

1. Record Nr.	UNINA9910143194903321
Autore	Young David C. <1964->
Titolo	Computational chemistry [[electronic resource] ] : a practical guide for applying techniques to real-world problems // David C. Young
Pubbl/distr/stampa	New York, : Wiley, c2001
ISBN	1-280-54168-7 9786610541683 0-470-88008-2 0-471-45843-0 0-471-22065-5
Descrizione fisica	1 online resource (408 p.)
Disciplina	542.85 542/.85
Soggetti	Chemistry - Computer simulation Chemistry - Data processing Chemistry - Mathematics Electronic books.
Lingua di pubblicazione	Inglese
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Note generali	Includes glossary.
Nota di bibliografia	Includes bibliographical references and index.
Nota di contenuto	CONTENTS; PREFACE; ACKNOWLEDGMENTS; SYMBOLS USED IN THIS BOOK; 1. Introduction; 1.1 Models, Approximations, and Reality; 1.2 How Computational Chemistry Is Used; Bibliography; Part I. BASIC TOPICS; 2. Fundamental Principles; 2.1 Energy; 2.2 Electrostatics; 2.3 Atomic Units; 2.4 Thermodynamics; 2.5 Quantum Mechanics; 2.6 Statistical Mechanics; Bibliography; 3. Ab initio Methods; 3.1 Hartree-Fock Approximation; 3.2 Correlation; 3.3 Moller-Plesset Perturbation Theory; 3.4 Configuration Interaction; 3.5 Multi-configurational Self-consistent Field; 3.6 Multi-reference Configuration Interaction 3.7 Coupled Cluster3.8 Quantum Monte Carlo Methods; 3.9 Natural Orbitals; 3.10 Conclusions; Bibliography; 4. Semiempirical Methods; 4.1 Huckel; 4.2 Extended Huckel; 4.3 PPP; 4.4 CNDO; 4.5 MINDO; 4.6 MNDO; 4.7 INDO; 4.8 ZINDO; 4.9 SINDO1; 4.10 PRDDO; 4.11 AMI; 4.12 PM3; 4.13 PM3/TM; 4.14 Fenske-Hall Method; 4.15 TNDO; 4.16 SAM1; 4.17 Gaussian Theory; 4.18 Recommendations; Bibliography; 5. Density

Functional Theory; 5.1 Basic Theory; 5.2 Linear Scaling Techniques; 5.3 Practical Considerations; 5.4 Recommendations; Bibliography; 6. Molecular Mechanics; 6.1 Basic Theory; 6.2 Existing Force Fields 6.3 Practical Considerations 6.4 Recommendations; Bibliography; 7. Molecular Dynamics and Monte Carlo Simulations; 7.1 Molecular Dynamics; 7.2 Monte Carlo Simulations; 7.3 Simulation of Molecules; 7.4 Simulation of Liquids; 7.5 Practical Considerations; Bibliography; 8. Predicting Molecular Geometry; 8.1 Specifying Molecular Geometry; 8.2 Building the Geometry; 8.3 Coordinate Space for Optimization; 8.4 Optimization Algorithm; 8.5 Level of Theory; 8.6 Recommendations; Bibliography; 9. Constructing a Z-Matrix; 9.1 Z-Matrix for a Diatomic Molecule; 9.2 Z-Matrix for a Polyatomic Molecule 9.3 Linear Molecules 9.4 Ring Systems; Bibliography; 10. Using Existing Basis Sets; 10.1 Contraction Schemes; 10.2 Notation; 10.3 Treating Core Electrons; 10.4 Common Basis Sets; 10.5 Studies Comparing Results; Bibliography; 11. Molecular Vibrations; 11.1 Harmonic Oscillator Approximation; 11.2 Anharmonic Frequencies; 11.3 Peak Intensities; 11.4 Zero-point Energies and Thermodynamic Corrections; 11.5 Recommendations; Bibliography; 12. Population Analysis; 12.1 Mulliken Population Analysis; 12.2 Lowdin Population Analysis; 12.3 Natural Bond-Order Analysis; 12.4 Atoms in Molecules 12.5 Electrostatic Charges 12.6 Charges from Structure Only; 12.7 Recommendations; Bibliography; 13. Other Chemical Properties; 13.1 Methods for Computing Properties; 13.2 Multipole Moments; 13.3 Fermi Contact Density; 13.4 Electronic Spatial Extent and Molecular Volume; 13.5 Electron Affinity and Ionization Potential; 13.6 Hyperfine Coupling; 13.7 Dielectric Constant; 13.8 Optical Activity; 13.9 Biological Activity; 13.10 Boiling Point and Melting Point; 13.11 Surface Tension; 13.12 Vapor Pressure; 13.13 Solubility; 13.14 Diffusivity; 13.15 Visualization; 13.16 Conclusions; Bibliography 14. The Importance of Symmetry

---

## Sommario/riassunto

A practical, easily accessible guide for bench-top chemists, this book focuses on accurately applying computational chemistry techniques to everyday chemistry problems. Provides nonmathematical explanations of advanced topics in computational chemistry. Focuses on when and how to apply different computational techniques. Addresses computational chemistry connections to biochemical systems and polymers. Provides a prioritized list of methods for attacking difficult computational chemistry problems, and compares advantages and disadvantages of various approximation techniques.

---

2. Record Nr.	UNINA9910787797603321
Autore	Morales Jose Antonio Perianez
Titolo	Fundamentos Del Aprendizaje y Del Lenguaje // Jose Antonio Perianez Morales and Elena Munoz Marron
Pubbl/distr/stampa	Barcelona, Spain : , : Editorial UOC, , [2013] ©2013
ISBN	84-9029-917-X
Descrizione fisica	1 recurso en linea (175 p.)
Collana	Manuales Administracion practica
Disciplina	378.16913094248
Soggetti	Learning, Psychology of
Lingua di pubblicazione	Inglese
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Note generali	Contiene indice.
Nota di contenuto	Fundamentos del aprendizaje y del lenguaje; Pagina Legal; Autores; Indice; Objetivos generales; Introduccion; Capitulo I. Bases cognitivas del aprendizaje y la memoria; Objetivos; 1. Introduccion; 1.1. Concepto actual de aprendizaje y memoria; 2. Fases del proceso de aprendizaje y memoria; 3. Aspectos cognitivos relevantes en el aprendizaje (...); 3.1. Efecto de posicion serial y organizacion del material; 3.2. El olvido; 4. Modelos teoricos y clasificaciones de la memoria; 4.1. Modelo multialmacen de Atkinson y Shifrin (...); 4.2. Clasificacion en funcion de la intencionalidad 4.3. Clasificacion en funcion del tiempo5. Clasificacion integradora del aprendizaje y la memoria; 6. Aprendizaje y memoria explicita o declarativa; 6.1. Memoria episodica; 6.2. Memoria semantica; 7. Aprendizaje y memoria implicita; 7.1. Aprendizaje no asociativo: habituacion y (...); 7.2. Priming; 7.3. Aprendizaje asociativo; 7.4. Aprendizaje y memoria procedimental; 8. Memoria de trabajo; 9. Bibliografia; Capitulo II. Bases neuroanatomicas del aprendizaje y (...); Objetivos; 1. Introduccion; 2. Aprendizaje y memoria implicita; 2.1. Aprendizaje no asociativo: habituacion y sensibilizacion 2.2. Aprendizaje y memoria perceptiva: priming2.3. Aprendizaje asociativo: condicionamiento clasico (...); 2.4. Aprendizaje y memoria procedimental; 3. Aprendizaje y memoria explicita; 3.1. Memoria relacional dependiente del hipocampo; 3.2. Aprendizaje y memoria episodica y semantica; 4. Memoria de trabajo; 4.1. Corteza prefrontal y

memoria de trabajo; 4.2. Regiones cerebrales posteriores y memoria de trabajo; 5. Bibliografía; Capítulo III. Bases cognitivas del lenguaje; Objetivos; 1. Concepto y breve revisión histórica de la (...); 2. La comprensión del lenguaje; 2.1. Percepción del lenguaje 2.2. Reconocimiento y comprensión de las palabras 2.3. Comprensión de oraciones; 2.4. Comprensión del texto/discurso; 3. Producción del lenguaje; 3.1. Producción del lenguaje oral; 3.2. Producción del lenguaje escrito; 3.3. El diálogo y la conversación; 4. Bibliografía; Capítulo IV. Bases neuroanatómicas del lenguaje; Objetivos; 1. Introducción a los modelos y bases biológicas (...); 1.1. Antecedentes históricos en el estudio de las (...); 1.2. El modelo de Wernicke-Lichtheim-Geschwind; 1.3. Hacia una nueva neuroanatomía del lenguaje; 2. Modelos actuales sobre las bases biológicas (...) 2.1. Modelos de comprensión del lenguaje 2.2. Modelos de organización léxica; 2.3. Modelos de producción del lenguaje; 3. Bibliografía

---

### Sommario/riassunto

En los seres humanos el aprendizaje está, en gran parte, mediado por el lenguaje, ya que este último constituye la principal vía de comunicación entre humanos. Ambos procesos cognitivos son fundamentales para nosotros, ya que nos permiten adquirir conocimientos, conductas y aptitudes y compartirlas y enseñarlas a otros. A lo largo de la obra se abordan los fundamentos cognitivos básicos del aprendizaje y el lenguaje, así como aquellos aspectos neuroanatómicos relevantes para la comprensión de dichos procesos. El presente libro está dirigido a todos aquellos estudiantes, docentes y profesionales que estén interesados en ampliar sus conocimientos sobre los procesos psicológicos básicos y las bases neuroanatómicas de éstos, siendo de gran utilidad tanto para psicólogos, como pedagogos, psicopedagogos, maestros, logopedas, terapeutas ocupacionales, etc.

---