

Supplementary File-S1 (Residue-level N-H S² values)

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
1	0.6	0.6	0.8633
2	0.61	0.61	0.8703
3	0.65	0.65	0.8896
4	0.71	0.71	0.9077
5	0.77	0.77	0.9306
6	0.8	0.8	0.9392
7	0.8	0.8	0.9239
8	0.8	0.8	0.9068
9	0.83	0.83	0.91305
10	0.87	0.87	0.93715
11	0.92	0.92	0.9778
12	0.97	0.97	1.01215
13	1.02	1.02	1.05215
14	1.07	1.07	1.0932
15	1.1	1.1	1.12275
16	1.14	1.14	1.14735
17	1.12	1.12	1.13235
18	1.12	1.12	1.1223
19	1.09	1.09	1.0927
20	1.06	1.06	1.0687
21	1.05	1.05	1.05825
22	1.04	1.04	1.0416
23	1.03	1.03	1.0311
24	1.01	1.01	1.0176
25	1.01	1.01	1.0104
26	1	1	0.9961
27	1	1	0.9972
28	1.01	1.01	1.0116
29	1.02	1.02	1.0238
30	1.05	1.05	1.0501
31	1.05	1.05	1.0503
32	1.05	1.05	1.047
33	1.05	1.05	1.0468
34	1.04	1.04	1.0365
35	1.03	1.03	1.0279
36	1	1	0.9979
37	0.97	0.97	0.9697
38	0.96	0.96	0.9643
39	0.96	0.96	0.9637
40	0.97	0.97	0.9728
41	0.96	0.96	0.9623
42	0.94	0.94	0.9355

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
43	0.88	0.88	0.8758
44	0.83	0.83	0.8322
45	0.79	0.79	0.7866
46	0.74	0.74	0.7424
47	0.72	0.72	0.7211
48	0.71	0.71	0.7141
49	0.73	0.73	0.7344
50	0.74	0.74	0.745
51	0.75	0.75	0.751
52	0.75	0.75	0.7505
53	0.78	0.78	0.7755
54	0.8	0.8	0.7973
55	0.81	0.81	0.8116
56	0.81	0.81	0.8054
57	0.79	0.79	0.794
58	0.79	0.79	0.7923
59	0.78	0.78	0.7833
60	0.78	0.78	0.7748
61	0.77	0.77	0.7659
62	0.75	0.75	0.7509
63	0.74	0.74	0.7382
64	0.74	0.74	0.7385
65	0.75	0.75	0.752
66	0.77	0.77	0.7698
67	0.75	0.75	0.7505
68	0.71	0.71	0.7125
69	0.68	0.68	0.6807
70	0.66	0.66	0.6634
71	0.68	0.68	0.678
72	0.69	0.69	0.6878
73	0.71	0.71	0.7083
74	0.72	0.72	0.7152
75	0.74	0.74	0.7435
76	0.76	0.76	0.7635
77	0.79	0.79	0.7949
78	0.81	0.81	0.809
79	0.83	0.83	0.8319
80	0.84	0.84	0.8433
81	0.84	0.84	0.8445
82	0.84	0.84	0.8412
83	0.83	0.83	0.8358
84	0.81	0.81	0.8194

Contd.. S1

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
85	0.82	0.82	0.8277
86	0.82	0.82	0.8286
87	0.82	0.82	0.8281
88	0.82	0.82	0.8339
89	0.83	0.83	0.8383
90	0.83	0.83	0.834
91	0.83	0.83	0.8231
92	0.83	0.83	0.8223
93	0.83	0.83	0.8295
94	0.84	0.84	0.8391
95	0.85	0.85	0.8425
96	0.86	0.86	0.8497
97	0.86	0.86	0.8548
98	0.85	0.85	0.8448
99	0.84	0.84	0.838
100	0.83	0.83	0.8253
101	0.81	0.81	0.8054
102	0.79	0.79	0.7822
103	0.77	0.77	0.7696
104	0.78	0.78	0.7752
105	0.79	0.79	0.7872
106	0.82	0.82	0.8132
107	0.82	0.82	0.816
108	0.82	0.82	0.8219
109	0.84	0.84	0.8419
110	0.86	0.86	0.8603
111	0.88	0.88	0.8731
112	0.88	0.88	0.877
113	0.86	0.86	0.8603
114	0.86	0.86	0.8571
115	0.83	0.83	0.8275
116	0.81	0.81	0.8044
117	0.81	0.81	0.8076
118	0.82	0.82	0.8171
119	0.85	0.85	0.8484
120	0.88	0.88	0.8824
121	0.92	0.92	0.9163
122	0.94	0.94	0.9416
123	0.95	0.95	0.9553
124	0.96	0.96	0.9556
125	0.93	0.93	0.9297
126	0.91	0.91	0.9127

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
127	0.86	0.86	0.8591
128	0.81	0.81	0.809
129	0.79	0.79	0.7867
130	0.77	0.77	0.7728
131	0.76	0.76	0.7561
132	0.75	0.75	0.7499
133	0.74	0.74	0.7405
134	0.74	0.74	0.7398
135	0.77	0.77	0.7666
136	0.79	0.79	0.7895
137	0.83	0.83	0.834
138	0.87	0.87	0.868
139	0.88	0.88	0.8817
140	0.88	0.88	0.8795
141	0.88	0.88	0.877
142	0.88	0.88	0.8816
143	0.86	0.86	0.86
144	0.85	0.85	0.8473
145	0.86	0.86	0.8588
146	0.87	0.87	0.8715
147	0.89	0.89	0.8907
148	0.9	0.9	0.8975
149	0.91	0.91	0.9128
150	0.91	0.91	0.9138
151	0.9	0.9	0.9035
152	0.9	0.9	0.8986
153	0.9	0.9	0.8957
154	0.87	0.87	0.8698
155	0.85	0.85	0.8541
156	0.82	0.82	0.8202
157	0.8	0.8	0.7992
158	0.78	0.78	0.7792
159	0.78	0.78	0.7792
160	0.8	0.8	0.804
161	0.82	0.82	0.8253
162	0.85	0.85	0.8486
163	0.86	0.86	0.8613
164	0.85	0.85	0.8536
165	0.84	0.84	0.8413
166	0.84	0.84	0.8369
167	0.85	0.85	0.8527
168	0.86	0.86	0.8588

Contd.. S1

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
169	0.87	0.87	0.8679
170	0.86	0.86	0.86
171	0.85	0.85	0.8497
172	0.82	0.82	0.8242
173	0.79	0.79	0.786
174	0.75	0.75	0.7538
175	0.76	0.76	0.7587
176	0.78	0.78	0.7839
177	0.8	0.8	0.8031
178	0.83	0.83	0.8344
179	0.86	0.86	0.862
180	0.88	0.88	0.8749
181	0.9	0.9	0.8948
182	0.93	0.93	0.9269
183	0.94	0.94	0.9366
184	0.93	0.93	0.9251
185	0.9	0.9	0.9005
186	0.86	0.86	0.8559
187	0.82	0.82	0.8194
188	0.8	0.8	0.795
189	0.79	0.79	0.785
190	0.77	0.77	0.7702
191	0.77	0.77	0.7706
192	0.78	0.78	0.7786
193	0.79	0.79	0.7917
194	0.8	0.8	0.8014
195	0.81	0.81	0.8123
196	0.82	0.82	0.8165
197	0.82	0.82	0.8207
198	0.82	0.82	0.8169
199	0.8	0.8	0.7961
200	0.77	0.77	0.7739
201	0.76	0.76	0.7643
202	0.79	0.79	0.7899
203	0.81	0.81	0.8096
204	0.84	0.84	0.8374
205	0.86	0.86	0.8603
206	0.87	0.87	0.8696
207	0.86	0.86	0.8641
208	0.84	0.84	0.8377
209	0.82	0.82	0.8236
210	0.81	0.81	0.805

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
211	0.78	0.78	0.7747
212	0.75	0.75	0.7528
213	0.74	0.74	0.7387
214	0.73	0.73	0.7281
215	0.72	0.72	0.7221
216	0.74	0.74	0.7369
217	0.76	0.76	0.758
218	0.8	0.8	0.8002
219	0.84	0.84	0.84
220	0.85	0.85	0.8551
221	0.88	0.88	0.8783
222	0.9	0.9	0.8966
223	0.92	0.92	0.9187
224	0.93	0.93	0.9314
225	0.92	0.92	0.9231
226	0.91	0.91	0.9104
227	0.9	0.9	0.9007
228	0.9	0.9	0.8961
229	0.89	0.89	0.8916
230	0.89	0.89	0.8856
231	0.89	0.89	0.8898
232	0.91	0.91	0.9111
233	0.89	0.89	0.891
234	0.88	0.88	0.8781
235	0.86	0.86	0.8638
236	0.85	0.85	0.8534
237	0.84	0.84	0.8435
238	0.83	0.83	0.8273
239	0.81	0.81	0.8143
240	0.81	0.81	0.8065
241	0.78	0.78	0.7784
242	0.74	0.74	0.7416
243	0.73	0.73	0.7283
244	0.72	0.72	0.7221
245	0.72	0.72	0.7241
246	0.74	0.74	0.7379
247	0.75	0.75	0.7482
248	0.77	0.77	0.7713
249	0.8	0.8	0.7947
250	0.83	0.83	0.8286
251	0.85	0.85	0.8488
252	0.85	0.85	0.8547

Contd.. S1

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
253	0.86	0.86	0.856
254	0.85	0.85	0.8497
255	0.83	0.83	0.8286
256	0.81	0.81	0.8114
257	0.8	0.8	0.7982
258	0.8	0.8	0.8039
259	0.8	0.8	0.7962
260	0.8	0.8	0.7976
261	0.79	0.79	0.7876
262	0.78	0.78	0.7794
263	0.76	0.76	0.7574
264	0.75	0.75	0.75
265	0.75	0.75	0.7528
266	0.74	0.74	0.7449
267	0.75	0.75	0.7488
268	0.74	0.74	0.7375
269	0.72	0.72	0.7251
270	0.71	0.71	0.71
271	0.71	0.71	0.7146
272	0.72	0.72	0.7235
273	0.73	0.73	0.7287
274	0.75	0.75	0.7495
275	0.76	0.76	0.7584
276	0.76	0.76	0.7583
277	0.76	0.76	0.7644
278	0.76	0.76	0.7641
279	0.76	0.76	0.763
280	0.75	0.75	0.7535
281	0.76	0.76	0.7625
282	0.76	0.76	0.7629
283	0.76	0.76	0.7641
284	0.77	0.77	0.7686
285	0.77	0.77	0.771
286	0.79	0.79	0.7871
287	0.8	0.8	0.7993
288	0.81	0.81	0.8049
289	0.79	0.79	0.7943
290	0.77	0.77	0.768
291	0.75	0.75	0.7519
292	0.72	0.72	0.7226
293	0.7	0.7	0.7032
294	0.71	0.71	0.7142

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
295	0.73	0.73	0.7303
296	0.76	0.76	0.7597
297	0.78	0.78	0.7787
298	0.77	0.77	0.7692
299	0.78	0.78	0.7755
300	0.77	0.77	0.7691
301	0.77	0.77	0.7664
302	0.75	0.75	0.7487
303	0.75	0.75	0.7516
304	0.75	0.75	0.7479
305	0.74	0.74	0.7385
306	0.72	0.72	0.7214
307	0.7	0.7	0.7036
308	0.7	0.7	0.7016
309	0.72	0.72	0.7215
310	0.74	0.74	0.7453
311	0.77	0.77	0.7736
312	0.79	0.79	0.7864
313	0.79	0.79	0.7922
314	0.81	0.81	0.8122
315	0.82	0.82	0.8245
316	0.84	0.84	0.8455
317	0.86	0.86	0.861
318	0.86	0.86	0.86
319	0.85	0.85	0.8473
320	0.82	0.82	0.8221
321	0.81	0.81	0.811
322	0.81	0.81	0.8123
323	0.82	0.82	0.8244
324	0.84	0.84	0.8398
325	0.83	0.83	0.8307
326	0.83	0.83	0.8317
327	0.86	0.86	0.8565
328	0.88	0.88	0.8842
329	0.91	0.91	0.9048
330	0.91	0.91	0.9107
331	0.91	0.91	0.9055
332	0.89	0.89	0.8921
333	0.87	0.87	0.8703
334	0.84	0.84	0.837
335	0.81	0.81	0.8077
336	0.79	0.79	0.7935

Contd.. S1

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
337	0.81	0.81	0.8066
338	0.82	0.82	0.825
339	0.85	0.85	0.8535
340	0.88	0.88	0.8772
341	0.88	0.88	0.8839
342	0.89	0.89	0.8884
343	0.89	0.89	0.8846
344	0.87	0.87	0.869
345	0.87	0.87	0.8743
346	0.88	0.88	0.8799
347	0.87	0.87	0.8742
348	0.86	0.86	0.8573
349	0.83	0.83	0.8304
350	0.81	0.81	0.8059
351	0.79	0.79	0.7913
352	0.8	0.8	0.7955
353	0.8	0.8	0.7986
354	0.82	0.82	0.8178
355	0.84	0.84	0.8415
356	0.85	0.85	0.8526
357	0.87	0.87	0.872
358	0.9	0.9	0.9006
359	0.89	0.89	0.8903
360	0.88	0.88	0.8817
361	0.85	0.85	0.8531
362	0.82	0.82	0.8229
363	0.82	0.82	0.8209
364	0.84	0.84	0.8375
365	0.86	0.86	0.8564
366	0.86	0.86	0.8635
367	0.88	0.88	0.881
368	0.89	0.89	0.8847
369	0.88	0.88	0.8813
370	0.86	0.86	0.864
371	0.84	0.84	0.8428
372	0.82	0.82	0.8172
373	0.77	0.77	0.7723
374	0.74	0.74	0.7403
375	0.72	0.72	0.7246
376	0.72	0.72	0.7172
377	0.73	0.73	0.7349
378	0.75	0.75	0.7493

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
379	0.73	0.73	0.7278
380	0.69	0.69	0.6954
381	0.7	0.7	0.6959
382	0.7	0.7	0.705
383	0.72	0.72	0.7233
384	0.73	0.73	0.73
385	0.72	0.72	0.7209
386	0.72	0.72	0.7232
387	0.72	0.72	0.7168
388	0.7	0.7	0.7054
389	0.69	0.69	0.6913
390	0.7	0.7	0.6967
391	0.71	0.71	0.7141
392	0.72	0.72	0.7167
393	0.73	0.73	0.7329
394	0.76	0.76	0.7598
395	0.78	0.78	0.7784
396	0.8	0.8	0.7963
397	0.81	0.81	0.8095
398	0.81	0.81	0.8109
399	0.82	0.82	0.8161
400	0.82	0.82	0.8185
401	0.83	0.83	0.834
402	0.85	0.85	0.8463
403	0.85	0.85	0.8475
404	0.86	0.86	0.8594
405	0.85	0.85	0.8502
406	0.85	0.85	0.8474
407	0.84	0.84	0.8376
408	0.81	0.81	0.8149
409	0.81	0.81	0.8136
410	0.82	0.82	0.8181
411	0.83	0.83	0.8279
412	0.85	0.85	0.8508
413	0.88	0.88	0.8758
414	0.89	0.89	0.8861
415	0.9	0.9	0.8963
416	0.89	0.89	0.8847
417	0.89	0.89	0.8874
418	0.89	0.89	0.8894
419	0.89	0.89	0.8861
420	0.9	0.9	0.8995

Contd.. S1

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
421	0.9	0.9	0.9014
422	0.89	0.89	0.885
423	0.86	0.86	0.8576
424	0.83	0.83	0.8303
425	0.8	0.8	0.7998
426	0.77	0.77	0.7726
427	0.75	0.75	0.7501
428	0.74	0.74	0.7423
429	0.73	0.73	0.7291
430	0.73	0.73	0.7334
431	0.74	0.74	0.7415
432	0.77	0.77	0.7651
433	0.76	0.76	0.7586
434	0.77	0.77	0.7672
435	0.77	0.77	0.7655
436	0.77	0.77	0.7675
437	0.77	0.77	0.7674
438	0.78	0.78	0.78
439	0.79	0.79	0.7939
440	0.8	0.8	0.7951
441	0.77	0.77	0.7732
442	0.77	0.77	0.766
443	0.75	0.75	0.7508
444	0.75	0.75	0.7519
445	0.74	0.74	0.7455
446	0.76	0.76	0.7574
447	0.78	0.78	0.7779
448	0.8	0.8	0.7957
449	0.81	0.81	0.8079
450	0.81	0.81	0.8078
451	0.79	0.79	0.7919
452	0.79	0.79	0.7898
453	0.8	0.8	0.7969
454	0.81	0.81	0.8091
455	0.81	0.81	0.8086
456	0.81	0.81	0.8145
457	0.82	0.82	0.8168
458	0.81	0.81	0.8108
459	0.8	0.8	0.804
460	0.81	0.81	0.8138
461	0.83	0.83	0.828
462	0.85	0.85	0.8503

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
463	0.86	0.86	0.8654
464	0.88	0.88	0.8757
465	0.87	0.87	0.8658
466	0.84	0.84	0.8448
467	0.81	0.81	0.8084
468	0.77	0.77	0.7693
469	0.76	0.76	0.759
470	0.76	0.76	0.7581
471	0.79	0.79	0.785
472	0.81	0.81	0.8146
473	0.83	0.83	0.8287
474	0.81	0.81	0.8079
475	0.77	0.77	0.7708
476	0.76	0.76	0.7565
477	0.73	0.73	0.7349
478	0.74	0.74	0.7435
479	0.74	0.74	0.743
480	0.74	0.74	0.7436
481	0.72	0.72	0.7239
482	0.7	0.7	0.6963
483	0.67	0.67	0.6718
484	0.67	0.67	0.6691
485	0.66	0.66	0.6628
486	0.67	0.67	0.6694
487	0.69	0.69	0.6925
488	0.73	0.73	0.7342
489	0.77	0.77	0.7646
490	0.77	0.77	0.7698
491	0.77	0.77	0.7663
492	0.75	0.75	0.754
493	0.74	0.74	0.7438
494	0.74	0.74	0.7387
495	0.73	0.73	0.7329
496	0.73	0.73	0.7319
497	0.74	0.74	0.7402
498	0.77	0.77	0.7725
499	0.81	0.81	0.808
500	0.82	0.82	0.8251
501	0.83	0.83	0.8336
502	0.84	0.84	0.8367
503	0.86	0.86	0.8565
504	0.85	0.85	0.8542

Contd.. S1

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
505	0.85	0.85	0.8485
506	0.85	0.85	0.8506
507	0.85	0.85	0.8484
508	0.83	0.82	0.8282
509	0.8	0.8	0.8028
510	0.79	0.79	0.793
511	0.79	0.79	0.7918
512	0.79	0.78	0.7862
513	0.79	0.79	0.7898
514	0.81	0.81	0.8095
515	0.83	0.83	0.8321
516	0.84	0.84	0.8413
517	0.86	0.86	0.8641
518	0.88	0.88	0.8812
519	0.9	0.89	0.8974
520	0.92	0.92	0.9218
521	0.93	0.93	0.9309
522	0.94	0.94	0.9432
523	0.94	0.94	0.9376
524	0.93	0.93	0.93
525	0.91	0.91	0.9121
526	0.87	0.88	0.8741
527	0.83	0.84	0.8346
528	0.8	0.8	0.7999
529	0.77	0.77	0.7711
530	0.76	0.76	0.7586
531	0.75	0.75	0.7535
532	0.76	0.75	0.764
533	0.76	0.74	0.7643
534	0.75	0.74	0.7525
535	0.75	0.73	0.747
536	0.76	0.75	0.758
537	0.79	0.79	0.7943
538	0.82	0.81	0.8169
539	0.83	0.82	0.8262
540	0.83	0.82	0.8276
541	0.85	0.84	0.8475
542	0.85	0.85	0.8519
543	0.85	0.84	0.8501
544	0.85	0.84	0.85
545	0.84	0.83	0.8383
546	0.83	0.83	0.8345

Residues	PBP3_wild	PBP3_F533L	PBP3_T91A
547	0.81	0.81	0.8147
548	0.8	0.79	0.7958
549	0.8	0.8	0.7994
550	0.8	0.79	0.7981
551	0.81	0.8	0.8099
552	0.8	0.8	0.803
553	0.78	0.78	0.7801
554	0.77	0.76	0.7646
555	0.76	0.76	0.75835
556	0.75	0.75	0.74825
557	0.74	0.74	0.7369
558	0.73	0.73	0.7279
559	0.71	0.71	0.7062
560	0.71	0.71	0.7087
561	0.71	0.71	0.7097
562	0.72	0.72	0.7215
563	0.72	0.72	0.7275
564	0.73	0.73	0.7443
565	0.74	0.74	0.7588
566	0.74	0.74	0.7584
567	0.72	0.72	0.74815
568	0.7	0.7	0.7376
569	0.69	0.69	0.7333
570	0.67	0.67	0.7203
571	0.63	0.63	0.70145
572	0.59	0.59	0.68295
573	0.55	0.55	0.65955
574	0.51	0.51	0.6319
575	0.45	0.45	0.59725
576	0.38	0.38	0.56495
577	0.32	0.32	0.5578
578	0.28	0.28	0.5633
579	0.28	0.28	0.5906