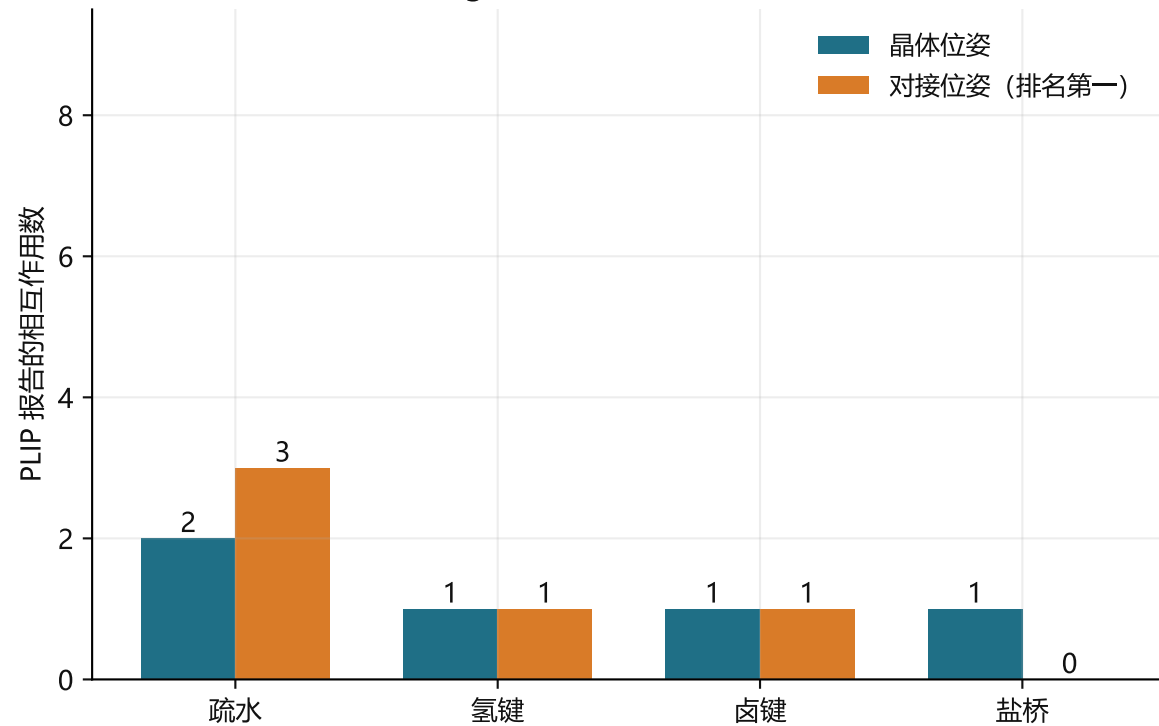
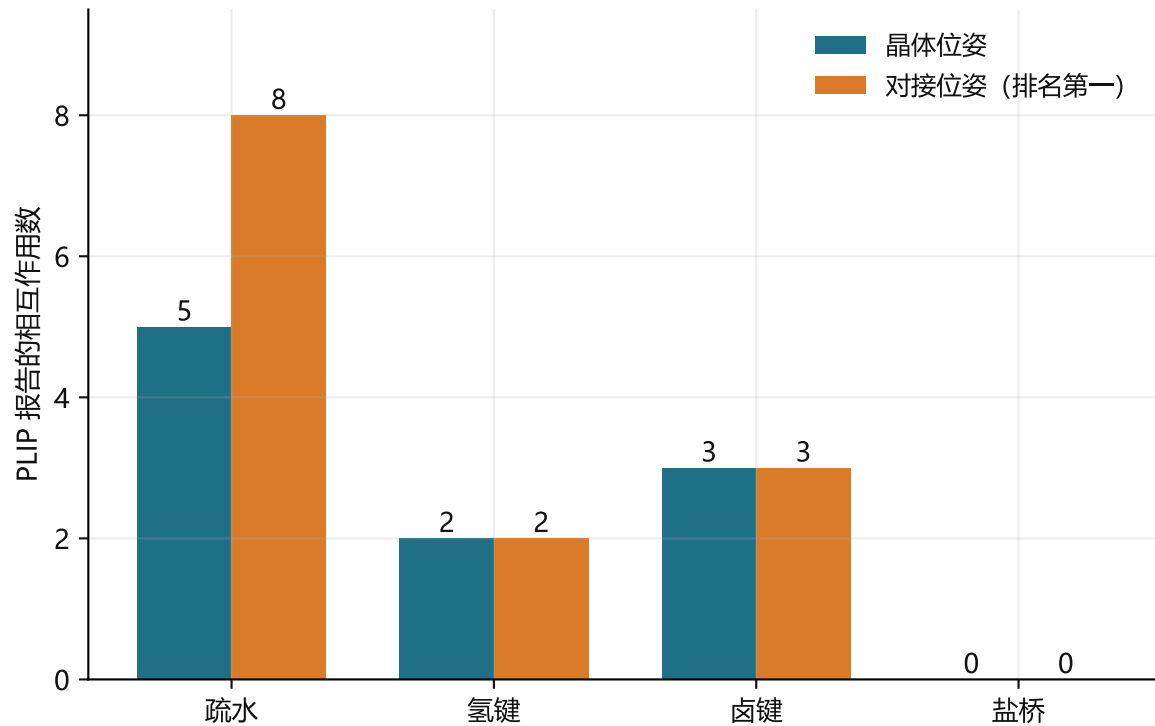


图组 3 | PLIP 相互作用指纹：晶体位姿 vs 对接位姿

2ITO · EGFR G719S + gefitinib (IRE) (PLIP v3.0.1, 同一受体定义)



3POZ · EGFR WT + TAK-285 (03P) (PLIP v3.0.1, 同一受体定义)



两类输入的配体化学身份核验一致 (InChIKey、分子量相同)，排除了配体身份差异这一项；但指纹差异还受位姿几何与准备条件（质子化、水与离子、受体坐标）影响，不能只归因于构象。PLIP 使用化学角色 + 几何判据，短距离列表不构成等价指纹。