

1. 论文位置 0

在原始共晶结构中，配体的一个羰基和两个仲胺与 Glu472 形成三个氢键，配体的氰基与 Hie469 形成一个氢键，同时配体的一个芳香环和 His347 芳香环形成了一个芳香氢键。

2. 构象位置 1

在构象 1 中，DEL7 形成了所有位置 0 中的氢键，并且其一个氨基和 CSO451 形成了额外的氢键。虽然位置 1 的芳香环姿态和位置 0 相似，但没有形成位置 0 中的芳香氢键。

3. 构象位置 2

在构象 2 中，DEL7 发生大幅度的扭转，配体的一个羰基和 Glu472 形成一个氢键，Glu472 的氢键数量相较位置 0 减少了两个，配体的一个氰基与 Hie469 形成一个氢键，一个氨基和 CSO451 形成了额外的氢键。位置 2 的芳香环姿态相较位置 0 中的芳香环旋转了 180 度，仍然形成了形如位置 0 中的芳香氢键。