

Определение частот колебаний молекул простейших алкенов с использованием квантово-химических методов

© **Гарифзянова Гюзель Габдульбаровна,*⁺ Цышевский Роман Витальевич и Храпковский Григорий Михайлович***

*Центр новых информационных технологий. Казанский государственных технологический университет. Ул. К. Маркса, 68. г. Казань 420015. Республика Татарстан. Россия.
Тел.: (843) 231-89-41. E-mail: garifz@kstu.ru*

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: *этилен, пропен, 1-бутен, частоты колебаний, квантово-химический расчет.*

Аннотация

Проведено сравнение частот колебаний и геометрических параметров этилена, пропена и 1-бутена, полученных с использованием различных квантово-химических методов с экспериментальными данными.