

脚本说明

尚醇 2022.5.15

通过三个角度值来量化 TCR-pMHC 的三体结合构象：

- ①TCR “twist” 扭转角度 (TCR 轻重链间二硫键的连线向量与 Pep 方向向量)
- ②TCR “tilt” 倾斜角度 (TCR “法向” 方向与 MHC “法向” 方向)
- ③TCR “swing” 摇摆角度 (TCR 轻重链间二硫键的连线方向与 MHC “法向” 方向)

在下图中：

左侧为抽象示意图，其中主视角中灰色平面代表 MHC 的凹槽平面 (groove plane)，各观察方位对应夹角的两边已标粗，黑色圆点为对应夹角的顶点；

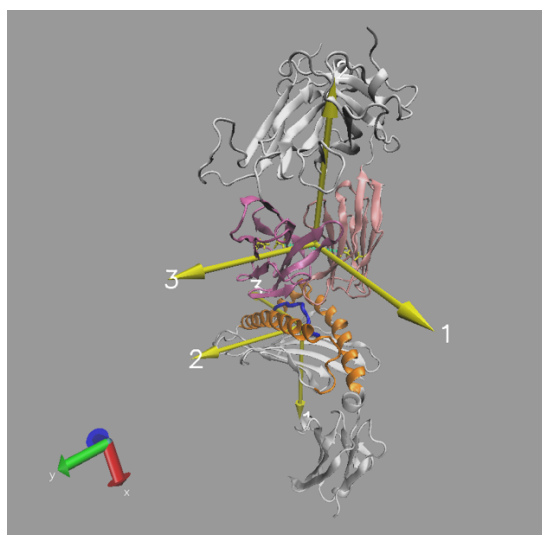
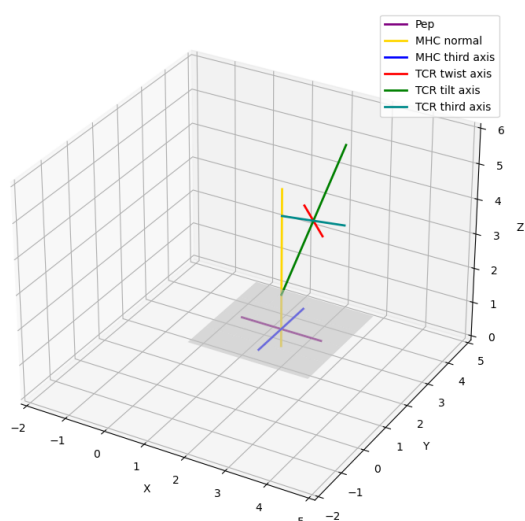
右侧为 VMD 快照图 (PDB: 1OGA)，其中 TCR (alpha: pink; beta: mauve) 和 MHC 的彩色部分分别代表计算其主轴 (principle axes) 时选取的原子范围，绿色虚线代表轻重链间两 Cys 残基的连线。

另外：

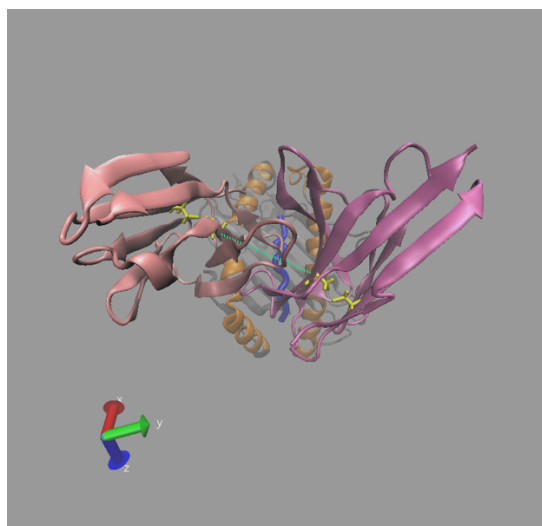
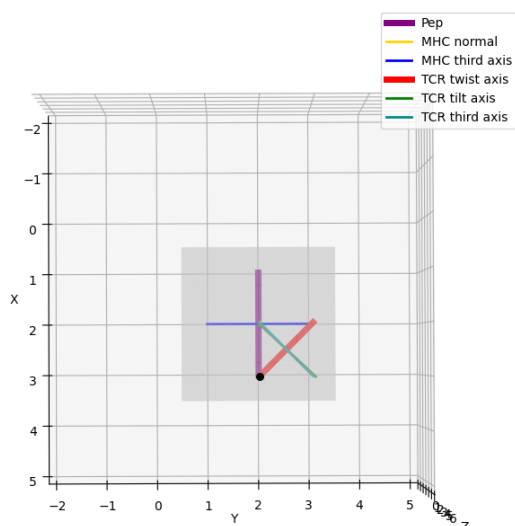
脚本中求空间直线 α 在平面（其单位法向量为 n ）上的投影向量数学公式为：

$$\alpha_{\text{投影}} = \alpha - (\alpha \cdot n)n$$

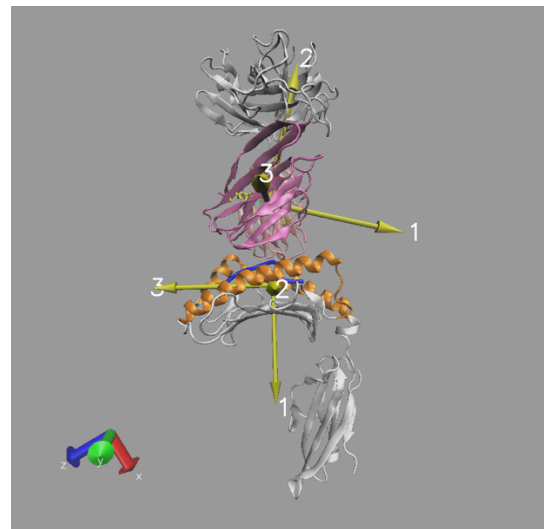
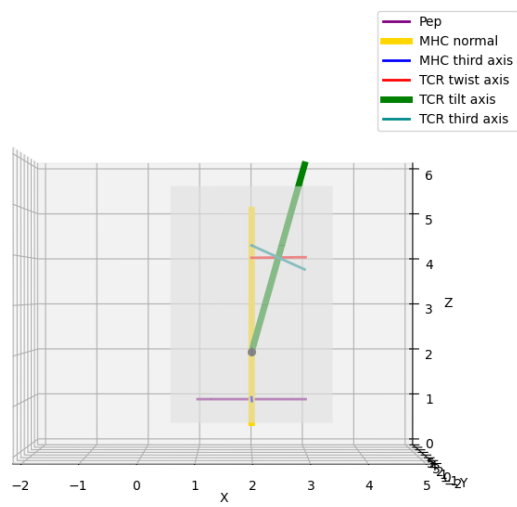
■ 主视角



■ 俯视投影，Twist Angle



■ 左视投影, Tilt Angle



■ 右视投影, Swing Angle

