

1. Record Nr.	UNISA996309058203316
Autore	Schoonjans Steven
Titolo	Modalpartikeln als multimodale Konstruktionen : eine korpusbasierte Kookkurrenzanalyse von Modalpartikeln und Gestik im Deutschen // Steven Schoonjans
Pubbl/distr/stampa	Berlin, Germany : , : De Gruyter, , 2018 ©2018
ISBN	3-11-056378-9 3-11-056626-5
Descrizione fisica	1 online resource (332 pages) : illustrations, tables
Collana	Empirische Linguistik / Empirical Linguistics, , 2198-8676 ; ; Band 8
Disciplina	401.4
Soggetti	Modality (Linguistics) Electronic books.
Lingua di pubblicazione	Tedesco
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Nota di bibliografia	Includes bibliographical references.
Nota di contenuto	Frontmatter -- Vorwort und Danksagung -- Inhalt -- 1. Einführung -- 2. Modalpartikeln -- 3. Multimodalität -- 4. Konstruktionen -- 5. Angaben zur Korpusstudie -- 6. Anmerkungen zur Gestikanalyse -- 7. Fallstudie 1: Kopfschütteln -- 8. Fallstudie 2: Intersubjektive Zeigegesten -- 9. Weitere abtönende Gesten -- 10. Weitere abtönungslisierte Gesten -- 11. Kombinatorik und Wiederholung -- 12. Distribution der abtönenden Gesten -- 13. Die Grammatikalisierung abtönender Gesten -- 14. Abtönungsformen als multimodale Konstruktionen? -- 15. Fazit -- Literaturverzeichnis -- Anhang
Sommario/riassunto	Ähnlich wie Modalpartikeln (Abtönungspartikeln) können Gesten unter anderem dazu verwendet werden, bestimmte Nuancen oder Stellungnahmen zur Äußerung zu vermitteln. Ihre Interaktion mit den Modalpartikeln wurde aber bislang nicht näher untersucht. Dieses Buch legt anhand eines Korpus von Fernseh- und Parlamentsmaterialien für sieben Modalpartikeln des Deutschen (denn, doch, eben, eigentlich, einfach, halt, ja) dar, mit welchen Gesten sie kombiniert werden und welche externen Faktoren dieses Kookkurrenzverhalten beeinflussen. Zwei dieser Kombinationsmuster werden im Fallstudienteil ausführlicher besprochen: die Kombination von einfach mit einem

Kopfschütteln und die Kombination von ja mit der sogenannten intersubjektiven Zeigegeste. Dabei wird auch auf die Grammatikalisierung dieser Gesten eingegangen, sowie auf die Frage, inwiefern diese Kookkurrenzmuster als multimodale Konstruktionen im Sinne der Konstruktionsgrammatik zu betrachten sind. Das Buch deckt also ein breites Themenfeld ab und wirft ein neues Licht auf Fragen aus der Partikelforschung, der Gestenforschung, der Grammatikalisierungsforschung und der Konstruktionsgrammatik.

2. Record Nr.	UNINA990004827090403321
Autore	Miller, Henry <1891-1980>
Titolo	Primavera nera / Henry Miller
Pubbl/distr/stampa	Milano, : Feltrinelli, 1968
Descrizione fisica	271 p. ; 20 cm
Collana	I narratori di Feltrinelli ; 126
Locazione	FLFBC
Collocazione	813.52 MILH 02 (1)
Lingua di pubblicazione	Italiano
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia

3. Record Nr.	UNINA9911019196303321
Titolo	Computational modeling for homogeneous and enzymatic catalysis : a knowledge-base for designing efficient catalysts / / edited by Keiji Morokuma and Djamaladdin G. Musaev
Pubbl/distr/stampa	Weinheim, : Wiley-VCH Chichester, : John Wiley [distributor], 2008
ISBN	9786612372230 9781282372238 1282372238 9783527621965 3527621962 9783527621972 3527621970
Descrizione fisica	1 online resource (400 p.)
Altri autori (Persone)	MorokumaK <1934-2017.> (Keiji) MusaevDjamaladdin G
Disciplina	660.2995
Soggetti	Catalysis - Computer simulation Catalysts
Lingua di pubblicazione	Inglese
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Note generali	Description based upon print version of record.
Nota di bibliografia	Includes bibliographical references and index.
Nota di contenuto	Computational Modeling for Homogeneous and Enzymatic Catalysis; Contents; Preface; List of Contributors; 1 Computational Insights into the Structural Properties and Catalytic Functions of Selenoprotein Glutathione Peroxidase (GPx); 1.1 Introduction; 1.2 Catalytic Functions; 1.2.1 Peroxidase Activity; 1.2.2 Reductase Activity; 1.3 Computational Details; 1.3.1 Computational Methods; 1.3.2 Computational Models; 1.4 Results and Discussion; 1.4.1 Refinement of the Active Site; 1.4.2 Catalytic Functions: Peroxidase Activity 1.4.3 Catalytic Functions: Effect of the Surrounding Protein on the Peroxidase Activity1.4.3.1 Hydrogen Peroxide Coordination; 1.4.3.2 Formation of Selenenic Acid [E-Se-OH]; 1.4.4 Catalytic Functions: Reductase Activity; 1.4.4.1 Peroxynitrite/Peroxynitrous Acid (ONOO /ONOOH) Coordination; 1.4.4.2 Oxidation Pathway; 1.4.4.3 Nitration

Pathways; 1.5 Summary; References; 2 A Comparison of Tetrapyrrole Cofactors in Nature and their Tuning by Axial Ligands; 2.1 Introduction; 2.2 Methodology; 2.3 Comparison of the Intrinsic Chemical Properties of the Tetrapyrroles; 2.3.1 Introduction; 2.3.2 Spin States; 2.3.3 Tetrapyrroles Prefer Their Native Ions; 2.3.4 Cavity Size and Flexibility of the Tetrapyrroles; 2.3.5 Cytochrome-like Electron Transfer; 2.3.6 Stability of a Metal-Carbon Bond; 2.3.7 Metallation Reaction; 2.4 Tuning of Tetrapyrrole Structure and Function by Axial Ligands; 2.4.1 Introduction; 2.4.2 Importance of the Lower Axial Ligand for B(12) Chemistry; 2.4.3 Lower Axial Ligand in Cofactor F430; 2.4.4 Importance of Axial Ligands for the Globins; 2.4.5 Role of Axial Ligands for the Cytochromes; 2.4.6 Role of the Axial Ligand in Heme Enzymes; 2.4.7 Tuning the His Ligand by Hydrogen Bonds in Heme Proteins; 2.4.8 Axial Ligand in Chlorophylls; 2.5 Concluding Remarks; References; 3 Modeling of Mechanisms for Metalloenzymes where Protons and Electrons Enter or Leave; 3.1 Introduction; 3.2 Energy Diagrams; 3.2.1 Photosystem II; 3.2.2 Cytochrome c Oxidase; 3.2.3 Nitric Oxide Reduction; 3.2.4 NiFe-hydrogenase; 3.2.5 Molybdenum CO Dehydrogenase; 3.3 Conclusions; References; 4 Principles of Dinitrogen Hydrogenation: Computational Insights; 4.1 Introduction; 4.2 Reaction Mechanism of the Coordinated Dinitrogen Molecule in Di-zirconocene-N(2) Complexes with a Hydrogen Molecule; 4.2.1 Mechanism of the Reaction (3); 4.2.2 Mechanisms of the Reactions (4) and (5); 4.3 Factors Controlling the N(2) Coordination Modes in the Di-zirconocene-N(2) Complexes; 4.4 Why the $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)_2\text{Hf}(\text{N}_2)]$ Complex Cannot Add a H(2) Molecule to the Side-on Coordinated N(2), while its Zr- and Hf-analogs Can; 4.4.1 Relative Stability of the Lowest Singlet (S) and Triplet (T) Electronic States of the Complexes $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)_2\text{M}(\text{N}_2)]$ (for M = Ti, Zr, and Hf, and n = 0 and 4)

Sommario/riassunto

Here, the world's most active and productive computational scientists from academia and industry present established, effective and powerful tools for understanding catalysts. With its broad scope -- nitrogen fixation, polymerization, C-H bond activation, oxidations, biocatalysis and much more -- this book represents an extensive knowledge base for designing efficient catalysts, allowing readers to improve the performance of their own catalysts.