# Contents of file on unmodified oligomer

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Sander .out file | .mdcrd | Time covered/ps |
| olig3 | mdcrd | minimisation |
| olig4 | olig1 | heating |
| oig5 | olig2 | 20 – 420 |
| olig6 | olig3 | 440 – 820 |
| olig7 | olig4 | 860 – 1620 |
| olig8 | olig5 | 1660 – 2420 |
| olig9 | olig6 | 2460 – 3220 |
| olig10 | olig7 | 3260 – 4020 |
| olig11 | olig8 | 4060 – 4820 |
| olig12 | olig9 | 4860 – 5620 |
| olig13 | olig10 | 5660 – 6420 |
| olig14 | olig11 | 6460 – 7020 |
| olig15 | olig12 | 7060 – 8020 |
| olig16 | olig13 | 8060 – 9020 |
| olig17 | olig14 | 9060 – 10020 |
| olig18 | olig15 | 10060 – 11020 |
| olig19 | olig16 | 11100 – 11340 |
| olig20 | olig17 | 11360 – 11520 |
| olig21 | olig18 | 11560 -12020 |
| olig22 | olig19 | 12060 – 12520 |
| olig23 | olig20 | 12560 - 13020 |
| olig24 | olig21 | 13060 – 13520 |
| olig25 | olig22 | 13560 - 14020 |
| olig26 | olig23 | 14060 - 14520 |
| olig27 | olig24 | 14560 - 15020 |