

图组 4 | 残基层面的相互作用归属
疏=疏水 氢=氢键 卤=卤键 盐=盐桥 --=无

THR790	疏	疏	卤疏	卤疏
MET793	氢疏	氢	氢	氢
ASP800	盐	—	—	—
LEU788	卤	卤	卤疏	卤疏
LEU718	—	疏	—	疏
VAL726	—	疏	—	疏
LYS745	—	—	疏	疏
THR854	—	—	疏	疏
LEU858	—	—	疏	疏
ASN842	—	—	氢	—
MET766	—	—	卤	卤
ASP855	—	—	—	氢
	2ITO 晶体	2ITO 对接	3POZ 晶体	3POZ 对接

行 = 出现在任一情况中的残基；列 = 案例 × 构象。两种对接位姿都保留 Met793 铰链氢键与 Leu788 卤键；
2ITO 对接位姿丢失 Asp800 盐桥；3POZ 对接位姿把 Asn842 氢键换成 Asp855，指纹并未完全恢复。