

The PDB co-ordinates of the six-unique rotational isomeric states portrayed in Figure 3.

$\alpha\alpha$

ATOM	1	H1	GOL	1	-2.473	-0.733	-1.065
ATOM	2	O1	GOL	1	-2.190	-1.431	-0.470
ATOM	3	C1	GOL	1	-0.758	-1.207	-0.358
ATOM	4	H2	GOL	1	-0.361	-2.014	0.260
ATOM	5	H3	GOL	1	-0.261	-1.331	-1.323
ATOM	6	C2	GOL	1	-0.354	0.213	0.231
ATOM	7	H4	GOL	1	-0.859	0.353	1.190
ATOM	8	O2	GOL	1	-0.770	1.221	-0.717
ATOM	9	H5	GOL	1	-0.950	2.046	-0.261
ATOM	10	C3	GOL	1	1.195	0.272	0.404
ATOM	11	H6	GOL	1	1.590	0.360	-0.611
ATOM	12	H7	GOL	1	1.679	-0.638	0.763
ATOM	13	O3	GOL	1	1.789	1.422	1.080
ATOM	14	H8	GOL	1	2.726	1.464	0.874
TER							

$\alpha\beta$

ATOM	1	H1	GOL	1	-2.215	-1.404	0.356
ATOM	2	O1	GOL	1	-1.458	-1.910	0.053
ATOM	3	C1	GOL	1	-0.259	-1.144	0.377
ATOM	4	H2	GOL	1	-0.328	-0.862	1.430
ATOM	5	H3	GOL	1	0.628	-1.755	0.196
ATOM	6	C2	GOL	1	-0.130	0.135	-0.502
ATOM	7	H4	GOL	1	-1.086	0.658	-0.572
ATOM	8	O2	GOL	1	0.166	-0.270	-1.825
ATOM	9	H5	GOL	1	-0.428	0.060	-2.503
ATOM	10	C3	GOL	1	0.939	1.119	0.099
ATOM	11	H6	GOL	1	0.964	1.940	-0.619
ATOM	12	H7	GOL	1	1.947	0.702	0.150
ATOM	13	O3	GOL	1	0.393	1.600	1.331
ATOM	14	H8	GOL	1	0.862	1.135	2.029
TER							

$\alpha\gamma$

ATOM	1	H1	GOL	1	2.284	-1.600	0.130
ATOM	2	O1	GOL	1	1.887	-1.434	-0.728
ATOM	3	C1	GOL	1	1.093	-0.234	-0.686
ATOM	4	H2	GOL	1	1.765	0.528	-0.286
ATOM	5	H3	GOL	1	0.864	-0.017	-1.731
ATOM	6	C2	GOL	1	-0.209	-0.368	0.232
ATOM	7	H4	GOL	1	0.062	-0.830	1.184
ATOM	8	O2	GOL	1	-1.162	-1.171	-0.431
ATOM	9	H5	GOL	1	-0.997	-2.054	-0.093
ATOM	10	C3	GOL	1	-0.869	0.950	0.667
ATOM	11	H6	GOL	1	-0.349	1.289	1.565
ATOM	12	H7	GOL	1	-1.871	0.610	0.937
ATOM	13	O3	GOL	1	-0.814	1.965	-0.382
ATOM	14	H8	GOL	1	-1.685	2.368	-0.373
TER							

$\beta\beta$

ATOM	1	H1	GOL	1	-0.119	-2.309	-0.581
ATOM	2	O1	GOL	1	0.066	-2.085	0.334
ATOM	3	C1	GOL	1	-0.546	-0.931	0.902
ATOM	4	H2	GOL	1	-1.602	-0.863	0.635
ATOM	5	H3	GOL	1	-0.460	-0.992	1.989
ATOM	6	C2	GOL	1	0.099	0.399	0.450
ATOM	7	H4	GOL	1	1.170	0.305	0.640
ATOM	8	O2	GOL	1	-0.333	1.472	1.348
ATOM	9	H5	GOL	1	-0.104	1.104	2.205
ATOM	10	C3	GOL	1	0.029	0.811	-1.123
ATOM	11	H6	GOL	1	0.206	1.870	-1.322
ATOM	12	H7	GOL	1	-1.002	0.751	-1.479
ATOM	13	O3	GOL	1	0.854	0.061	-2.017
ATOM	14	H8	GOL	1	1.748	0.409	-1.986
TER							

 $\beta\gamma$

ATOM	1	H1	GOL	1	-2.248	1.378	0.052
ATOM	2	O1	GOL	1	-2.043	0.503	-0.286
ATOM	3	C1	GOL	1	-0.754	0.541	-1.003
ATOM	4	H2	GOL	1	-0.790	-0.253	-1.752
ATOM	5	H3	GOL	1	-0.632	1.472	-1.562
ATOM	6	C2	GOL	1	0.493	0.357	-0.000
ATOM	7	H4	GOL	1	0.581	1.299	0.545
ATOM	8	O2	GOL	1	1.688	0.197	-0.698
ATOM	9	H5	GOL	1	1.973	0.985	-1.168
ATOM	10	C3	GOL	1	0.303	-0.734	1.113
ATOM	11	H6	GOL	1	-0.501	-0.390	1.766
ATOM	12	H7	GOL	1	1.195	-0.761	1.743
ATOM	13	O3	GOL	1	-0.009	-2.012	0.545
ATOM	14	H8	GOL	1	0.749	-2.578	0.707
TER							

 $\gamma\gamma$

ATOM	1	H1	GOL	1	-1.165	-1.526	1.066
ATOM	2	O1	GOL	1	-1.452	-0.698	1.457
ATOM	3	C1	GOL	1	-0.442	0.320	1.346
ATOM	4	H2	GOL	1	-0.757	1.238	1.846
ATOM	5	H3	GOL	1	0.332	0.025	2.058
ATOM	6	C2	GOL	1	0.074	0.725	-0.009
ATOM	7	H4	GOL	1	0.808	1.523	0.118
ATOM	8	O2	GOL	1	-1.085	1.235	-0.837
ATOM	9	H5	GOL	1	-0.702	1.888	-1.427
ATOM	10	C3	GOL	1	0.836	-0.380	-0.858
ATOM	11	H6	GOL	1	1.830	-0.604	-0.465
ATOM	12	H7	GOL	1	1.112	-0.025	-1.854
ATOM	13	O3	GOL	1	0.043	-1.562	-0.953
ATOM	14	H8	GOL	1	0.565	-2.164	-1.488
TER							

Reference 29:

Case, D. A. Darden, T. A.; Cheatham III, T. E.; Simmerling, C. L.; Wang, J.; Duke, R. E.; Lou, R.; Merz, K. M.; Wang, B.; Pearlman, D. A.; Crowley, M.; Brozell, S.; Tsui, V.; Gohlke, H.; Mongan, J.; Hornak, V.; Cui, G.; Beroza, P.; Schafmeister, P.; Caldwell, J. W.; Ross, W. S.; Kollman, P. A.; AMBER 8. University of California: San Francisco, CA: 2004.

Reference 36:

Case, D. A. Darden, T. A.; Cheatham III, T. E.; Simmerling, C. L.; Wang, J.; Duke, R. E.; Lou, R.; Merz, K. M.; Pearlman, D. A.; Crowley, M.; Walker, R. C.; Zhang, B.; Hayik, S.; Roitberg, A.; Seabra, G.; Wong, K. F.; Paesani, F.; Wu, X.; Brozell, S.; Tsui, V.; Gohlke, H.; Yang, L.; Tan, C.; Mongan, J.; Hornak, V.; Cui, G.; Beroza, P.; Mathews, D. H.; Schafmeister, C.; Ross, W. S.; Kollman, P. A.; AMBER 9. University of California: San Francisco, CA: 2006.

Reference 41:

Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Montgomery Jr., J. A.; Vreven, T.; Kudin, K. N.; Burant, J. C.; Millam, J. M.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Barone, V.; Mennucci, B.; Cossi, M.; Scalmani, G.; Rega, N.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, J.; Kitao, O.; Nakai, H.; Klene, M.; Li, X.; Knox, J. E.; Hratchian, H. P.; Cross, J. B.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Ayala, P. Y.; Morokuma, K.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Zakrzewski, V. G.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Strain, M. C.; Farkas, O.; Malick, D. K.; Rabuck, A. D.; Raghavachari, K.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cui, A.; Baboul, A. G.; Clifford, S.; Cioslowski, J.; Stefanov, B. B.; Liu, G.; Liashenko, A.; Piskorz, P.; Komaromi, I.; Martin, R. L.; Fox, D. J.; Keith, T.; Al-Laham, M. A.; Peng, C. Y.; Nanayakkara, A.; Challacombe, M.; Gill, P. M. W.; Johnson, B.; Chen, W.; Wong, M. W.; Gonzalez, C.; Pople, J. A.; Revision C.02 ed.; Gaussian 03. Gaussian, Inc.: Wallingford, CT, 2004.