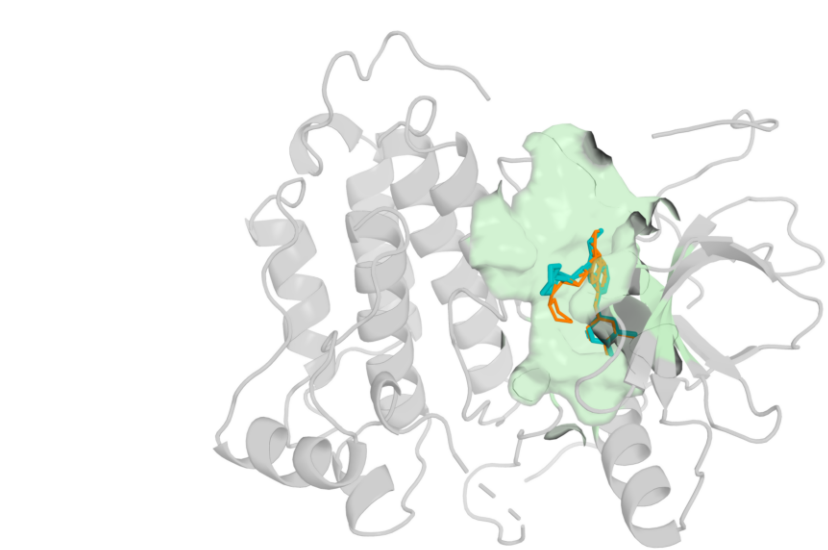


2ITO / gefitinib: 晶体位姿与对接位姿的对照

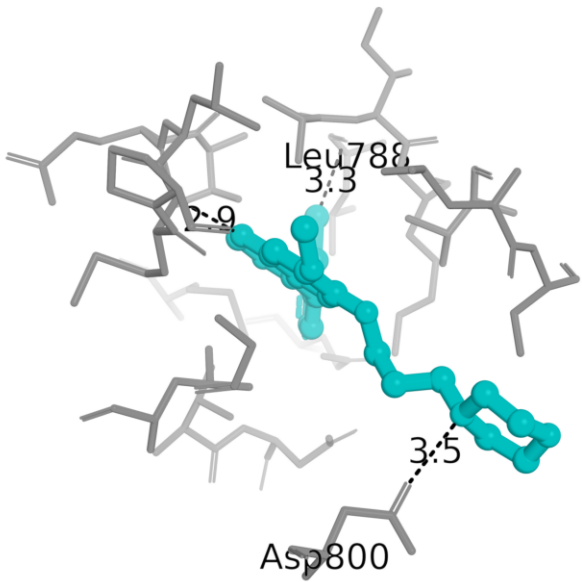
EGFR G719S 突变体 · 两配体共用同一受体坐标系 · 未对配体做任何叠合

A 整体：ATP 位点在激酶域中的位置



灰色卡通为 EGFR 激酶域（链 A）。浅绿半透明表面 = 晶体配体 6 Å 内的位点区；青绿 = 晶体位姿，橙色 = 对接位姿。

B 口袋放大：晶体位姿的三处实测接触



青绿球棍 = 晶体配体；灰色棍 = 4.5 Å 内口袋残基。虚线为受体坐标系下的实测值：Met793 铰链 2.9 Å、Leu788 卤键 3.3 Å、Asp800 3.5 Å（PyMOL 独立复测 2.916 / 3.285 / 3.487 Å）。

C 叠合：晶体位姿 vs 对接位姿



青绿球棍 = 晶体位姿（IRE）；橙色细棍 = 对接最优位姿（链 L）。同一坐标系下，图中偏移即真实空间位移。对接最佳 RMSD 3.16 Å（不叠合；对称性感知叠合后 2.62 Å），对接未能找回晶体位姿，且经验打分偏好非天然位姿：晶体位姿打分 -6.85，对接最优 -8.10。

D 关键数字

量	值	含义
对接最佳 RMSD	3.16 Å	10 个采样位姿中的最小重原子偏差（不叠合）
排名第一 RMSD	3.16 Å	打分最优的位姿也恰好偏差最小
对接最优打分	-8.10	Vina 经验打分（kcal/mol），排序用，不是亲和力
晶体位姿打分	-6.85	同一套受体与格点下给实验位姿打分
晶体位姿局部最小化	-7.33	另一次计算；坐标已单独保存，仅移动 0.22 Å
保留的接触	Met793 氢键；Leu788 卤键	对接位姿保留 2 项，丢失 Asp800 盐桥