

ChemOffice [2,3]
[4].

PASS

[1].

ChemOffice

ChemDraw

mOffice

»,

: - «

».

Chem3D.

Chem3D

«Show Bond Angles» (

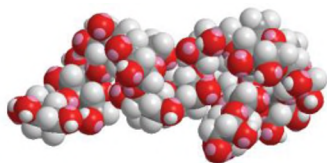
«Structure/ Show Measurements»,
: «Show Bond Lengths» (
) , «Show Dihedral Angles» (
) , «Show Close Contacts» (
) .

• Chem3D

()

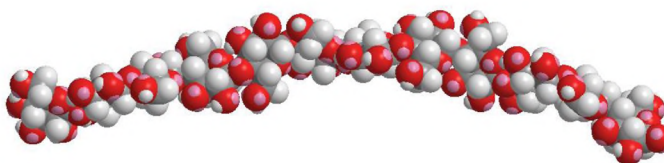
12

(. 1).



. 1.

()



, , , - , -
 , .
 - - - - ,
 , .
 - - N
 : -
 « » , -
 « ».
 , , , ChemOffice
 .
 .
 ,) (, -
) (-).
 , , -
 ChemDraw Chem3D.
 . ChemDraw
 , «Convert Name to Struktur».
 «Show Stereochemistry» («Object») ,
 *.
 .
 - .
 (),
 , -
 , -
 , -
 ,
 .

0.032₂, -0.047₁], [5: -0.182₂, 0.056₁], [5: 0.009₅, -0.134₂] [5: -

S_E.

NH₂, -OH, -₃, -Alk, -Hal,) I II I- S_E (-

II- (-CHO, -COOH, -COOR, -CN,) -

: [5: -0.060 (), -0.025 (), -0.049 ()];

: [5: -0.119 (), -0.023 (), -0.091 ()]; [5: -

0.156 (), -0.022 (), -0.163 ()]; [5: -0.102 (), -0.022

(), -0.115 ()]; [5: +0.002 (), -0.027 (), +0.003

()]; [5: -0.008 (), -0.027 (), -0.008 ()].

A_e 1,2- 1,4-

1,2- 1,4-

CS ChemDraw : «Show Chemical Properties Window, Gibbs

Energy». AG_f^o = 164.25 / 3-

-1 AG_f^o = 77.34 / 1- -2. -

AG_f^o = 96.84 / 3,4- -1 AG_f^o = 91.66

/ 1,4- -2.

PASS ()

« - » ,

PASS

- (),
Plate»).
- (),
ChemDraw,
«TLC
- 1,2- -
//
- », 2012. 21 (140). 21. .
- 130 - 132.
2. «ChemOffice» CambridgeSoft Corporation, 2005.
3. . . . - : -
, 2005. 536 .
4. . . .
// . . . (. . . - .
. . .), 2006. . L. 2. . 66 - 72.

»
-
«
(,)

»
»;
»