

SPIS TREŚCI

Przedmowa	VII
1. Wstęp	11
2. Surowce naturalne	15
Literatura uzupełniająca	331
Internet	332
3. Modelowanie kwantowo-chemiczne	337
3.1. Wstęp	337
Literatura uzupełniająca	339
3.2. Matematyczne podstawy modelowania	340
3.2.1. Liczby rzeczywiste, urojone i zespolone	340
3.2.2. Skalary i wektory	341
3.2.3. Tensory	344
3.2.4. Macierze i wyznaczniki	344
3.2.5. Funkcje	348
3.2.6. Pochodna funkcji	349
3.2.7. Całka funkcji	352
3.2.8. Operatory	355
3.2.9. Równania różniczkowe	356
3.2.10. Szeregi	358
Literatura uzupełniająca	359
Internet	359
3.3. Fizyczne podstawy modelowania	359
3.3.1. Zmienne kinematyczne i dynamiczne	360
3.3.2. Zjawiska korpuskularne i falowe	361
3.3.3. Historia teorii kwantów	362
3.3.4. Postulaty teorii kwantów	366
3.3.5. Właściwości funkcji falowych i operatorów	370
3.3.6. Wyprowadzenie równania Schrödingera	371
3.3.7. Rozwiązania analityczne	373
3.3.8. Rozwiązania numeryczne	381
Literatura uzupełniająca	415

3.4. Numeryczne podstawy modelowania	416
3.4.1. Pliki	417
3.4.2. Modelowanie	426
3.4.3. Wizualizacja	431
3.4.4. Jednostki	436
3.5. Modelowanie składników kosmetyków i suplementów	437
3.5.1. Modelowanie przeciwutleniaczy	438
3.5.2. Deskryptory i mechanizmy	440
3.5.3. Pochodne kwasu cytrynowego	451
3.5.4. Kwas galusowy	462
3.5.5. Kwas α -liponowy i jego metabolity	468
3.5.6. Kwasy sulfenowe	476
3.5.7. Ksantony mangostanu	482
3.5.8. Adaptogeny różnicy górskiej	487
3.5.9. Resweratrol i jego pochodne	491
3.5.10. Arachidony i metabolity resweratrolu	498
3.5.11. Sylibina i cynaryna	500
3.5.12. Ranking przeciwutleniaczy	503
3.6. Modelowanie substancji barwnych	504
Literatura uzupełniająca	518
Internet	519
4. Peptyzacja	521
4.1. Oligopeptydy, peptydy i polipeptydy	521
4.2. Chemia kombinatoryczna	523
4.3. Neurotoksyny i peptydy biomimetyczne	525
4.3.1. Neurotoksyna botulinowa	527
4.3.2. Neurotoksyna jadu węża	529
4.3.3. Oligopeptydy biomimetyczne	530
4.4. Perspektywy	537
4.4.1. Oligopeptydy i peptydy przeciwutleniające	537
4.4.2. Oligopeptydy i peptydy przeciwdrobnoustrojowe	540
4.4.3. Peptydy roślinne – cyklotydy	546
4.4.4. Inne źródła bioaktywnych peptydów	548
4.5. Naturalne słodziki peptydowe	552
Literatura uzupełniająca	555
Internet	555
Indeks nazw łacińskich	557