

**ИНТЕРПРЕТАЦИЯ СПЕКТРОВ КР
И УПРУГИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛА $(\text{NH}_2)_2\text{CS}$
НА ОСНОВЕ ЕДИНОЙ МОДЕЛИ
МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ПОТЕНЦИАЛА**

Позднякова Т.А., Ботвич А.Н.

Сибирский Федеральный Университет, г. Красноярск, talor@akadem.ru

Объектом исследования был кристалл тиомочевины $(\text{NH}_2)_2\text{CS}$, испытывающий большое число фазовых превращений, включающих переходы в несоразмерную и сегнетоэлектрическую фазы. В рамках единого подхода, опирающегося на использование модельных межмолекулярных потенциалов, определена матрица динамических коэффициентов, которые использованы для расчета фононного спектра. Дополнительной независимой проверкой модели межмолекулярного потенциала служит расчет упругих постоянных кристалла в пара- и сегнетофазах, причем при этих расчетах используются те же самые динамические матрицы, что и при расчетах спектров КР. Упругие постоянные оказались менее чувствительны к выбору параметров межмолекулярного взаимодействия, в отличие от частот решеточных колебаний.