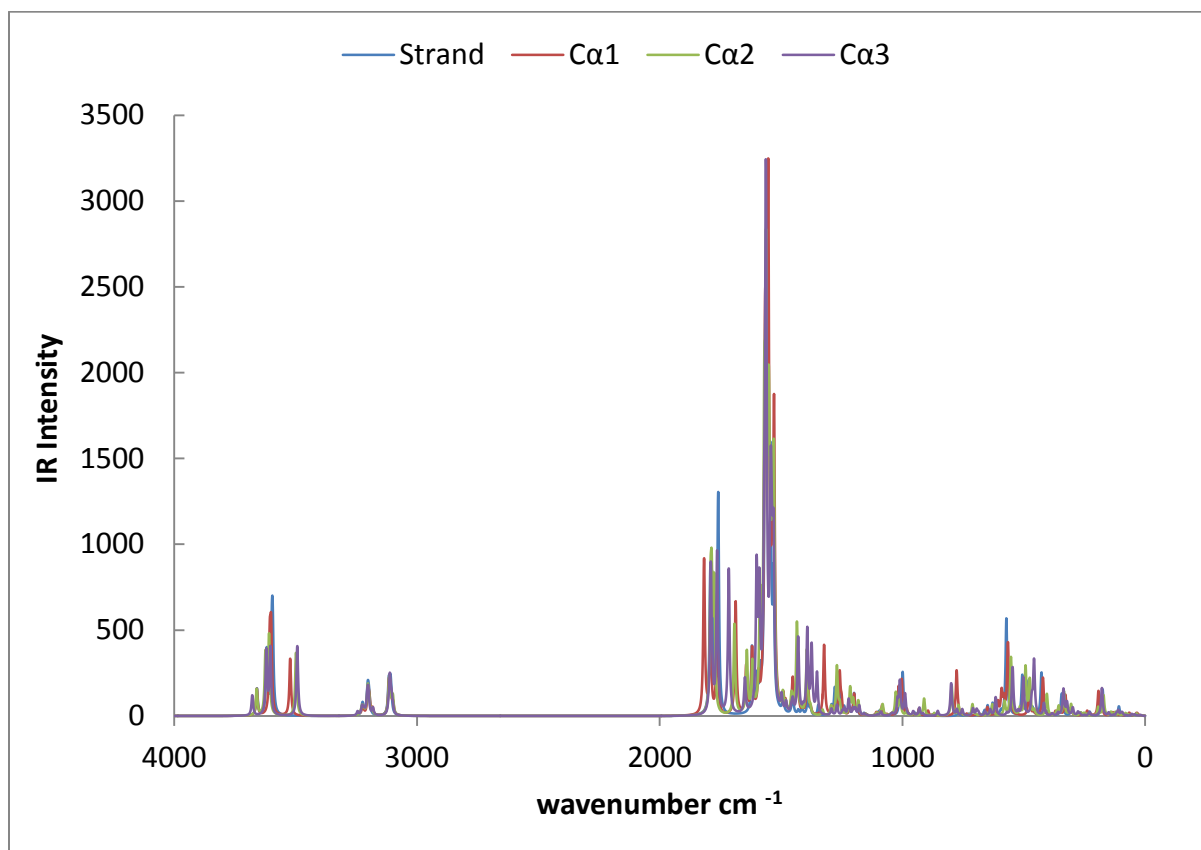


Figure S1

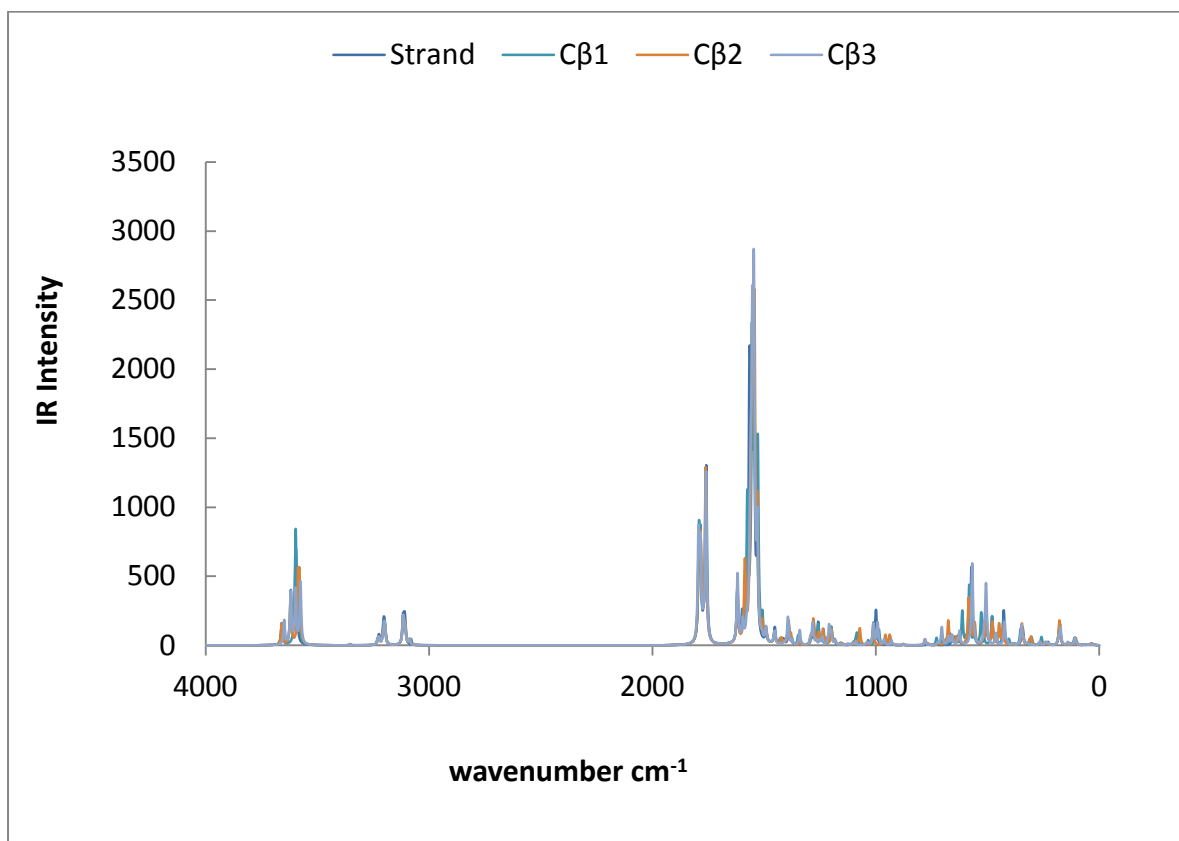


Figure S2

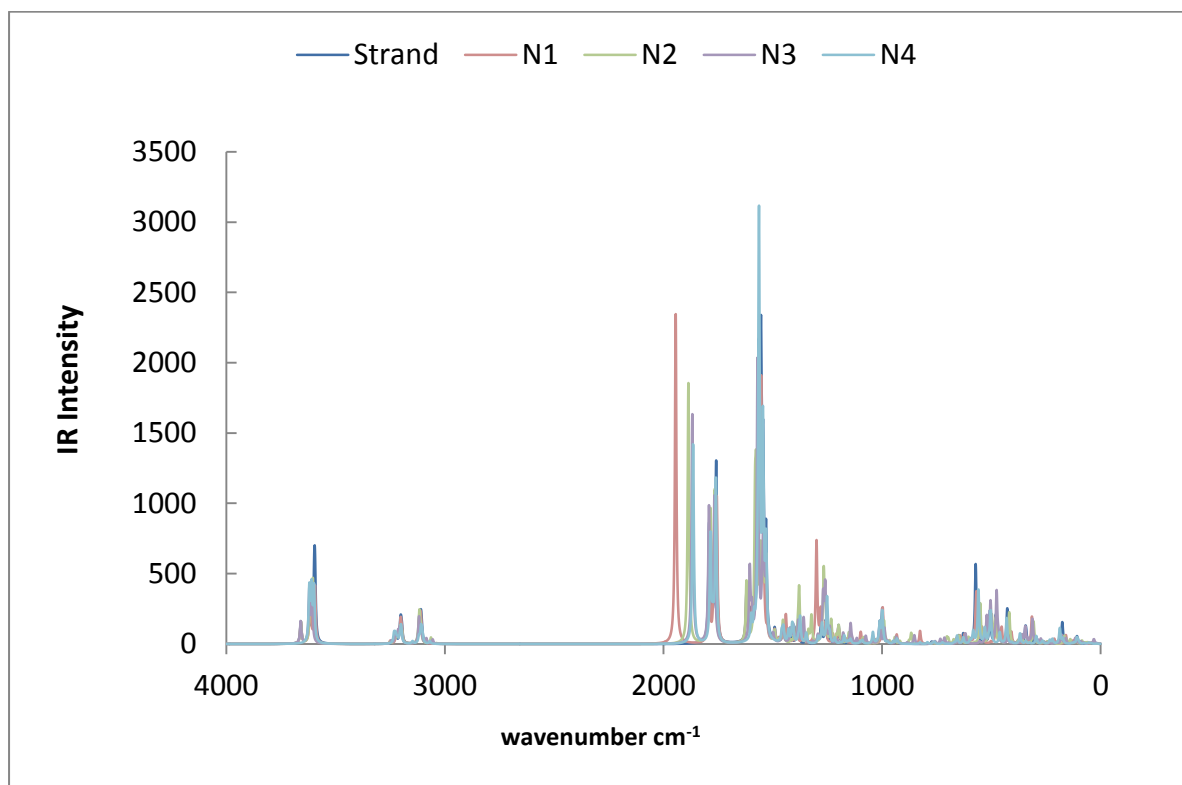


Figure S3

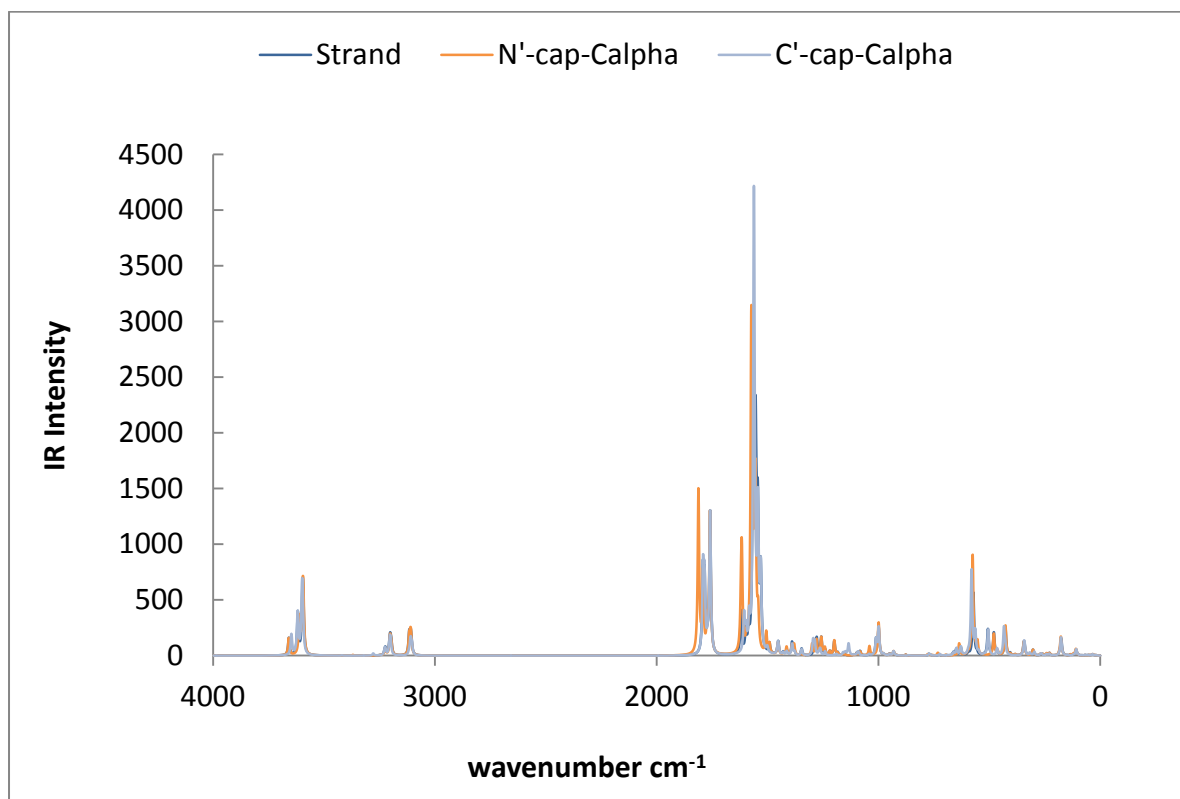


Figure S4

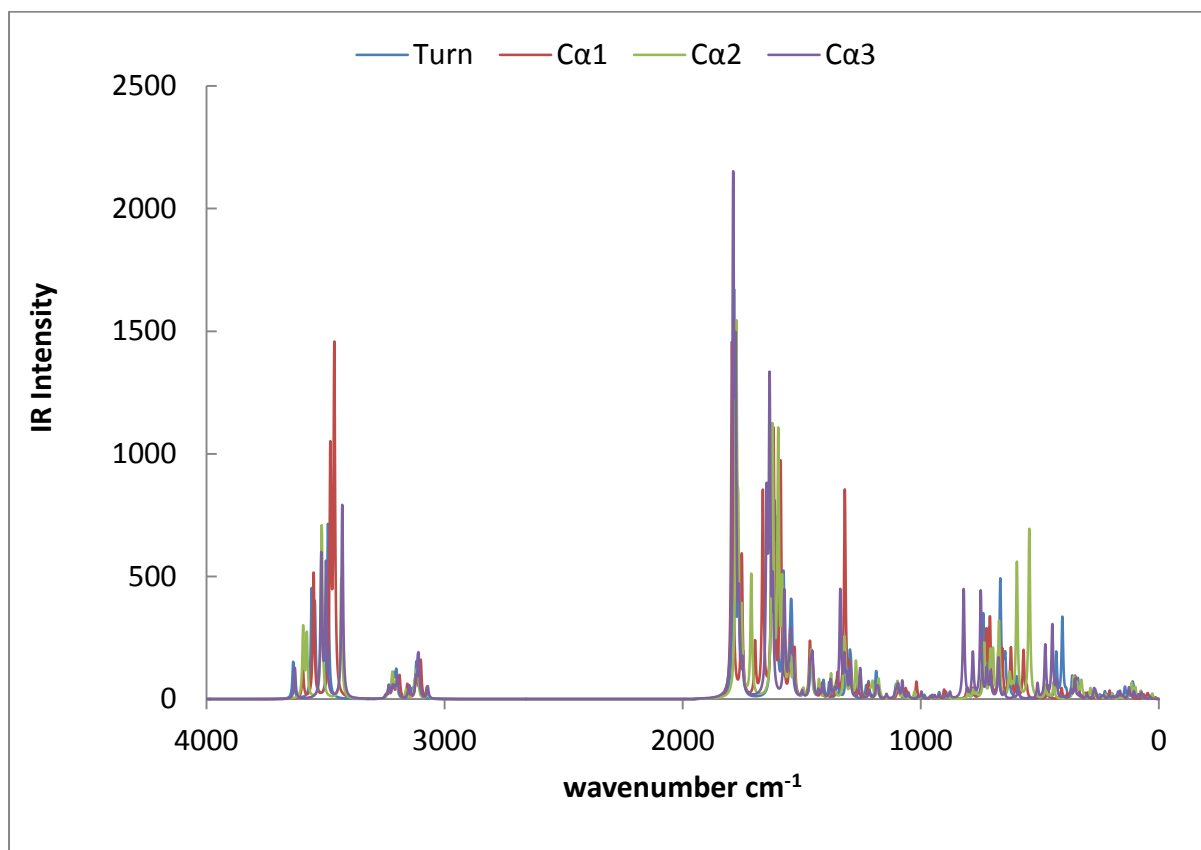


Figure S5

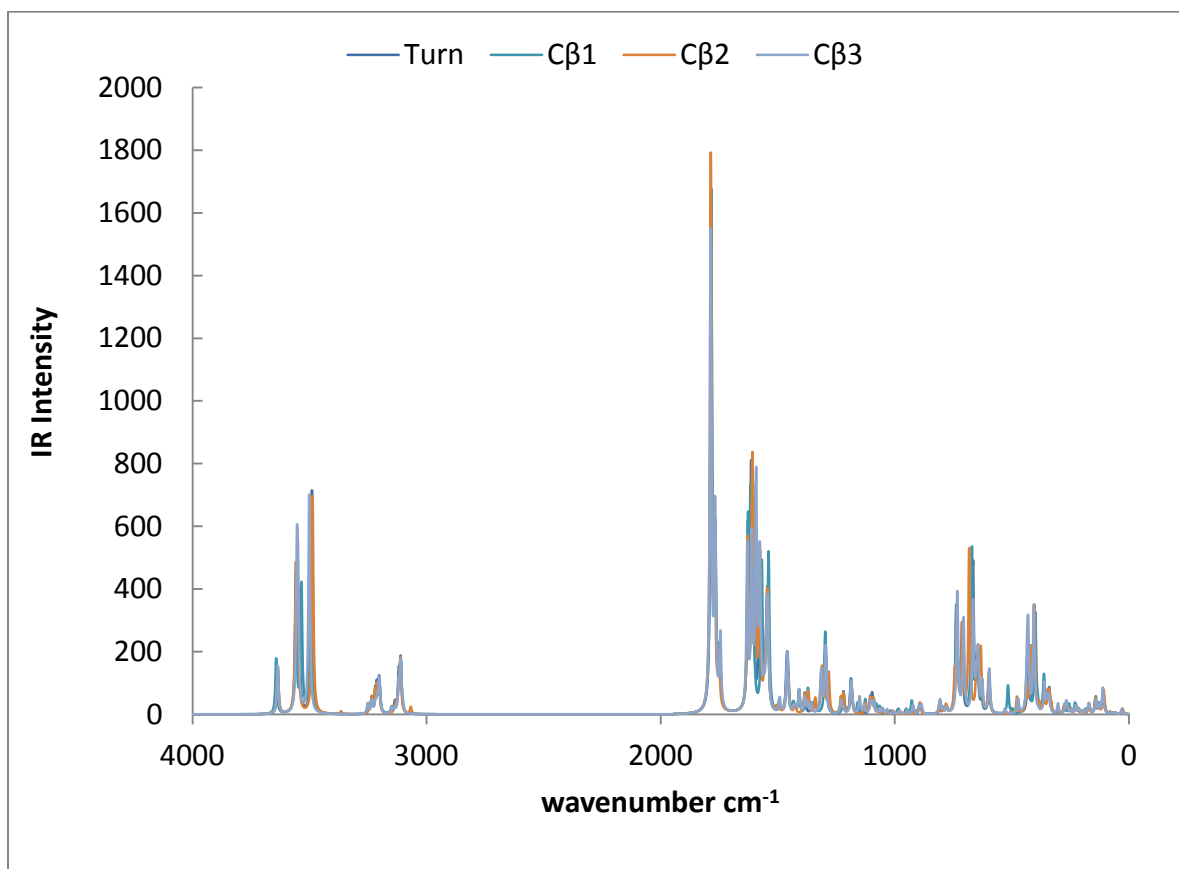


Figure S6

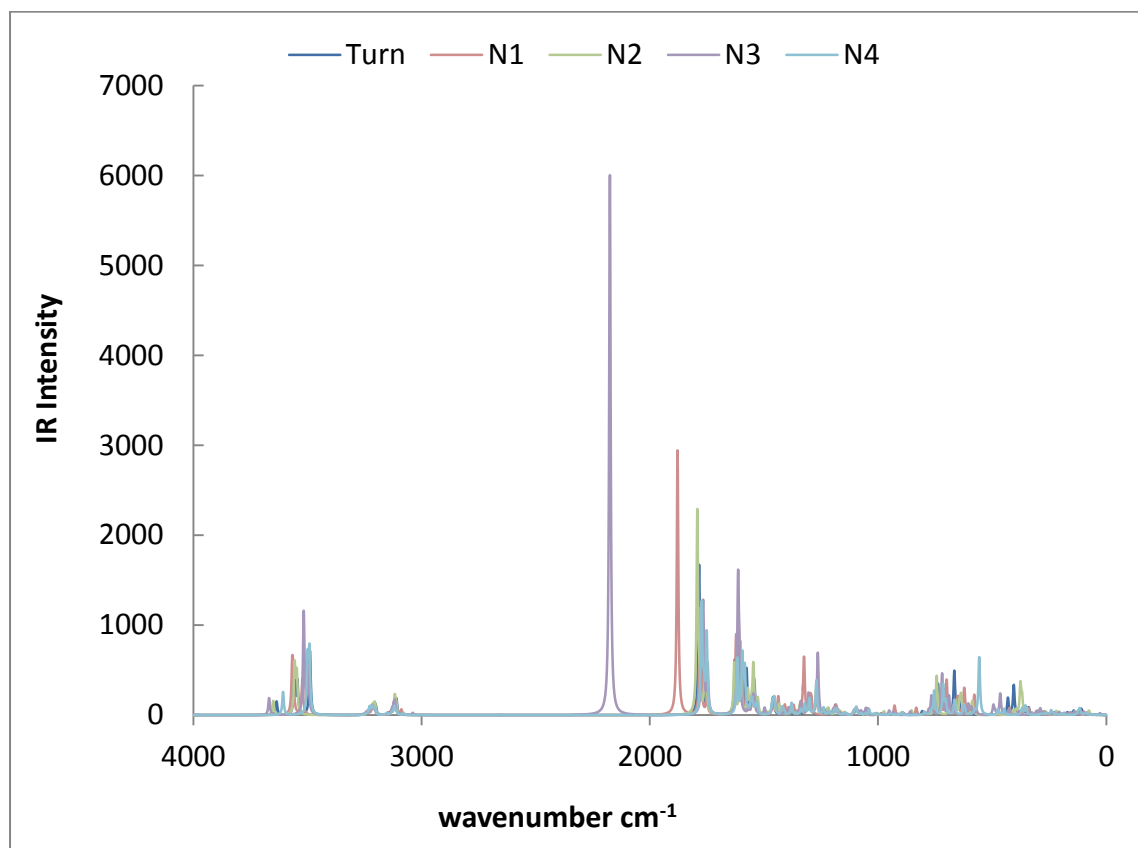


Figure S7

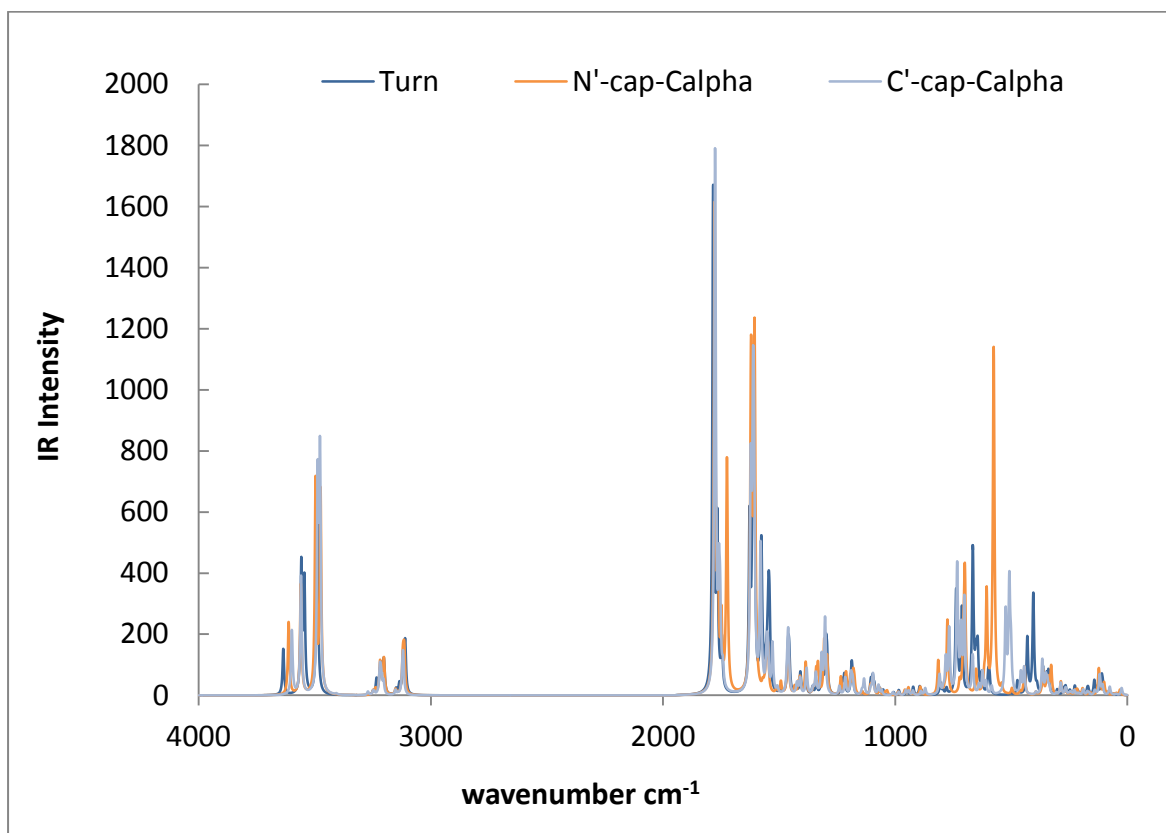


Figure S8

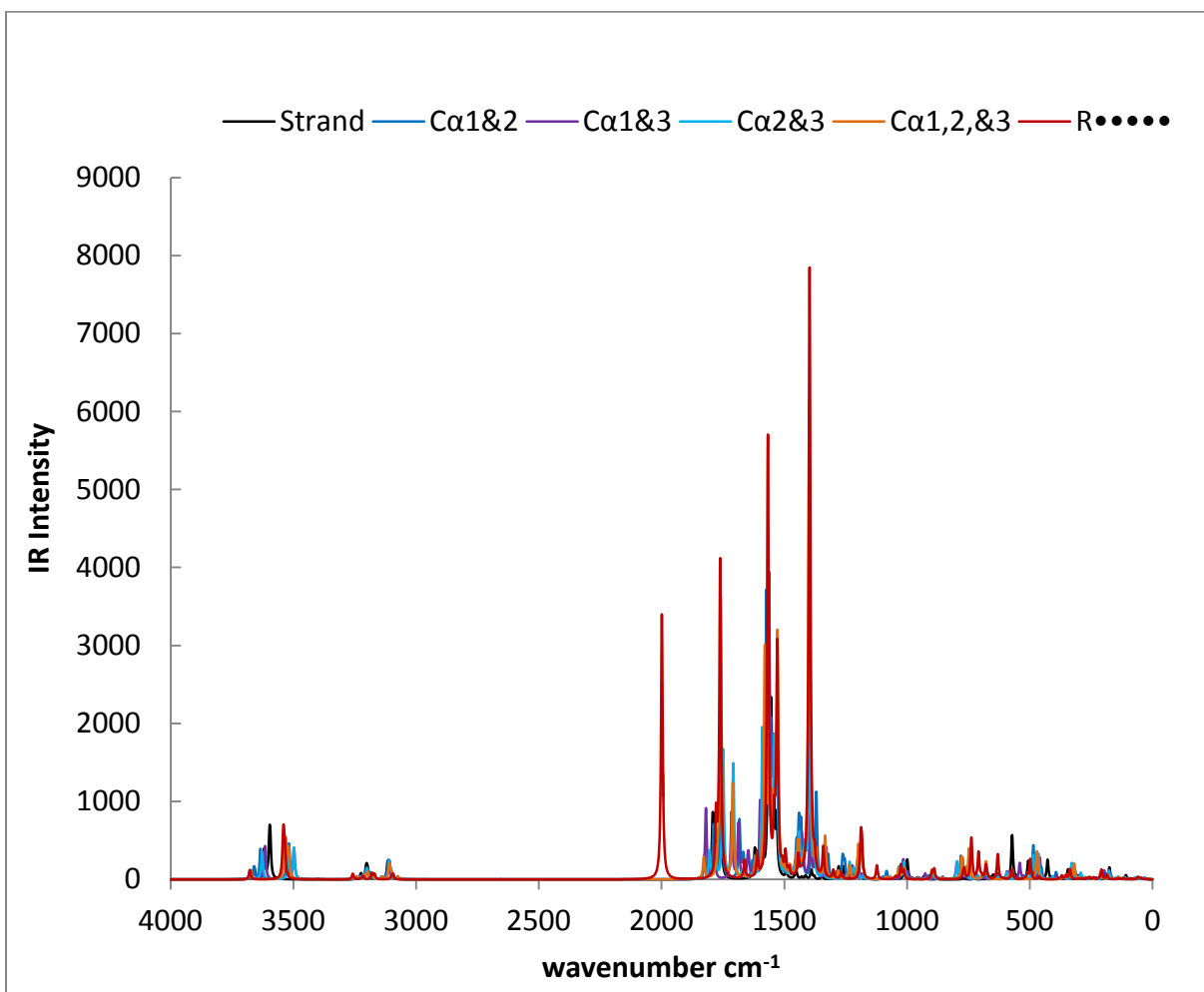


Figure S9

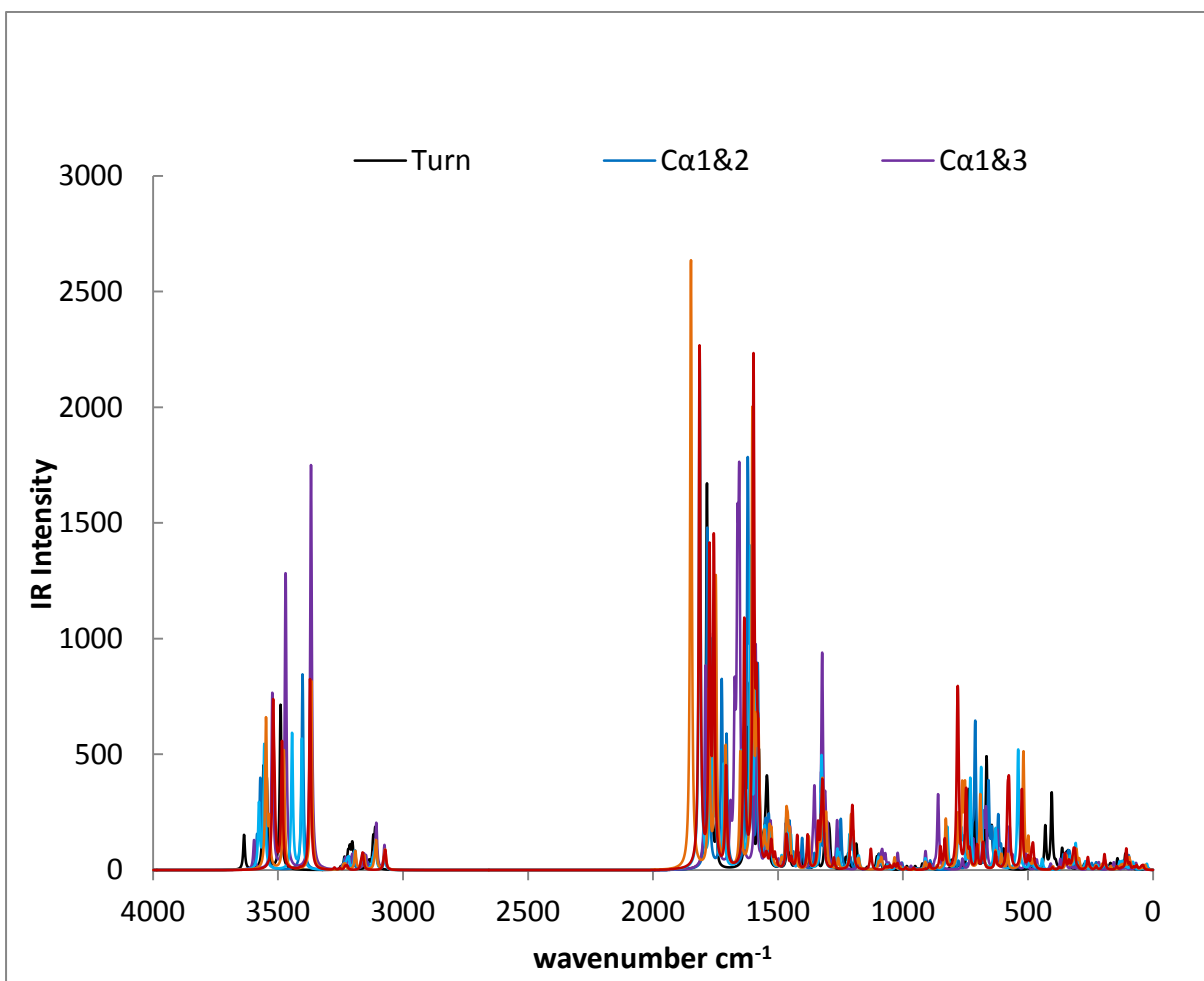


Figure S10

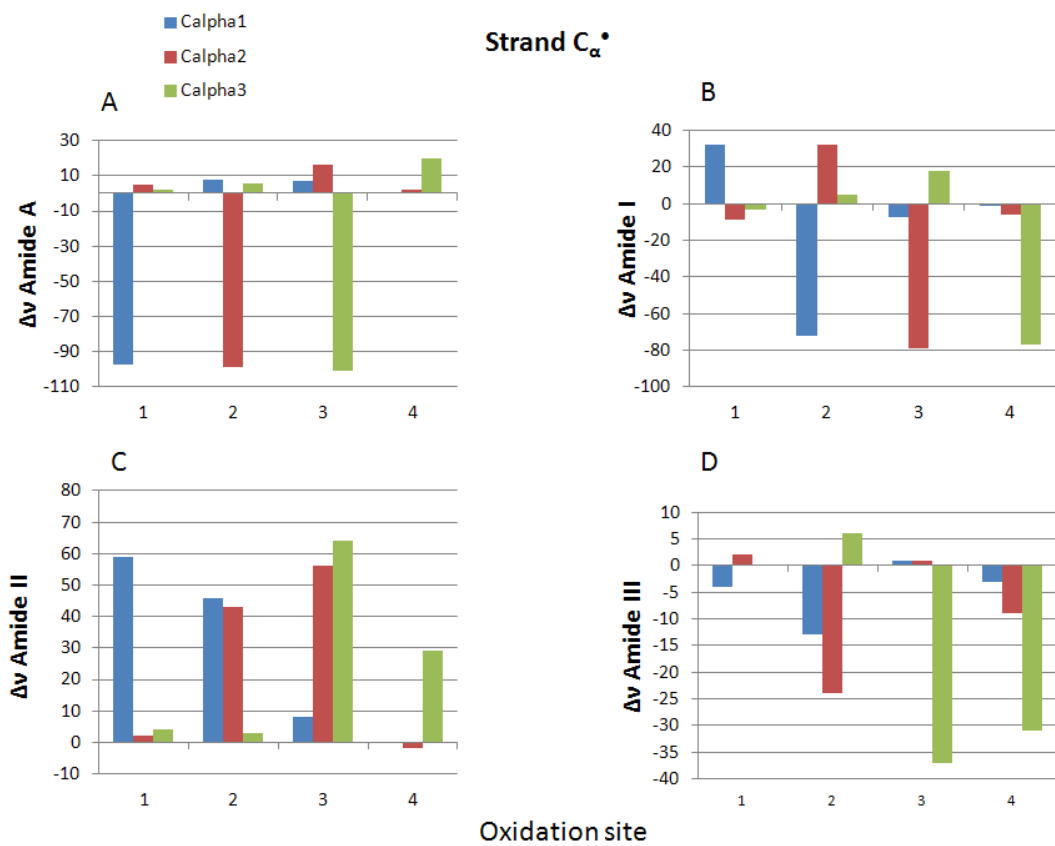


Figure S11

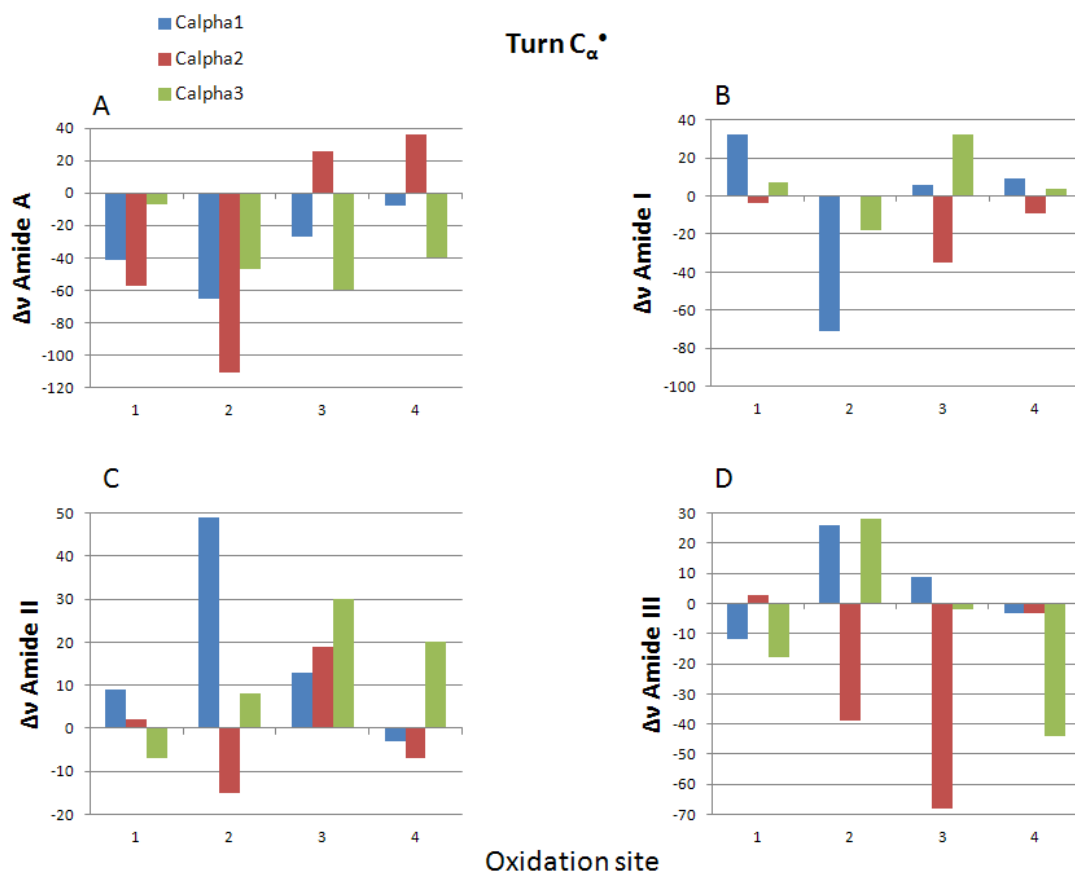


Figure S12

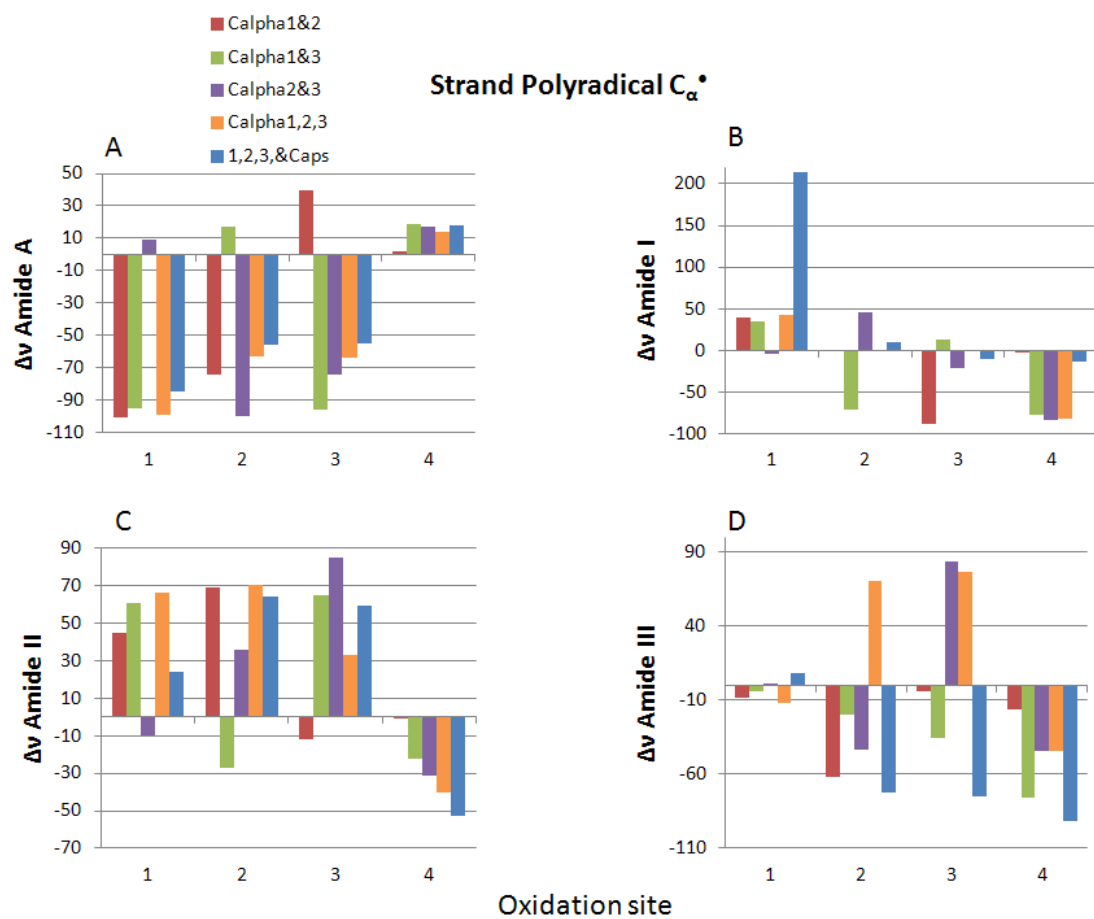


Figure S13

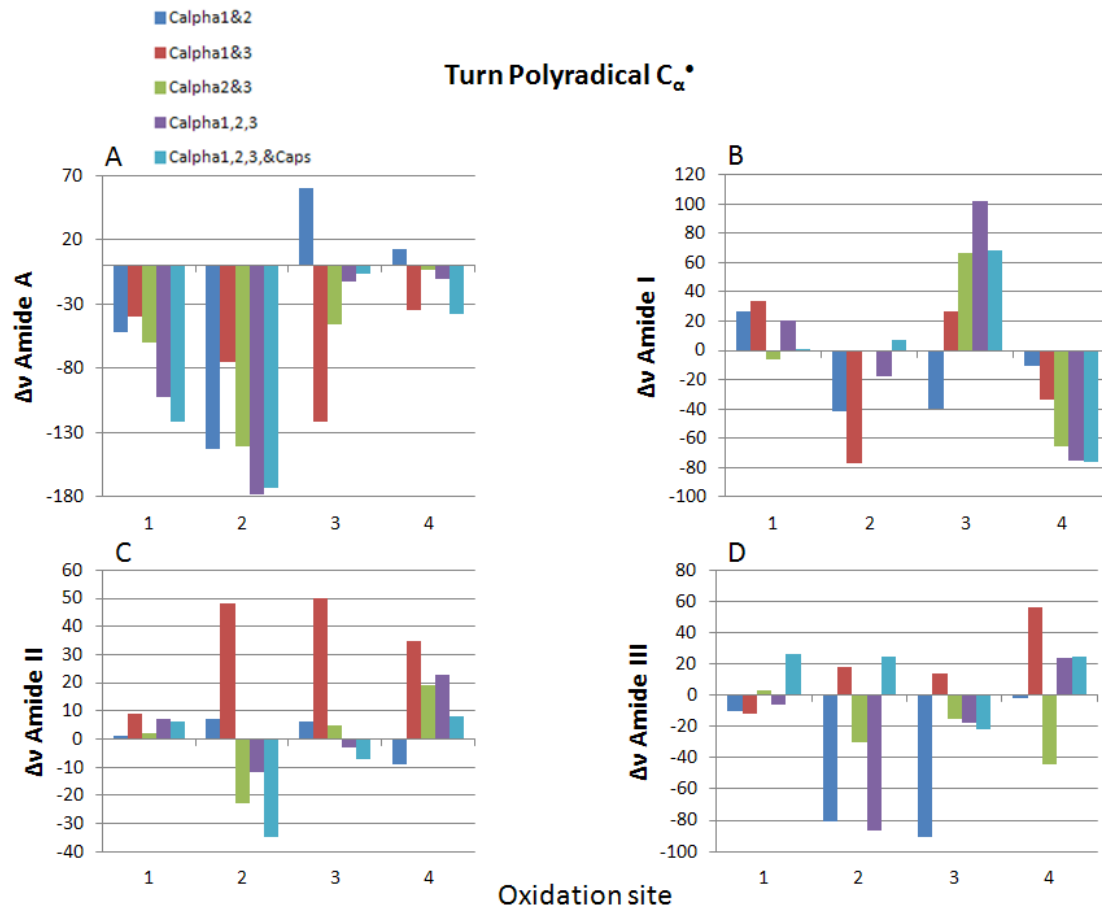


Figure S14

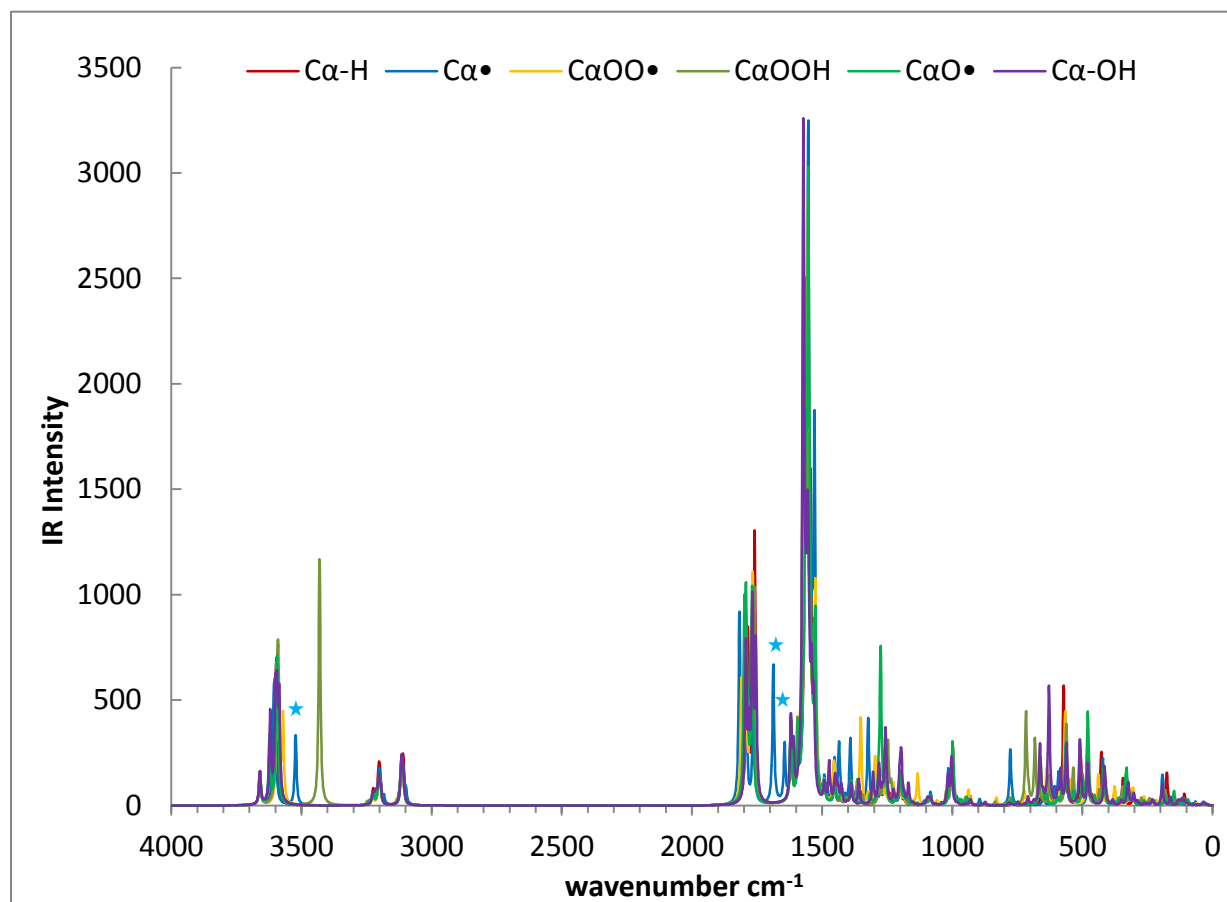


Figure S15