

Supplementary Material

Oligomerization of amyloid A β_{16-22} peptides using hydrogen bonds and hydrophobicity forces.
G. Favrin, A. Irbäck and S. Mohanty.

Table I. The probability distribution $P(n_+, n_-)$ at different temperatures for the system of three A β_{16-22} peptides.

(n_+, n_-)	369 K	354 K	339 K	325 K	312 K	299 K	287 K	275 K
(0,0)	0.994(1)	0.990(1)	0.961(3)	0.849(15)	0.58(3)	0.33(2)	0.22(2)	0.17(2)
(0,1)	0.002(1)	0.006(1)	0.021(2)	0.074(8)	0.170(14)	0.23(2)	0.23(2)	0.22(3)
(0,2)			0.002(1)	0.014(3)	0.063(10)	0.12(2)	0.14(3)	0.14(3)
(1,0)	0.001(1)	0.003(1)	0.012(1)	0.039(5)	0.085(9)	0.117(15)	0.13(2)	0.13(2)
(1,1)	0.001(1)		0.002(1)	0.021(5)	0.09(2)	0.19(3)	0.26(5)	0.32(6)
(2,0)				0.002(1)	0.009(2)	0.014(4)	0.016(5)	0.020(7)

Table II. Same as Table I for the six-chain system.

(n_+, n_-)	369 K	354 K	339 K	325 K	312 K	299 K	287 K
(0,0)	0.986(1)	0.923(5)	0.65(2)	0.26(2)	0.096(9)	0.045(6)	0.028(5)
(0,1)	0.008(1)	0.035(2)	0.109(6)	0.144(8)	0.112(11)	0.080(11)	0.059(11)
(0,2)		0.006(1)	0.043(6)	0.100(12)	0.11(2)	0.09(2)	0.08(2)
(0,3)			0.009(2)	0.038(8)	0.060(14)	0.07(2)	0.06(2)
(0,4)			0.001(1)	0.006(3)	0.016(8)	0.025(12)	0.030(15)
(1,0)	0.005(1)	0.023(2)	0.069(5)	0.087(7)	0.068(7)	0.049(6)	0.038(6)
(1,1)		0.008(1)	0.063(7)	0.142(14)	0.16(2)	0.14(2)	0.12(2)
(1,2)		0.002(1)	0.028(5)	0.106(15)	0.16(2)	0.17(3)	0.16(3)
(1,3)			0.002(1)	0.016(4)	0.043(11)	0.07(2)	0.10(3)
(1,4)					0.001(1)	0.003(1)	0.006(3)
(2,0)		0.002(1)	0.011(3)	0.025(8)	0.029(10)	0.028(11)	0.026(11)
(2,1)			0.010(3)	0.04(2)	0.07(3)	0.10(4)	0.11(5)
(2,2)			0.003(1)	0.021(7)	0.06(2)	0.10(4)	0.14(5)
(2,3)					0.001(1)	0.002(1)	0.004(2)
(3,0)			0.001(1)	0.004(2)	0.007(4)	0.008(5)	0.008(5)
(3,1)				0.003(2)	0.008(5)	0.011(7)	0.013(9)
(3,2)					0.004(3)	0.009(7)	0.015(12)