**Резонансная дифракция синхротронного излучения в кристаллах семейства KDP**

*K. A. Akimova1, E. N. Ovchinnikova1, G. Beutier2, S. P. Collins3, G. Nisbet3, C. Richter4, D. V. Novikov5, E. Kh. Mukhamedzhanov6, A. P. Oreshko1, V. E. Dmitrienko7*

*1 МГУ имени М.В.Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия*

*2 Univ. Grenoble Alpes, SIMAP, F-38000 Grenoble, France*

*3 Diamond Light Source, Harwell Science & Innovation Campus, Didcot, Oxfordshire OX11 0DE, United Kingdom*

*4 Institut fur Experimentelle Physik, TU Bergakademie Freiberg, Freiberg, Germany*

*5 Deutsches Elektronen-Synchrotron, DESY, Photon Science, Hamburg, Germany*

*6 НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия*

*7 Институт кристаллографии РАН имени А.В.Шубникова, Москва, Россия*

Диссертационная работа Акимовой К. А. «Резонансная дифракция синхротронного излучения в кристаллах семейства KDP» посвящена исследованию механизмов возбуждения запрещенных отражений при резонансной дифракции синхротронного излучения в кристаллах RDP и KDP. В работе показано, что в результате перехода из пара- в сегнетоэлектрическую фазу снимается запрет на диполь-дипольное резонансное рассеяние, что позволяет наблюдать фазовый переход как скачок интенсивности запрещенных отражений. Предложена теоретическая модель, в которой резонансный атомный фактор калия и рубидия представлены в виде суммы диполь-квадрупольного и термоиндуцированного вкладов, а также предсказано существование третьего вклада, обусловленного отличием симметрии мгновенных конфигураций протонов на водородных связях, от симметрии кристалла [1]. Интерференция излучения, обусловленного тремя механизмами рассеяния, приводит к сложной зависимости спектров запрещенных отражений от температуры. Сопоставление расчетов на основе предложенной модели с экспериментальными данными, полученными на трех синхротронах третьего поколения, показало, что она адекватно описывает все наблюдаемые эффекты, а также позволяет получить информацию об изменении числа различных конфигураций, образованных атомами водорода, от температуры. Получены значения энергии активации полярных конфигураций и конфигураций типа Слейтера в параэлектрической фазе KDP от температуры [2].

Работа поддержана грантом РФФИ № 16-02-00887. Вычисления проводились на суперкомпьютере СКИФ МГУ.

[1] C. Richter, D.V. Novikov,E.Kh. Mukhamedzhanov, M.M. Borisov, K.A. Akimova, E.N. Ovchinnikova, A.P. Oreshko, J. Strempfer, M. Zschornak, E. Mehner, D.C. Meyer, V.E. Dmitrienko. Mechanisms of the paraelectric to ferroelectric phase transition in RbH2PO4 probed by purely resonant x-ray diffraction. Physical Review B. – 2014.

[2] G. Beutier, S.P. Collins, G. Nisbet, K.A. Akimova, E.N. Ovchinnikova, A.P. Oreshko, V.E. Dmitrienko. Proton configurations in the hydrogen bonds of KH2PO4 as seen by resonant x-ray diffraction. Physical Review B. – 2015.