

Table. List of major interactions of all ligands in vvUDG.

2OWQ

Ligand	Atom	Residue	Atom	Distance (Å)
GOL301 X	O3	Asp68 B	O	3.37
GOL301 X	O3	Wat146	O	2.83
GOL301 X	O1	N120 B	ND2	3.21
GOL301 X	O1	Wat132	O	2.62
GOL301 X	O1	N120 B	OD1	2.86
GOL301 X	O1	F79 B	N	2.91
GOL302 X	O2	T12 B	O	3.41
GOL302 X	O2	T14 B	N	3.14
GOL302 X	O2	T14 B	OG1	3.05
GOL302 X	O1	T14 B	N	3.33
GOL302 X	O1	T14 B	O	2.43
GOL302 X	O1	F50 B	O	2.82
GOL303 X	O2	H181 B	N	3.47
GOL303 X	O1	K160 B	N	2.83
GOL304 X	O1	Wat111	O	3.54
C1201 X	CL	Wat143	O	3.43
C1201 X	CL	N120 A	ND2	3.26
C1201 X	CL	Y70 A	N	3.47
C1201 X	CL	F79 A	N	3.35

2OWR

Ligand	Atom	Residue	Atom	Distance (Å)
SO4202 X	O1	Wat144	O	2.66
SO4202 X	O2	Wat145	O	3.22
SO4202 X	O3	Wat37	O	2.83
SO4202 X	O4	Wat54	O	3.06
IMD401 X	N1	D68 A	O	3.28
IMD402 X	N3	H8 B	O	2.63
IMD403 X	N3	H8 A	O	3.39
IMD403 X	N1	N31 A	O	3.85
IMD403 X	N1	Wat123	O	3.70
GOL603	O2	Y218 A	N	3.10
GOL603	O3	F216 A	O	3.02
GOL604	O1	I135 A	N	3.04
GOL604	O1	S132 A	O	2.44
GOL604	O1	A134 A	N	2.89

GOL604	02	D138 C	OD2	3.23
GOL604	01	I135 C	O	2.47
GOL604	03	K131 A	O	2.54
GOL605	01	Y70 A	N	2.99
GOL605	02	F79 A	N	2.77
GOL605	02	N120 A	OD1	2.33
GOL605	02	N120 A	ND2	3.05
GOL606	01	F49 A	O	2.68
GOL606	01	Q52 A	N	3.27
GOL606	01	G76 A	O	2.58
GOL606	02	G76 A	O	2.56
GOL606	03	N120 A	O	2.57
GOL606	03	N120 A	N	3.04
GOL607	01	E129 A	OE1	2.84
GOL607	02	T130 A	O	2.28
GOL607	02	T130 A	N	3.11
GOL607	03	Wat488	O	2.69
GOL608	01	Y122 A	OH	2.63
GOL608	02	D162 A	O	2.53
GOL608	03	K131 A	NZ	2.89
GOL609	03	S164 A	N	3.30
GOL609	03	N165 A	N	2.75
GOL609	03	I166 A	N	2.73
GOL609	03	D162 A	O	3.19
GOL610	02	K191 A	O	2.96
GOL610	03	K191 A	O	3.31
GOL611	01	N165 C	ND2	3.24
GOL611	01	E32 A	OE2	3.13
GOL611	02	Wat376	O	2.89
GOL611	02	K139 A	N	3.12
GOL611	03	K139 A	N	3.27
GOL611	03	Y136 A	O	2.42
GOL611	03	W137 A	O	3.14
GOL612	01	N120 C	ND2	2.85
GOL612	03	Q52 C	N	2.89
GOL612	03	F49 C	O	3.05
GOL612	03	I51 C	N	3.25
GOL612	03	G76 C	O	2.71
GOL612	03	T14 C	O	2.83
GOL612	03	F50 C	O	3.07
GOL613	02	T14 C	N	3.14
GOL613	03	T12 C	O	2.67
GOL613	03	Wat52	O	3.30

GOL614	O1	Wat524	O	2.89
GOL614	O2	E20 C	O	2.93
GOL614	O2	S24 C	N	3.02
GOL614	O3	P21 C	O	2.71
GOL614	O3	Q25 C	NE2	2.93
GOL615	O1	P46 D	O	2.96
GOL615	O1	F50 D	N	2.98
GOL615	O2	T12 D	O	2.71
GOL615	O3	T14 D	N	3.00
GOL616	O1	Y70 E	N	3.07
GOL616	O1	Wat166	O	3.03
GOL616	O2	N120 E	OD1	2.38
GOL616	O2	N120 E	ND2	2.99
GOL616	O2	F79 E	N	2.65
GOL617	O1	N120 E	N	3.17
GOL617	O1	N120 E	O	2.86
GOL617	O2	G76 E	O	3.33
GOL617	O3	N120 E	ND2	2.97
GOL617	O3	Wat111	O	2.31
GOL618	O1	Q146 E	OE1	3.26
GOL618	O2	L143 E	O	2.57
GOL618	O2	H147 E	N	3.06
GOL618	O3	H147 E	ND1	2.70
GOL618	O3	K150 E	NZ	3.25
GOL619	O1	N120 G	OD1	2.69
GOL619	O1	N120 G	ND2	2.84
GOL619	O3	D68 G	O	2.62
GOL619	O3	N120 G	OD1	3.01
GOL620	O1	Wat416	O	3.04
GOL620	O1	G74 G	O	3.00
GOL620	O2	D73 G	N	3.10
CL600	CL	N120 C	N	3.13
CL600	CL	N120 C	O	2.70
CL600	CL	Gol612	O2	2.46
EPE601	O1S	K160 A	N	3.18
EPE602	O2S	A183 E	O	3.39
EPE602	O3S	A184 E	N	3.42