

Anhang A: Abkürzungen

Abb.	Abbildung
Abst.	Abstand
ADP	<i>atomic deviation parameter</i> , atomare Verrückungsparameter
bzgl.	bezüglich
bzw.	beziehungsweise
ca.	<i>circa</i> , ungefähr
CD	Cyclodextrin
CHARMM	Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics
<i>cons. harmon.</i>	<i>harmonic constraints</i>
<i>coul</i>	Coulomb
CPU	Central Processor Unit
DFG	deutsche Forschungsgemeinschaft
d. h.	das heißt
<i>Ens.</i>	Ensemble
et al.	<i>et alii</i> , und weitere
<i>Exp.</i>	Experiment
<i>harm.</i>	<i>harmonic constraints</i>
MB	MegaByte
MD	Molekulardynamik
MIPS	Millionen Instruktionen pro Sekunde
<i>mol</i>	molekular
Res., <i>res</i>	Reservoir
rms	<i>root mean square</i> , die Wurzel der mittleren Quadrate
<i>rot</i>	durch Rotation
SGI	Silicon Graphics Incorporated
<i>Simu.</i>	Simulation
sog.	sogenannt
<i>sym</i>	symmetrische Anfangsbedingungen
Tab.	Tabelle
<i>trans</i>	durch Translation
vgl.	vergleiche
W'keit	Wahrscheinlichkeit
z. B.	zum Beispiel
ZEDAT	Zentraleinrichtung für Datenverarbeitung (der FU Berlin)