

分子动力学文件语法高亮 VScode 插件  
**v1.0**  
使用说明

2025 年 9 月 9 日

# 目 录

一、 软件基本信息·····	1
1.1 软件名称和版本信息·····	1
1.2 软件功能概述·····	1
1.3 软件主要特点·····	2
1.4 软件创新点·····	2
1.5 技术特征·····	2
二、 安装和配置·····	2
2.1 系统要求·····	2
2.2 软件特性·····	3
2.2.1 支持的文件格式概览·····	3
2.2.2 智能颜色编码系统·····	3
2.2.3 主题兼容性与自定义·····	3
2.3 安装方法·····	4
2.3.1 从 Visual Studio Marketplace 安装（推荐）·····	4
2.3.2 从 VSIX 文件安装·····	4
2.3.3 从命令行安装·····	4
2.4 验证安装·····	5
2.5 配置选项·····	5
2.5.1 主题适配·····	5
2.5.2 文件关联配置·····	5
2.6 更新和维护·····	5
2.6.1 自动更新·····	5
2.6.2 版本管理·····	6
2.6.3 问题反馈·····	6
2.7 卸载·····	6
三、 使用示例·····	6
3.1 NAMD/CHARMM 文件格式·····	6
3.1.1 蛋白质数据库文件（PDB）·····	6
3.1.2 残基拓扑文件（RTF）·····	7
3.1.3 蛋白质结构文件（PSF）·····	7
3.1.4 CHARMM 参数文件（PRM）·····	8

3.2	Amber/AmberTools 文件格式	9
3.2.1	Amber 拓扑文件 (PRMTOP)	9
3.2.2	Amber 参数版本 7 格式 (PARM7)	9
3.2.3	Amber 库文件 (LIB)	10
3.2.4	Amber 预处理输入文件 (PREPIN)	11
3.2.5	Amber 力场修改文件 (FRCMOD)	11
3.2.6	AmberTools 输入脚本 (TLEAP.IN)	13
3.2.7	Antechamber 主链文件 (MC)	13
3.2.8	Antechamber 文件 (AC)	14
3.3	Gromacs 文件格式	15
3.3.1	Gromacs 坐标文件 (GRO)	15
3.3.2	Gromacs 原子类型文件 (ATP)	15
3.3.3	Gromacs 突变拓扑文件 (MTP)	15
3.3.4	Gromacs 终端数据库文件 (TDB)	16
3.4	小分子文件格式	17
3.4.1	MOL2 分子结构文件 (MOL2)	17
3.4.2	结构数据文件 (SDF)	18
3.5	增强采样文件格式	18
3.5.1	PLUMED 输入文件	18
3.6	实际应用指南	19
3.6.1	文件验证与调试	19
3.6.2	跨格式工作流	19
3.6.3	最佳实践建议	20
四、	未来发展	21
4.1	计划增强	21
4.2	社区贡献	21
4.3	总结	21

## 一、 软件基本信息

### 1.1 软件名称和版本信息

表 1 md-highlighter 软件基本信息

项目	描述
软件全称	分子动力学文件语法高亮 VScode 插件
软件简称	md-highlighter
版本号	0.0.7
软件分类	应用软件
软件类型	Visual Studio Code 扩展插件
开发语言	JSON（配置文件）
运行环境	Visual Studio Code 1.70.0 及以上版本
开发者	高旭帆 (gxf1212)
开发单位	个人开发者
仓库地址	<a href="https://github.com/gxf1212/md-highlighter">https://github.com/gxf1212/md-highlighter</a>
软件规模	1336 行代码
开发完成日期	2024 年
首次发表日期	2023 年

### 1.2 软件功能概述

**md-highlighter** 是一款专为计算化学和分子动力学研究人员设计的 Visual Studio Code 扩展插件。该软件为分子建模和分子动力学模拟中使用的各种专业文件格式提供语法高亮功能，支持 Amber、Gromacs、NAMD、VMD、PLUMED 等主流模拟软件的文件格式。

该扩展的核心价值在于解决科研工作者在编辑复杂分子模拟文件时面临的痛点：

- 缺乏针对分子建模专业文件格式的语法高亮支持
- 难以在大量数值和参数中快速定位语法错误
- 文件内容结构复杂，缺少视觉层次区分
- 编辑效率低下，容易出现人为错误

## 1.3 软件主要特点

- **广泛的格式支持：**支持 20 多种分子模拟文件格式的语法高亮，覆盖主流计算化学软件生态系统
- **智能语法识别：**提供智能的语法错误识别功能，通过颜色编码帮助用户快速发现问题
- **增强可读性：**显著提高代码可读性和编辑效率，降低人工编辑错误率
- **标准化配色：**采用统一的颜色编码方案，保证不同文件类型间的视觉一致性
- **零配置安装：**即装即用，无需复杂配置过程
- **主题兼容：**完全兼容 VS Code 主题系统，适应用户个性化需求

## 1.4 软件创新点

- **领域专业性：**首个专门针对分子动力学文件格式的 VS Code 语法高亮扩展
- **架构创新：**基于 TextMate 语法规则的模块化架构设计，采用纯声明式配置方法
- **生态整合：**覆盖多个分子模拟软件生态系统的综合性支持
- **性能优化：**零运行时代码执行，确保最小性能开销
- **标准化实现：**建立了分子模拟文件语法高亮的标准化实现范式

## 1.5 技术特征

md-highlighter 采用完全基于配置的架构模式，具有以下技术特征：

- **声明式语法定义：**使用 JSON 格式的 TextMate 语法文件定义高亮规则
- **模块化结构：**每种文件格式拥有独立的语法定义文件
- **正则表达式驱动：**基于正则表达式的模式匹配实现精确的标记化
- **作用域映射系统：**通过语义作用域实现与颜色主题的解耦
- **扩展性设计：**新文件格式可以无缝添加而不影响现有功能

该软件填补了计算化学领域代码编辑工具的重要空白，为相关研究人员提供了专业、高效的文件编辑解决方案。

# 二、 安装和配置

## 2.1 系统要求

md-highlighter 作为 Visual Studio Code 扩展，具有以下系统要求：

表 2 md-highlighter 系统要求

要求项目	规格
操作系统	Windows 7+, macOS 10.10+, Linux
VS Code 版本	1.70.0 及以上版本
内存要求	最小 512MB 可用内存
存储空间	约 10MB 磁盘空间
网络要求	仅安装时需要网络连接

2.2 软件特性

md-highlighter 扩展为分子仿真领域的主要文件格式提供专业级语法高亮，支持超过 20 种文件类型，覆盖 NAMD/CHARMM、Amber、Gromacs、PLUMED 等主流工具。

2.2.1 支持的文件格式概览

表 3 支持的文件格式概览

软件平台	文件类型	主要格式
NAMD	拓扑和参数文件	.rtf, .pdb, .prm, .psf, .str, .inp
Amber	拓扑和坐标文件	.in, .prmtop, .inpcrd, .prepin, .frcmod, .lib, .ac
Gromacs	专业格式集合	.gro, .atp, .arn, .rtp, .hdb, .r2b, .tdb, .mtp
小分子等	化学结构格式	.mol2, .sdf, .plumed.dat

2.2.2 智能颜色编码系统

扩展使用基于语义作用域的颜色编码，为不同数据类型提供一致且直观的视觉标识：

- 结构信息：残基编号、原子名称、元素符号
- 数值数据：坐标、质量、电荷、速度
- 拓扑连接：键编号、段名称、连接关系
- 力场参数：原子类型、参数值、相互作用定义

2.2.3 主题兼容性与自定义

扩展在 **Atom One Light** 主题下经过优化测试，同时兼容大多数 VS Code 主题。用户可通过设置自定义颜色方案：

```
{
  "editor.tokenColorCustomizations": {
    "textMateRules": [
      {
        "scope": "entity.name.tag.atom-name",
        "settings": {
          "foreground": "#0066CC",
          "fontStyle": "bold"
        }
      }
    ]
  }
}
```

## 2.3 安装方法

### 2.3.1 从 Visual Studio Marketplace 安装（推荐）

- 打开 Visual Studio Code
- 点击左侧活动栏中的扩展图标（或按 **Ctrl+Shift+X**）
- 在搜索框中输入“md-highlighter”
- 找到由 gxf1212 发布的 md-highlighter 扩展
- 点击“安装”按钮
- 安装完成后重启 VS Code（可选）

### 2.3.2 从 VSIX 文件安装

- 下载 md-highlighter 的 VSIX 安装包
- 打开 VS Code
- 按 **Ctrl+Shift+P** 打开命令面板
- 输入“Extensions: Install from VSIX...”
- 选择下载的 VSIX 文件
- 等待安装完成

### 2.3.3 从命令行安装

使用 VS Code 的命令行工具进行安装：

```
code --install-extension gxf1212.md-highlighter
```

## 2.4 验证安装

安装完成后，可以通过以下方式验证安装是否成功：

- 在 VS Code 中打开任意一个支持的分子模拟文件（如.pdb、.rtf 等）
- 确认文件内容显示了彩色语法高亮
- 在 VS Code 的扩展列表中查看 md-highlighter 是否显示为“已启用”状态

## 2.5 配置选项

md-highlighter 采用零配置设计，安装后即可直接使用。但用户可以根据需要进行以下可选配置：

### 2.5.1 主题适配

md-highlighter 与 VS Code 的主题系统完全兼容。推荐在以下主题中使用以获得最佳视觉效果：

- Atom One Light（测试主题）
- Default Dark+
- Default Light+
- Monokai
- Solarized Dark/Light

### 2.5.2 文件关联配置

扩展会自动识别如表 3 所示的文件扩展名。如需为特殊命名的文件启用语法高亮，可以手动指定语言模式：

- 打开目标文件
- 点击状态栏右下角的语言标识
- 从列表中选择相应的语言模式（如“NAMD force field”、“PDB file”等）

## 2.6 更新和维护

### 2.6.1 自动更新

VS Code 会自动检查并提示扩展更新。用户也可以在扩展管理界面手动检查更新。



## 2.6.2 版本管理

用户可以在扩展详情页面查看版本历史和更新日志，了解每个版本的新增功能和修复的问题。

## 2.6.3 问题反馈

如遇到使用问题或希望请求新功能，可以通过以下渠道反馈：

- GitHub Issues: <https://github.com/gxf1212/md-highlighter>
- 邮件联系: [gxf1212@zju.edu.cn](mailto:gxf1212@zju.edu.cn)

## 2.7 卸载

如需卸载 md-highlighter:

- 打开 VS Code 扩展管理界面
- 找到 md-highlighter 扩展
- 点击齿轮图标，选择”卸载”
- 重启 VS Code 完成卸载

卸载过程不会影响用户的文件内容，仅移除语法高亮功能。

# 三、 使用示例

md-highlighter 扩展安装后自动生效，无需操作。以下演示展示了 md-highlighter 扩展在不同分子仿真文件中的语法高亮效果。通过个性化的颜色编码和语义标识，用户可以更高效地编辑和管理各种复杂的分子模拟文件。

## 3.1 NAMD/CHARMM 文件格式

### 3.1.1 蛋白质数据库文件（PDB）

PDB (Protein Data Bank) 格式是生物大分子结构数据的国际标准格式。该格式包含了蛋白质、核酸和其他生物大分子的三维原子坐标信息。md-highlighter 为 PDB 文件提供了精细的语法高亮，能够清晰地区分 ATOM、HETATM、REMARK 等不同记录类型，并且对原子坐标、残基信息和链标识符进行颜色编码，大大提高了文件的可读性。

**高亮特性：**记录类型、原子坐标、残基信息、链标识符清晰区分

**应用场景：**结构分析、坐标编辑、格式验证

1	REMARK	GENERATE	LIGAND							
2	REMARK	DATE:	12/13/22	6: 1:35	CREATED BY	USER:	apache			
3	ATOM	1	P1	LIG	L	1	5.998	-7.223	-5.561	1.00 0.00 LIG
4	ATOM	2	P2	LIG	L	1	8.461	-5.541	-5.455	1.00 0.00 LIG
5	ATOM	3	P3	LIG	L	1	10.717	-7.460	-5.915	1.00 0.00 LIG
6	ATOM	4	C1	LIG	L	1	2.820	-2.950	-3.870	1.00 0.00 LIG
7	ATOM	5	N1	LIG	L	1	0.514	-3.676	0.105	1.00 0.00 LIG
8	ATOM	6	O1	LIG	L	1	4.280	-0.687	-6.398	1.00 0.00 LIG
9	ATOM	7	C2	LIG	L	1	2.473	-4.424	-2.235	1.00 0.00 LIG
10	ATOM	8	N2	LIG	L	1	1.831	-2.376	-3.112	1.00 0.00 LIG
11	ATOM	9	O2	LIG	L	1	5.075	-5.881	-5.597	1.00 0.00 LIG
12	ATOM	10	C3	LIG	L	1	4.979	-5.230	-6.883	1.00 0.00 LIG
13	ATOM	11	N3	LIG	L	1	0.029	-1.771	-1.059	1.00 0.00 LIG
14	ATOM	12	O3	LIG	L	1	3.162	-3.808	-6.144	1.00 0.00 LIG
15	ATOM	13	C4	LIG	L	1	4.467	-3.792	-6.742	1.00 0.00 LIG
16	ATOM	14	N4	LIG	L	1	1.174	-1.206	-3.100	1.00 0.00 LIG
17	ATOM	15	O4	LIG	L	1	6.460	-2.319	-6.562	1.00 0.00 LIG
18	ATOM	16	C5	LIG	L	1	5.315	-2.847	-5.874	1.00 0.00 LIG
19	ATOM	17	N5	LIG	L	1	0.799	-1.416	-6.441	1.00 0.00 LIG
20	ATOM	18	O5	LIG	L	1	5.971	-7.694	-4.129	1.00 0.00 LIG
21	ATOM	19	C6	LIG	L	1	4.295	-1.764	-5.442	1.00 0.00 LIG
22	ATOM	20	O6	LIG	L	1	8.193	-4.170	-6.056	1.00 0.00 LIG
23	ATOM	21	C7	LIG	L	1	2.956	-2.598	-5.384	1.00 0.00 LIG
24	ATOM	22	O7	LIG	L	1	11.986	-6.764	-5.468	1.00 0.00 LIG
25	ATOM	23	C8	LIG	L	1	0.259	-0.967	-2.129	1.00 0.00 LIG
26	ATOM	24	O8	LIG	L	1	5.400	-8.109	-6.634	1.00 0.00 LIG
27	ATOM	25	C9	LIG	L	1	1.602	-3.288	-2.013	1.00 0.00 LIG
28	ATOM	26	O9	LIG	L	1	8.491	-5.563	-3.947	1.00 0.00 LIG
29	ATOM	27	C10	LIG	L	1	0.708	-2.937	-0.985	1.00 0.00 LIG
30	ATOM	28	O10	LIG	L	1	10.858	-8.155	-7.259	1.00 0.00 LIG
31	ATOM	29	C11	LIG	L	1	3.167	-4.190	-3.397	1.00 0.00 LIG
32	ATOM	30	O11	LIG	L	1	7.354	-6.536	-6.069	1.00 0.00 LIG
33	ATOM	31	C12	LIG	L	1	1.775	-1.910	-5.951	1.00 0.00 LIG
34	ATOM	32	O12	LIG	L	1	9.724	-6.179	-6.216	1.00 0.00 LIG
35	ATOM	33	O13	LIG	L	1	10.090	-8.337	-4.854	1.00 0.00 LIG
36	ATOM	34	H1	LIG	L	1	5.140	-0.761	-6.846	1.00 0.00 LIG
37	ATOM	35	H2	LIG	L	1	2.575	-5.311	-1.624	1.00 0.00 LIG

图 1 PDB 文件语法高亮演示 (.pdb 格式)

### 3.1.2 残基拓扑文件 (RTF)

RTF (Residue Topology File) 文件是 CHARMM 力场中用于定义残基拓扑结构的核心文件。它包含了残基的原子类型、连接关系、电荷分布等关键信息。通过 md-highlighter 的语法高亮,用户可以快速识别 RESI、ATOM、BOND 等关键字,以及各种参数值和注释内容。

**高亮特性:** 章节标题、原子定义、连接信息、参数值突出显示

**应用场景:** 力场开发、残基定义、拓扑验证

### 3.1.3 蛋白质结构文件 (PSF)

PSF (Protein Structure File) 是 NAMD 和 CHARMM 中使用的二进制拓扑文件,存储了分子系统的完整拓扑信息。文件包含原子列表、键连接、角度和二面角定义,是分子动力学模拟的基础文件。md-highlighter 通过对不同章节进行颜色编码,使用户能够快速定位和编辑相关内容。

**高亮特性:** 原子列表、键连接、分子段信息有序组织

```
1  * Topologies generated by
2  * CHARMM General Force Field (CGenFF) program version 2.5.1
3  *
4  36 1
5
6  ! "penalty" is the highest penalty score of the associated parameters.
7  ! Penalties lower than 10 indicate the analogy is fair; penalties between 10
8  ! and 50 mean some basic validation is recommended; penalties higher than
9  ! 50 indicate poor analogy and mandate extensive validation/optimization.
10
11  RESI lig          -4.000 ! param penalty= 288.500 ; charge penalty= 87.046
12  GROUP           ! CHARGE  CH_PENALTY
13  ATOM P1         PG1    1.505 !    0.000
14  ATOM P2         PG1    1.505 !    0.000
15  ATOM P3         PG2    1.105 !    0.000
16  ATOM C1         CG2R57 0.299 !   60.060
17  ATOM N1         NG2S3  -0.764 !   22.006
18  ATOM O1         OG311  -0.647 !   15.381
19  ATOM C2         CG2R51 -0.226 !   20.406
20  ATOM N2         NG2RC0 -0.073 !   69.844
21  ATOM O2         OG303  -0.621 !    0.000
22  ATOM C3         CG321  -0.081 !    0.304
23  ATOM N3         NG2R62 -0.781 !   28.183
24  ATOM O3         OG3C51 -0.552 !   35.011
25  ATOM C4         CG3C51 0.143 !   21.734
26  ATOM N4         NG2R62 -0.475 !   45.406
27  ATOM O4         OG311  -0.647 !    0.040
28  ATOM C5         CG3C51 0.106 !    7.152
29  ATOM N5         NG1T1  -0.460 !    4.472
30  ATOM O5         OG2P1  -0.816 !    0.000
31  ATOM C6         CG3C51 0.106 !   24.250
32  ATOM O6         OG2P1  -0.835 !    0.000
33  ATOM C7         CG3C50 0.436 !   87.046
34  ATOM O7         OG2P1  -0.900 !    0.000
35  ATOM C8         CG2R64 0.795 !   28.027
36  ATOM O8         OG2P1  -0.816 !    0.000
37  ATOM C9         CG2RC0 -0.145 !   53.697
38  ATOM O9         OG2P1  -0.835 !    0.000
39  ATOM C10        CG2R64 0.496 !   38.049
40  ATOM O10        OG2P1  -0.900 !    0.000
41  ATOM C11        CG2R51 -0.297 !   23.336
```

图 2 RTF 文件语法高亮演示 (.rtf 格式)

应用场景：拓扑验证、连接调试、分子分析

### 3.1.4 CHARMM 参数文件 (PRM)

PRM 文件是 CHARMM 力场中的参数文件，包含键长、键角、二面角和非键相互作用参数。该文件定义了分子间和分子内相互作用的力学性质，是力场计算的核心组件。md-highlighter 为 PRM 文件提供了清晰的章节区分和参数高亮。

高亮特性：参数章节、原子类型、力常数、相互作用定义清晰划分

应用场景：力场开发、参数优化、分子动力学模拟

28	REMARKS	patch	NTER	PR3:2					
29	REMARKS	patch	CTER	PR4:191					
30	REMARKS	patch	ACE	PR4:56					
31									
32	19110	!	NATOM						
33	1	MG	810	MG	MG	MG	2.000000	24.3050	0
34	2	MG	811	MG	MG	MG	2.000000	24.3050	0
35	3	ZN	812	ZN2	ZN	ZN	2.000000	65.3700	0
36	4	ZN	813	ZN2	ZN	ZN	2.000000	65.3700	0
37	5	WAT	105	TIP3	OH2	OT	-0.834000	15.9994	0
38	6	WAT	105	TIP3	H1	HT	0.417000	1.0080	0
39	7	WAT	105	TIP3	H2	HT	0.417000	1.0080	0
40	8	WAT	197	TIP3	OH2	OT	-0.834000	15.9994	0
41	9	WAT	197	TIP3	H1	HT	0.417000	1.0080	0
42	10	WAT	197	TIP3	H2	HT	0.417000	1.0080	0
43	11	WAT	432	TIP3	OH2	OT	-0.834000	15.9994	0
44	12	WAT	432	TIP3	H1	HT	0.417000	1.0080	0
45	13	WAT	432	TIP3	H2	HT	0.417000	1.0080	0
46	14	WAT	508	TIP3	OH2	OT	-0.834000	15.9994	0
47	15	WAT	508	TIP3	H1	HT	0.417000	1.0080	0
48	16	WAT	508	TIP3	H2	HT	0.417000	1.0080	0
49	17	WAT	610	TIP3	OH2	OT	-0.834000	15.9994	0
50	18	WAT	610	TIP3	H1	HT	0.417000	1.0080	0
51	19	WAT	610	TIP3	H2	HT	0.417000	1.0080	0
52	20	WAT	644	TIP3	OH2	OT	-0.834000	15.9994	0
53	21	WAT	644	TIP3	H1	HT	0.417000	1.0080	0
54	22	WAT	644	TIP3	H2	HT	0.417000	1.0080	0
55	23	WAT	803	TIP3	OH2	OT	-0.834000	15.9994	0
56	24	WAT	803	TIP3	H1	HT	0.417000	1.0080	0
57	25	WAT	803	TIP3	H2	HT	0.417000	1.0080	0
58	26	WAT	873	TIP3	OH2	OT	-0.834000	15.9994	0
59	27	WAT	873	TIP3	H1	HT	0.417000	1.0080	0
60	28	WAT	873	TIP3	H2	HT	0.417000	1.0080	0

图 3 PSF 文件语法高亮演示（.psf 格式）

## 3.2 Amber/AmberTools 文件格式

### 3.2.1 Amber 拓扑文件（PRMTOP）

PRMTOP（Parameter and Topology File）是 Amber 分子动力学软件包中的核心拓扑文件格式。该文件采用特殊的格式化结构，包含了分子系统的全部力场参数和拓扑信息。**md-highlighter** 能够识别其中的数据块标签、原子信息区域和参数定义，为用户提供清晰的视觉分割。

**高亮特性：**格式标签、数据块、原子信息、参数区域标识清晰

**应用场景：**Amber 仿真、拓扑分析、参数验证

### 3.2.2 Amber 参数版本 7 格式 (PARM7)

PARM7 是 Amber 新版本中使用的拓扑文件格式，与 PRMTOP 功能相似但采用了更加细致的数据组织结构。该格式提供了更好的可读性和更高的数据精度，支持更复杂的分子系统描述。

**高亮特性：**数据标签、参数分组、精度指示符、版本信息清晰显示

**应用场景：**现代 Amber 仿真、高精度计算、跨平台兼容

```
BONDS
CG1N1  CG3C50  400.00      1.4700 ! Lig , from CG1N1 CG321,
CG2R57  CG3C50  350.00      1.5100 ! Lig , from CG2R51 CG3C51
CG2R57  NG2RC0  400.00      1.3710 ! Lig , from CG2R51 NG2RC0
CG3C50  CG3C51  195.00      1.5180 ! Lig , from CG3C50 CG3C51
CG3C50  OG3C51  350.00      1.4250 ! Lig , from CG3C51 OG3C51
NG2R62  NG2RC0  420.00      1.3200 ! Lig , from NG2R62 NG2R62

ANGLES
CG3C50  CG1N1  NG1T1      21.20      180.00 ! Lig , from CG321
CG2R51  CG2R57  CG3C50     115.00      109.00 ! Lig , from CG2R51
CG2R51  CG2R57  NG2RC0     130.00      108.20 ! Lig , from CG2R51
CG3C50  CG2R57  NG2RC0     170.00      112.00 ! Lig , from CG3C52
...

DIHEDRALS
CG2R57  CG2R51  CG2R51  CG2RC0      2.0000  2  180.00 ! Lig ,
CG2R57  CG2R51  CG2R51  HGR51       1.5000  2  180.00 ! Lig ,
CG2R51  CG2R51  CG2R57  CG3C50      4.0000  2  180.00 ! Lig ,
CG2R51  CG2R51  CG2R57  NG2RC0     16.0000  2  180.00 ! Lig ,
HGR51   CG2R51  CG2R57  CG3C50      2.9000  2  180.00 ! Lig ,
HGR51   CG2R51  CG2R57  NG2RC0      3.7000  2  180.00 ! Lig ,
CG2R51  CG2R51  CG2RC0  CG2R64      3.0000  2  180.00 ! Lig ,
HGR51   CG2R51  CG2RC0  CG2R64      2.8000  2  180.00 ! Lig ,
CG2R51  CG2R57  CG3C50  CG1N1       3.5914  2  180.00 ! Lig ,
CG2R51  CG2R57  CG3C50  CG3C51       0.3500  3  180.00 ! Lig ,
CG2R51  CG2R57  CG3C50  OG3C51       0.2800  1  180.00 ! Lig ,
CG2R51  CG2R57  CG3C50  OG3C51       0.9800  2  180.00 ! Lig ,
CG2R51  CG2R57  CG3C50  OG3C51       1.7500  3  180.00 ! Lig ,
...

IMPROPERS

END
```

图 4 CHARMM PRM 参数文件语法高亮演示（.prm 格式）

### 3.2.3 Amber 库文件（LIB）

LIB 文件是 Amber 中用于存储残基库信息的文件格式，包含了原子类型、电荷分布、键连接等详细信息。这种文件在建立复杂分子系统拓扑时起关键作用。md-highlighter 为 LIB 文件提供了精确的语法识别，能够突出显示单元定义、原子列表和库命令。

**高亮特性：**单元定义、原子列表、连接信息、库命令突出显示

**应用场景：**库文件开发、残基定义、参数优化

```
1 %VERSION VERSION_STAMP = V0001.000 DATE = 03/25/23 23:14:47
2 %FLAG TITLE
3 %FORMAT(20a4)
4 default_name
5 %FLAG POINTERS
6 %FORMAT(10I8)
7 64715 18 62057 2598 5752 3511 11559 11124 0 0
8 107514 20278 2598 3511 11124 67 152 192 38 0
9 0 0 0 0 0 0 0 1 24 0
10 0
11 %FLAG ATOM_NAME
12 %FORMAT(20a4)
13 N H1 H2 H3 CA HA CB HB CG1 HG11HG12HG13CG2 HG21HG22HG23C O N H
14 CA HA CB HB2 HB3 CG OD1 OD2 C O N CD HD2 HD3 CG HG2 HG3 CB HB2 HB3
15 CA HA C O N H CA HA CB HB2 HB3 CG HG2 HG3 CD OE1 OE2 C O N
16 H CA HA CB HB CG2 HG21HG22HG23CG1 HG12HG13CD1 HD11HD12HD13C O N H
17 CA HA CB HB2 HB3 CG HG2 HG3 CD OE1 OE2 C O N H CA HA CB HB2 HB3
18 CG HG2 HG3 CD OE1 OE2 C O N H CA HA CB HB2 HB3 OG HG C O N
```

图 5 Amber PRMTOP 文件语法高亮演示（.prmtop 格式）

```
1 %VERSION VERSION_STAMP = V0001.000 DATE = 09/26/23 11:05:20
2 %FLAG CTITLE
3 %FORMAT(20a4)
4
5 %FLAG POINTERS
6 %FORMAT(10I8)
7 12834 18 10338 2448 11590 2832 14448 7776 0 0
8 44440 2182 2448 2832 7776 23 42 71 0 0
9 0 0 0 0 0 0 0 1 134 0
10 0
11 %FLAG FORCE_FIELD_TYPE
12 %FORMAT(i2,a78)
13 1 CHARMM36 ALL-ATOM FORCE FIELD
14 %FLAG ATOM_NAME
15 %FORMAT(20a4)
16 N C12 H12AH12BC13 H13AH13BH13CC14 H14AH14BH14CC15 H15AH15BH15CC11 H11AH11BP
17 O13 O14 O12 O11 C1 HA HB C2 HS O21 C21 O22 C22 H2R H2S C3 HX HY O31 C31
18 O32 C32 H2X H2Y C23 H3R H3S C24 H4R H4S C25 H5R H5S C26 H6R H6S C27 H7R H7S C28
19 H8R H8S C29 H91 C210H101C211H11RH11SC212H12RH12SC213H13RH13SC214H14RH14SC215H15R
20 H15SC216H16RH16SC217H17RH17SC218H18RH18SH18TC33 H3X H3Y C34 H4X H4Y C35 H5X H5Y
```

图 6 Amber PARM7 文件语法高亮演示（.parm7 格式）

### 3.2.4 Amber 预处理输入文件（PREPIN）

PREPIN 文件是 Amber 中用于定义非标准残基的预处理输入文件。该格式包含残基的几何结构、原子类型、电荷分布和连接信息，用于生成新的残基库条目。md-highlighter 能够识别其中的各种定义区块和参数设置。

**高亮特性：**残基定义、原子坐标、电荷分配、连接关系突出显示

**应用场景：**非标准残基建模、残基库扩展、参数化工作

### 3.2.5 Amber 力场修改文件（FRCMOD）

FRCMOD 文件用于修改或扩展现有的 Amber 力场参数。该文件格式允许用户添加新的原子类型、修改现有参数或定义新的相互作用项。md-highlighter 提供了清晰的参数分类和数值高亮。

**高亮特性：**参数修改、原子类型定义、力场扩展信息清晰组织

```
1  !!index array str
23  "PHE"
24  "PRO"
25  "SER"
26  "THR"
27  "TRP"
28  "TVR"
29  "VAL"
30  !entry.ALA.unit.atoms table str name str type int typex int resx int flags int
    seq int elmnt dbl chg
31  "N" "N" 0 1 131072 1 7 -0.415700
32  "H" "H" 0 1 131072 2 1 0.271900
33  "CA" "CX" 0 1 131072 3 6 0.033700
34  "HA" "H1" 0 1 131072 4 1 0.082300
35  "CB" "CT" 0 1 131072 5 6 -0.182500
36  "HB1" "HC" 0 1 131072 6 1 0.060300
37  "HB2" "HC" 0 1 131072 7 1 0.060300
38  "HB3" "HC" 0 1 131072 8 1 0.060300
39  "C" "C" 0 1 131072 9 6 0.597300
40  "O" "O" 0 1 131072 10 8 -0.567900
41  !entry.ALA.unit.atomsptinfo table str pname str ptype int ptypex int peLmnt dbl
    pchg
42  "N" "N" 0 -1 0.0
43  "H" "H" 0 -1 0.0
44  "CA" "CX" 0 -1 0.0
45  "HA" "H1" 0 -1 0.0
46  "CB" "CT" 0 -1 0.0
47  "HB1" "HC" 0 -1 0.0
48  "HB2" "HC" 0 -1 0.0
49  "HB3" "HC" 0 -1 0.0
50  "C" "C" 0 -1 0.0
51  "O" "O" 0 -1 0.0
52  !entry.ALA.unit.boundingBox array dbl
53  -1.000000
54  0.0
55  0.0
56  0.0
57  0.0
58  !entry.ALA.unit.childsequence single int
59  2
```

图 7 Amber LIB 文件语法高亮演示 (.lib 格式)

```
1  0 0 2
2
3  This is a remark line
4  molecule.res
5  TYM INT 0
6  CORRECT OMIT DU BEG
7  0.0000
8  1 DUMM DU M 0 -1 -2 0.000 .0 .0 .00000
9  2 DUMM DU M 1 0 -1 1.449 .0 .0 .00000
10 3 DUMM DU M 2 1 0 1.523 111.21 .0 .00000
11 4 N N M 3 2 1 1.540 111.208 -180.000 -0.784327
12 5 H H E 4 3 2 1.011 127.816 -52.528 0.404780
13 6 CA CX M 4 3 2 1.456 19.360 -121.187 0.084200
14 7 CB CT 3 6 4 3 1.539 111.990 39.865 0.000930
15 8 CG CA S 7 6 4 1.513 116.601 53.445 -0.316457
16 9 CD1 CA B 8 7 6 1.395 120.882 -79.430 -0.043509
17 10 CE1 CA B 9 8 7 1.389 121.402 -176.679 -0.322452
18 11 CZ C B 10 9 8 1.386 119.862 -0.177 0.579275
19 12 CE2 CA B 11 10 9 1.392 120.129 -0.254 -0.322452
20 13 CD2 CA S 12 11 10 1.400 119.556 0.351 -0.043509
21 14 HD2 HA E 13 12 11 1.080 119.362 -179.517 0.072836
22 15 HE2 HA E 12 11 10 1.079 120.147 -179.957 0.104346
23 16 OH O E 11 10 9 1.383 119.350 178.170 -0.763539
24 17 HE1 HA E 10 9 8 1.077 120.511 -179.073 0.104346
25 18 HD1 HA E 9 8 7 1.074 119.028 4.519 0.072836
26 19 HB2 HC E 7 6 4 1.087 109.488 176.075 0.019836
27 20 HB3 HC E 7 6 4 1.090 107.863 -67.968 0.019836
28 21 HA H1 E 6 4 3 1.091 110.101 -80.299 0.039982
29 22 C C M 6 4 3 1.517 109.771 162.828 0.606549
30 23 O O E 22 6 4 1.229 120.422 -6.524 -0.513506
31
32
33 LOOP
34 CD2 CG
35
36 IMPROPER
37 CD2 CD1 CG CB
38 CG CE1 CD1 HD1
39 CZ CD1 CE1 HE1
```

图 8 Amber PREPIN 文件语法高亮演示 (.prepin 格式)



```
1 OL15 force field for DNA (99bsc0-betaOL1-eps-zetaOL1-chiOL4)
  see http://ffol.upol.cz
2 MASS
3 C7 12.01      0.878      sp3 aliphatic C
4 C2 12.01      0.360      sp2 C 5 memb.ring in
  purines
5 C1 12.01      0.360      sp2 C pyrimidines in
  pos. 5 & 6
6 CJ 12.01
7
8 BOND
9 C7-CT 310.0    1.526      JCC, 7, (1986), 230; AA, SUGARS
10 C7-H1 340.0    1.090      changed from 331 bsd on NMA
  nmodes; AA, RIBOSE
11 C7-OH 320.0    1.410      JCC, 7, (1986), 230; SUGARS
12 C7-OS 320.0    1.410      JCC, 7, (1986), 230; NUCLEIC ACIDS
13 C2-H5 367.0    1.080      changed from 340. bsd on C6H6
  nmodes; ADE, GUA
14 C2-N* 440.0    1.371      JCC, 7, (1986), 230; ADE, GUA
15 C2-NB 529.0    1.304      JCC, 7, (1986), 230; ADE, GUA
16 C -C1 410.0    1.444      JCC, 7, (1986), 230; THY, URA
17 CA-C1 427.0    1.433      JCC, 7, (1986), 230; CYT
18 C1-C1 549.0    1.350      JCC, 7, (1986), 230; CYT, THY, URA
19 C1-CT 317.0    1.510      JCC, 7, (1986), 230; THY
20 C1-HA 367.0    1.080      changed from 340. bsd on C6H6
  nmodes; CYT, URA
21 C1-H4 367.0    1.080      changed from 340. bsd on C6H6
  nmodes; CYT, URA
22 C1-N* 448.0    1.365      JCC, 7, (1986), 230; CYT, THY, URA
23 CJ-H1 340.0    1.090
24 CJ-CT 310.0    1.526
25 OS-CJ 320.0    1.410
26 OH-CJ 320.0    1.410
27
28 ANGLE
29 H1-C7-OH 50.0    109.50    changed based on NMA nmodes
30 H1-C7-OS 50.0    109.50    changed based on NMA nmodes
31 C7-CT-CT 40.0    109.50
32 CT-C7-CT 40.0    109.50
```

图 9 Amber FRCMOD 文件语法高亮演示（.frcmod 格式）

应用场景：力场定制、参数微调、新分子类型支持

### 3.2.6 AmberTools 输入脚本（TLEAP.IN）

tleap.in 文件是 AmberTools 中 tleap 程序的输入脚本，用于构建分子系统的拓扑结构。该脚本包含加载力场、添加分子、定义系统等命令序列。md-highlights 能够识别命令关键字、文件路径和参数设置。

高亮特性：命令关键字、文件路径、参数值、注释信息清晰区分

应用场景：系统构建、拓扑生成、批处理脚本

### 3.2.7 Antechamber 主链文件（MC）

MC 文件是 Antechamber 工具中用于定义分子主链结构的文件格式。该文件包含主链原子的标识、连接关系和几何信息，用于分子的自动参数化过程。

高亮特性：主链定义、原子标识、连接信息有序显示

应用场景：小分子参数化、主链识别、结构分析



```
1 source leaprc.protein.ff14SB
2 source leaprc.lipid21
3 source leaprc.water.tip3p
4 source leaprc.gaff
5 mem = loadpdb membrane.pdb
6 lig = loadmol2 N001_bcc.mol2
7 loadamberparams N001.frcmod
8 sys = combine {mem lig}
9 charge sys
10 addIonsRand sys Cl- 13
11 addIonsRand sys Na+ 13
12 saveamberparm sys system.prmtop system.inpcrd
```

图 10 tleap 输入脚本语法高亮演示 (.in 格式)

```
1 HEAD_NAME C10
2 PRE_HEAD_TYPE c3
3 TAIL_NAME C11
4 POST_TAIL_TYPE c3
5 OMIT_NAME C
6 OMIT_NAME C1
7 OMIT_NAME C2
8 OMIT_NAME C3
9 OMIT_NAME O
10 OMIT_NAME O1
11 OMIT_NAME C4
12 OMIT_NAME C5
13 OMIT_NAME N
14 OMIT_NAME C6
15 OMIT_NAME C7
16 OMIT_NAME C8
17 OMIT_NAME C9
18 OMIT_NAME O5
19 OMIT_NAME C20
20 OMIT_NAME C21
```

图 11 MC 主链文件语法高亮演示 (.mc 格式)

### 3.2.8 Antechamber 文件 (AC)

AC 文件是 Antechamber 工具生成的中间格式文件，主要用于小分子的电荷计算和原子类型分配。该格式包含了分子的原子连接信息、电荷分布和分子描述符。md-highlighter 可以清晰地显示这些不同类型的信息，帮助用户进行小分子参数化工作。

**高亮特性：**原子连接、电荷信息、分子描述符清晰组织

34	ATOM	32	H13	LIG	1	2.215	-4.381	1.698	0.035367	hc
35	ATOM	33	H14	LIG	1	2.223	-3.051	2.867	0.035367	hc
36	ATOM	34	H15	LIG	1	4.152	-0.381	-3.544	0.084700	h1
37	ATOM	35	H16	LIG	1	5.419	-1.405	-2.853	0.084700	h1
38	ATOM	36	H17	LIG	1	6.778	0.508	-2.255	0.075200	hx
39	ATOM	37	H18	LIG	1	5.479	1.660	-2.541	0.075200	hx
40	ATOM	38	H19	LIG	1	4.694	0.415	-5.364	0.069200	hx
41	ATOM	39	H20	LIG	1	5.812	1.421	-6.253	0.069200	hx
42	ATOM	40	H21	LIG	1	3.964	2.408	-3.994	0.053700	hc
43	ATOM	41	H22	LIG	1	3.744	2.689	-5.719	0.053700	hc
44	ATOM	42	H23	LIG	1	5.108	3.430	-4.876	0.053700	hc
45	ATOM	43	H24	LIG	1	8.270	1.660	-3.545	0.069200	hx
46	ATOM	44	H25	LIG	1	7.034	2.921	-3.761	0.069200	hx
47	ATOM	45	H26	LIG	1	8.396	1.505	-6.134	0.053700	hc
48	ATOM	46	H27	LIG	1	9.041	2.986	-5.403	0.053700	hc
49	ATOM	47	H28	LIG	1	7.452	3.003	-6.168	0.053700	hc
50	BOND	1	1	2	1	C	C1			
51	BOND	2	1	19	1	C	H			
52	BOND	3	1	20	1	C	H1			
53	BOND	4	1	21	1	C	H2			
54	BOND	5	2	3	1	C1	C2			
55	BOND	6	2	5	1	C1	C4			
56	BOND	7	2	8	1	C1	C7			
57	BOND	8	3	4	1	C2	C3			
58	BOND	9	3	22	1	C2	H3			

图 12 AC 文件语法高亮演示 (.ac 格式)

## 3.3 Gromacs 文件格式

### 3.3.1 Gromacs 坐标文件 (GRO)

GRO 文件是 Gromacs 分子动力学软件包中的标准坐标文件格式。与传统的 PDB 格式相比，GRO 格式提供了更高的精度和更紧凑的数据结构。该格式包含原子编号、残基信息、坐标数据和可选的速度信息。md-highlighter 为 GRO 文件提供了精确的语法分析，能够清晰地地区分各个数据列。

**高亮特性：**原子编号、残基信息、坐标数据、速度信息清晰划分

**应用场景：**Gromacs 仿真、坐标分析、轨迹处理

### 3.3.2 Gromacs 原子类型文件 (ATP)

ATP 文件定义了 Gromacs 中的原子类型参数，包括原子质量、电荷、原子半径等物理属性。该文件是 Gromacs 力场定义的基础组件，在构建拓扑文件时起关键作用。

**高亮特性：**原子类型名称、质量数据、电荷信息、物理参数清晰分类

**应用场景：**力场开发、原子类型定义、参数优化

### 3.3.3 Gromacs 突变拓扑文件 (MTP)

MTP 文件用于 Gromacs 中的自由能计算，定义了突变过程中如何修改分子的拓扑结构。该文件包含了初始状态、最终状态和中间状态的定义，支持复杂的化学变化模拟。

**高亮特性：**状态定义、拓扑变化、参数转换、突变路径清晰标识

```
1 Glycine aRginine prOline Methionine Alanine Cystine Serine in water
2 130532
3 36LEU N 1 6.881 6.711 3.164 -0.1011 -0.1586 -0.1580
4 36LEU H1 2 6.862 6.719 3.065 3.0704 0.7937 -0.8230
5 36LEU H2 3 6.960 6.773 3.175 0.9499 -1.6351 1.2122
6 36LEU H3 4 6.906 6.615 3.187 1.4192 0.3674 0.5447
7 36LEU CA 5 6.767 6.747 3.247 0.4908 -0.4457 0.1355
8 36LEU HA 6 6.808 6.776 3.344 -0.8993 2.2213 0.0073
9 36LEU CB 7 6.697 6.871 3.198 -0.7476 0.2926 -0.5091
10 36LEU HB1 8 6.653 6.855 3.100 -0.7087 0.7640 -0.6018
11 36LEU HB2 9 6.775 6.946 3.189 -0.5120 0.2302 0.7274
12 36LEU CG 10 6.591 6.936 3.294 1.0320 -0.2397 -0.3964
13 36LEU HG 11 6.631 6.952 3.394 -0.7702 -0.4500 0.3881
14 36LEU CD1 12 6.525 7.062 3.233 -0.7050 -0.0044 -0.0729
15 36LEU HD11 13 6.472 7.029 3.143 1.2396 0.4735 -1.4495
16 36LEU HD12 14 6.452 7.105 3.302 -1.5635 -0.0476 -0.9247
17 36LEU HD13 15 6.610 7.127 3.211 -0.5656 0.8785 2.7619
18 36LEU CD2 16 6.469 6.842 3.319 0.8838 -0.0904 -0.5937
19 36LEU HD21 17 6.429 6.817 3.221 1.8883 0.9566 -1.2982
20 36LEU HD22 18 6.504 6.756 3.376 0.1959 0.4208 0.6482
21 36LEU HD23 19 6.389 6.882 3.383 1.5141 -1.7073 1.3113
22 36LEU C 20 6.687 6.622 3.270 0.3030 0.3605 -1.0007
```

图 13 Gromacs GRO 文件语法高亮演示 (.gro 格式)

```
1 ; This force field generated by charmm2gmx.py from
2 ; multiple charmm parameter files
3 ; and multiple charmm topology files
4 ALG1 26.98154 ; Aluminum, for ALF4, ALF4-
5 BAR 137.32700 ; Barium Ion
6 BRGA1 79.90400 ; BRET, bromoethane
7 BRGA2 79.90400 ; DBRE, 1,1-dibromoethane
8 BRGA3 79.90400 ; TBRE, 1,1,1-dibromoethane
9 BRGR1 79.90400 ; BROB, bromobenzene
10 C 12.01100 ; carbonyl C, peptide backbone
11 CA 12.01100 ; aromatic C
12 CAD 112.41100 ; cadmium (II) cation
13 CAI 12.01100 ; aromatic C next to CPT in trp
14 CAL 40.08000 ; Calcium Ion
15 CC 12.01100 ; carbonyl C, asn,asp,gln,glu,cter,ct2
16 CC1A 12.01100 ; alkene conjugation
17 CC1B 12.01100 ; alkene conjugation
18 CC2 12.01100 ; alkene conjugation
19 CC201 12.01100 ; sp2 carbon in amides, aldoses
20 CC202 12.01100 ; sp2 carbon in carboxylates
```

图 14 Gromacs ATP 原子类型文件语法高亮演示 (.atp 格式)

应用场景：自由能计算、突变模拟、化学反应研究

### 3.3.4 Gromacs 终端数据库文件 (TDB)

TDB 文件定义了 Gromacs 中蛋白质终端的处理方式，包括 N-终端和 C-终端的质子化状态和特殊修饰。该文件在构建蛋白质系统拓扑时提供终端处理的

```
2  [ A2B ] ; Ala -> Aspp
3
4
5  [ morphes ]
6      N      NH1 ->      N      NH1
7      HN      H ->      HN      H
8      CA      CT1 ->      CA      CT1
9      HA      HB1 ->      HA      HB1
10     CB      CT3 ->      CB      CT2
11     HB1      HA3 -> HB.gone1  DUM_HA3
12     HB2      HA3 ->      HB1      HA2
13     HB3      HA3 ->      HB2      HA2
14     C      C ->      C      C
15     O      O ->      O      O
16     DCG      DUM_CD ->      CG      CD
17     DOD1      DUM_OB ->      OD1      OB
18     DOD2      DUM_OH1 ->      OD2      OH1
19     HV      DUM_H ->      HD2      H
20
21  [ atoms ]
22      N      NH1  -0.470000      1  14.007000      NH1  -0.470000  14.
23      007000 ; types == | charge ==
24      HN      H      0.310000      1  1.008000      H      0.310000  1.
25      008000 ; types == | charge ==
26      CA      CT1  0.070000      1  12.011000      CT1  0.070000  12.
27      011000 ; types == | charge ==
28      HA      HB1  0.090000      1  1.008000      HB1  0.090000  1.
29      008000 ; types == | charge ==
30      CB      CT3 -0.270000      1  12.011000      CT2 -0.210000  12.
31      011000 ; types != | charge !=
32      HB1      HA3  0.090000      1  1.008000      DUM_HA3 0.000000  1.
33      008000 ; types != | charge !=
34      HB2      HA3  0.090000      1  1.008000      HA2  0.090000  1.
35      008000 ; types != | charge ==
36      HB3      HA3  0.090000      1  1.008000      HA2  0.090000  1.
37      008000 ; types != | charge ==
38      C      C      0.510000      1  12.011000      C      0.510000  12.
39      011000 ; types == | charge ==
40      O      O      -0.510000      1  15.999000      O      -0.510000  15.
41      999000 ; types == | charge ==
```

图 15 Gromacs MTP 突变拓扑文件语法高亮演示（.mtp 格式）

标准化规则。

**高亮特性：**终端类型、修饰定义、质子化状态、原子添加规则清晰分类

**应用场景：**蛋白质建模、pH 效应模拟、终端修饰研究

## 3.4 小分子文件格式

### 3.4.1 MOL2 分子结构文件（MOL2）

MOL2 是 Tripos 公司开发的小分子结构文件格式，在药物设计和分子建模领域广泛使用。该格式能够存储分子的完整信息，包括原子坐标、电荷分布、原子类型和键连接关系。**md-highlighter** 为 MOL2 文件提供了细致的语法高亮，能够突出显示不同的数据块和关键信息。

**高亮特性：**分子信息、原子类型、键连接、电荷数据突出显示

**应用场景：**小分子建模、药物设计、化学结构分析

```
1 ; CHARMM-port for GROMACS
2 ; created with charmm2gmx version 0.7.dev45+g7b82040.d20221208 on 2022-12-08 10:52:46.
372458
3 ; Code: https://gitlab.com/awacha/charmm2gmx
4 ; Documentation: https://awacha.gitlab.com/charmm2gmx
5 ; Charmm2GMX written by Andr s Wacha, based on the original port by
6 ; E. Prabhu Raman, Justin A. Lemkul, Robert Best and Alexander D. MacKerell, Jr.
7 ; Termini database from the CHARMM force field
8
9 [ None ]
10 ; Empty, do-nothing terminus
11
12 ; residue topologies from file toppar_c36_jul22/top_all35_ethers.rtf
13
14 [ HYD2 ]
15 ; Complete terminal methyl group adjacent to ether O
16 [ delete ]
17 HA2
18 HA1
19 CA
20 HA3
21 [ replace ]
22 C2 CC33A 12.011000 -0.1000
23 H2A HCA3A 1.008000 0.0900
24 H2B HCA3A 1.008000 0.0900
25 [ add ]
26 1 5 H2C C2 H2A H2B O1
27 HCA3A 1.008000 0.0900 -1
28
29 [ MET2 ]
30 ; Append terminal methyl group adjacent to CH2
31 [ delete ]
32 H2C
33 [ add ]
34 1 5 CA C2 H2A H2B O1
35 CC33A 12.011000 -0.2700 -1
36 3 4 HA CA C2 H2A
37 HCA3A 1.008000 0.0900 -1
```

图 16 Gromacs TDB 终端数据库文件语法高亮演示 (.tdb 格式)

### 3.4.2 结构数据文件 (SDF)

SDF (Structure Data File) 是化学信息学中广泛使用的分子结构数据格式。该格式能够存储多个分子的结构信息,包括原子坐标、键连接、立体化学信息和分子属性数据。SDF 文件在药物发现和化学数据库管理中应用广泛。

**高亮特性:** 分子数据块、原子坐标、键连接表、属性信息清晰组织

**应用场景:** 化学数据库、药物筛选、分子属性分析

## 3.5 增强采样文件格式

### 3.5.1 PLUMED 输入文件

PLUMED 是一个功能强大的增强采样库,广泛用于分子动力学模拟中的自由能计算和集体变量分析。PLUMED 输入文件使用特殊的语法结构,包含关键字、变量定义、函数参数和注释信息。md-highlighter 能够准确识别这些不同的语法元素,帮助用户更高效地编写和调试 PLUMED 脚本。

**高亮特性:** 关键字、变量定义、函数参数、注释清晰区分

```
1  @<TRIPOS>MOLECULE
2  LIG
3  14 13 0 0 0
4  SMALL
5  GASTEIGER
6
7  @<TRIPOS>ATOM
8      1 C      0.9230 -0.0680  0.0650 C.3  1 UNL1  -0.0444
9      2 N      2.4250 -0.0640  0.0610 N.3  1 UNL1  0.2106
10     3 C      2.9280 -0.4100 -1.3110 C.3  1 UNL1  -0.0444
11     4 C      2.9280  1.2950  0.4570 C.3  1 UNL1  -0.0444
12     5 O      2.8820 -0.9950  0.9580 O.co2 1 UNL1  -0.7762
13     6 H      0.5790  0.6790 -0.6550 H  1 UNL1  0.0776
14     7 H      0.5950  0.1750  1.0790 H  1 UNL1  0.0776
15     8 H      0.5950 -1.0730 -0.2150 H  1 UNL1  0.0776
16     9 H      2.5540  0.3420 -2.0110 H  1 UNL1  0.0776
17    10 H      2.5540 -1.4060 -1.5590 H  1 UNL1  0.0776
18    11 H      4.0210 -0.4090 -1.2720 H  1 UNL1  0.0776
19    12 H      2.5540  2.0210 -0.2690 H  1 UNL1  0.0776
20    13 H      4.0210  1.2550  0.4550 H  1 UNL1  0.0776
21    14 H      2.5540  1.5050  1.4620 H  1 UNL1  0.0776
22  @<TRIPOS>UNITY_ATOM_ATTR
23  2 1
24  charge 1
25  5 1
26  charge -1
27  @<TRIPOS>BOND
28      1 1 2 1
29      2 1 6 1
30      3 1 7 1
31      4 1 8 1
32      5 2 3 1
33      6 2 4 1
34      7 2 5 1
35      8 3 9 1
36      9 3 10 1
37     10 3 11 1
38     11 4 12 1
39     12 4 13 1
40     13 4 14 1
```

图 17 MOL2 文件语法高亮演示 (.mol2 格式)

应用场景：增强采样、集体变量定义、自由能计算

## 3.6 实际应用指南

### 3.6.1 文件验证与调试

通过语法高亮快速定位文件格式问题：

- 识别格式不正确的坐标数据
- 发现缺失的原子类型定义
- 验证残基编号的连续性
- 检查键连接的完整性

### 3.6.2 跨格式 workflow

md-highlighter 支持完整的分子模拟 workflow：

```
1  LIG
2  PyMOL3.1          3D          0
3
4  14 13 0 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
5      2.4250 -0.0640 0.0610 N 0 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
6      0.9230 -0.0680 0.0650 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
7      2.9280 -0.4100 -1.3110 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
8      2.9280 1.2950 0.4570 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
9      2.8820 -0.9950 0.9580 O 0 5 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
10     0.5790 0.6790 -0.6550 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
11     0.5950 0.1750 1.0790 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
12     0.5950 -1.0730 -0.2150 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
13     2.5540 0.3420 -2.0110 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
14     2.5540 -1.4060 -1.5590 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
15     4.0210 -0.4090 -1.2720 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
16     2.5540 2.0210 -0.2690 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
17     4.0210 1.2550 0.4550 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
18     2.5540 1.5050 1.4620 H 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
19     1 3 1 0 0 0 0
20     1 4 1 0 0 0 0
21     1 5 1 0 0 0 0
22     1 2 1 0 0 0 0
23     2 6 1 0 0 0 0
24     2 7 1 0 0 0 0
25     2 8 1 0 0 0 0
26     3 9 1 0 0 0 0
27     3 10 1 0 0 0 0
28     3 11 1 0 0 0 0
29     4 12 1 0 0 0 0
30     4 13 1 0 0 0 0
31     4 14 1 0 0 0 0
32 M END
33 $$$$
```

图 18 SDF 结构数据文件语法高亮演示 (.sdf 格式)

```
1  # Define the groups
2  ligc2: GROUP ATOMS=16069
3  popc: GROUP NDX_FILE=index.ndx NDX_GROUP=MEMB
4  com: COM ATOMS=popc
5  dist: DISTANCE ATOMS=ligc2,com
6  # Add a Lower wall at (2.3 nm)
7  restraint: LOWER_WALLS ARG=dist AT=2.3 KAPPA=150.0 EXP=2 EPS=1 OFFSET=0
8  PRINT ARG=restraint.bias FILE=bias
```

图 19 PLUMED 输入文件语法高亮演示 (.plumed.dat 格式)

- PDB → PSF → 参数文件的 NAMD 流程
- PDB → GRO → TOP 的 Gromacs 流程
- MOL2 → AC → PRMTOP 的 Amber 流程
- PLUMED 集成的增强采样流程

### 3.6.3 最佳实践建议

- 使用 Atom One Light 主题获得最佳显示效果
- 自定义颜色方案以适应个人偏好

- 结合 VS Code 的搜索功能快速定位特定原子或残基
- 利用折叠功能管理大型文件的复杂结构

## 四、 未来发展

### 4.1 计划增强

**md-highlighter** 扩展持续发展，计划改进包括：

- 为新兴仿真工具提供额外文件格式支持
- 专为氨基酸类型设计的自定义颜色方案
- 增强的错误检测和验证特性
- 与分子可视化工具的集成
- 超大文件的性能优化

### 4.2 社区贡献

扩展欢迎社区贡献：

- 新文件格式定义
- 改进的语法规则
- 错误报告和特性请求
- 文档改进

### 4.3 总结

**md-highlighter** 扩展通过为计算化学和结构生物学中使用的多样化文件格式提供全面、智能的语法高亮，显著改善了分子仿真工作流程。通过其语义颜色编码系统、一致的跨格式方法和广泛的格式覆盖，该扩展提高了生产力、减少了错误，并改善了从事分子动力学仿真的研究人员和开发人员的整体用户体验。

无论处理简单的坐标文件还是复杂的力场参数，**md-highlighter** 扩展都提供了高效准确文件编辑所需的视觉清晰度。