## **Description of Additional Supplementary Files**

File name: Supplementary Data 1

 $\textbf{Description:} \ \mathsf{GROMACS} \ \mathsf{simulation} \ \mathsf{input} \ \mathsf{files} \ \mathsf{as} \ \mathsf{well} \ \mathsf{as} \ \mathsf{the} \ \mathsf{coordinates} \ \mathsf{of} \ \mathsf{the} \ \mathsf{first} \ \mathsf{and} \ \mathsf{last}$ 

simulation snapshots.