

3POZ / TAK-285：晶体位姿与对接位姿的对照

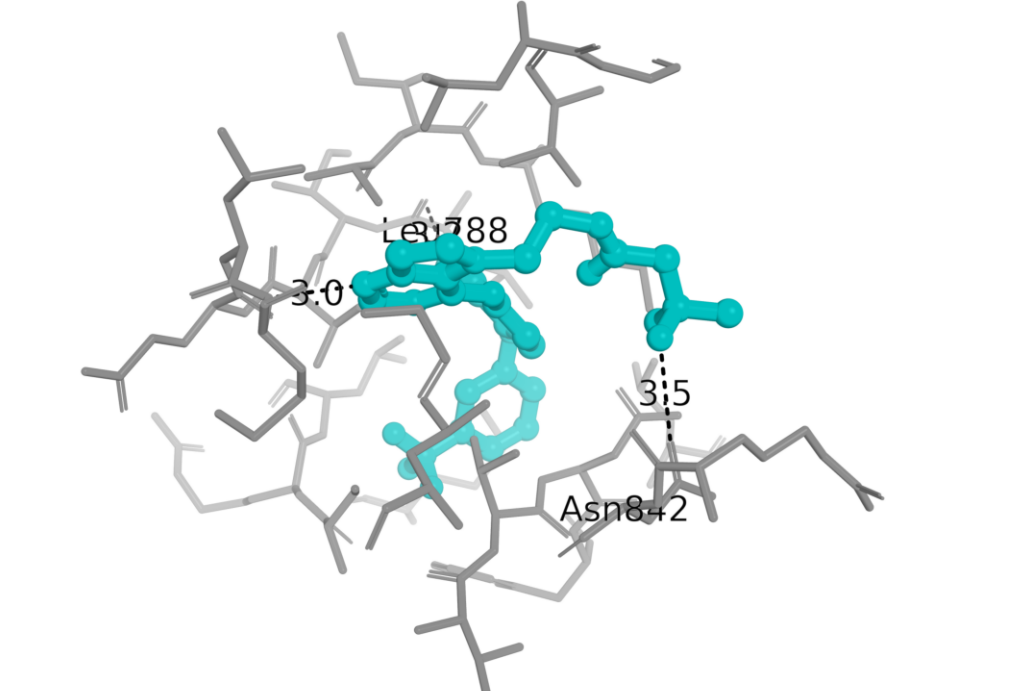
EGFR 野生型 · 两配体共用同一受体坐标系 · 未对配体做任何叠合

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（03P / TAK-285）；灰色棍 = 4.5 Å 内口袋残基。虚线实测值：Met793 铰链 2.96 Å、Asn842 3.55 Å、Leu788 卤键 3.23 Å（PyMOL 独立复测 2.963 / 3.549 / 3.230 Å）。

C 叠合：晶体位姿 vs 对接位姿



青绿球棍 = 晶体位姿（03P）；橙色细棍 = 对接最优位姿（链 L）。对接最佳 RMSD 0.98 Å（不叠合），为本组两案例中成功找回晶体位姿的一例；但第二个氢键的伙伴由 Asn842 变为 Asp855。对接找回了晶体位姿（RMSD 0.98 Å），打分也把晶体位姿排在合理位置（-10.29 vs -10.73）；但氢键伙伴由 Asn842 变为 Asp855，相互作用指纹并非完全恢复。

D 关键数字

量	值	含义
对接最佳 RMSD	0.98 Å	10 个采样位姿中的最小重原子偏差（不叠合）
排名第一 RMSD	0.98 Å	打分最优的位姿就是最接近晶体的那个
对接最优打分	-10.73	Vina 经验打分（kcal/mol），排序用，不是亲和力
晶体位姿打分	-10.29	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	-10.52	另一次计算；坐标已单独保存，仅移动 0.23 Å
保留的接触	Met793 氢键；Leu788 卤键	同类相互作用保留，但氢键伙伴由 Asn842 变为 Asp855