**Supplementary File 1**

**A**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Peptide** | **KQPA** | **NPDP** | **NVDP** | **NPNA** |
| **Motif** | **ADGN** | **DPNA** | **DPNA** | **NPNV** | **DPNA** | **DPNA** | **NPNV** | **DPNA** | **NPNV** | **NPNA** | **NPNA** | **NPNA** | **NPNA** | **NPNA** |
| **β-turn** | 0.34±0.04 | 0.38±0.03 | 0.37±0.06 | 0.17±0.04 | 0.38±0.05 | 0.43±0.04 | 0.17±0.05 | 0.44±0.07 | 0.16±0.02 | 0.30±0.03 | 0.24±0.05 | 0.42±0.04 | 0.33±0.05 | 0.19±0.03 |
| **β-turn Lifetime (ns)** | 3.53±0.30 | 3.94±0.26 | 4.22±0.44 | 2.79±0.27 | 3.97±0.26 | 4.31±0.27 | 3.20±0.32 | 5.52±0.55 | 2.27±0.16 | 3.80±0.24 | 4.72±0.38 | 4.35±0.26 | 4.26±0.25 | 2.21±0.09 |
| **Backbone-Backbone H-bonds** | 0.34±0.04 | 0.68±0.06 | 0.77±0.13 | 0.30±0.04 | 0.69±0.09 | 0.78±0.10 | 0.36±0.07 | 0.86±0.13 | 0.30±0.04 | 0.59±0.06 | 0.48±0.08 | 0.74±0.06 | 0.58±0.07 | 0.24±0.04 |
| **Pseudo****β-turn** | 0.00±0.00 | 0.07±0.02 | 0.10±0.02 | 0.04±0.01 | 0.08±0.01 | 0.10±0.02 | 0.02±0.01 | 0.10±0.02 | 0.02±0.01 | 0.09±0.03 | 0.03±0.01 | 0.09±0.04 | 0.06±0.03 | 0.06±0.01 |
| **Backbone-Sidechain H-bonds** | 0.02±0.01 | 0.15±0.03 | 0.22±0.05 | 0.15±0.03 | 0.18±0.03 | 0.21±0.04 | 0.11±0.04 | 0.19±0.04 | 0.13±0.04 | 0.27±0.07 | 0.07±0.02 | 0.22±0.07 | 0.16±0.07 | 0.21±0.04 |

**B**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **Peptide** | **NPND** | **NAND** | **PAPP** | **MIX** |
| **Motif** | **NPND** | **NPND** | **PPNA** | **PPNA** | **PPNA** | **PPNA** | **NPND** | **PPNA** |
| **β-turn** | 0.14±0.07 | 0.13±0.04 | 0.31±0.07 | 0.19±0.05 | 0.24±0.07 | 0.29±0.08 | 0.10±0.03 | 0.16±0.03 |
| **β-turn Lifetime (ns)** | 4.96±1.22 | 2.46±0.21 | 3.47±0.34 | 2.54±0.17 | 3.16±0.22 | 1.30±0.08 | 2.82±0.33 | 2.78±0.20 |
| **Backbone-BackboneH-bonds** | 0.14±0.07 | 0.13±0.04 | 0.41±0.06 | 0.28±0.06 | 0.32±0.08 | 0.40±0.08 | 0.10±0.03 | 0.25±0.03 |
| **Pseudo****β-turn** | 0.01±0.01 | 0.03±0.01 | 0.00±0.01 | 0.01±0.01 | 0.00±0.01 | 0.02±0.01 | 0.01±0.01 | 0.01±0.01 |
| **Backbone-Sidechain H-bonds** | 0.02±0.01 | 0.08±0.03 | 0.01±0.01 | 0.03±0.01 | 0.01±0.01 | 0.03±0.01 | 0.06±0.02 | 0.03±0.01 |