

22.1-9 CRYSTALLOGRAPHY OF THE BLUE PHASE OF LIQUID CRYSTALS. By V.A.Belyakov and V.E.Dmitrienko, All-Union Surface and Vacuum Research Centre, 117334, Moscow, USSR.

It is noted that a direct analogy between the problems of cholesteric blue phase (BP) structure determinations by means of light diffraction and the problems of X-ray structure crystallography exists (V.A.Belyakov, V.E.Dmitrienko, S.M.Osadchii, Sov. Phys. JETP (1982) 56, 322; V.A.Belyakov, A.S.Sonin "Optics of Cholesteric Liquid Crystals", Moscow, 1982 (in Russian)). However there is an essential practical difference which is connected with the wide use of the polarization characteristics of diffraction for structure determination in the case of BP (J.H.Flack, P.P.Crooker, R.C.Svoboda, Phys. Rev. (1982) A26, 725) contrary to the X-ray case. In this connection the achievements in BP structure determination are presented and the possibility of transference of the "optical diffraction" methods to X-ray diffraction and vice versa are discussed.

The dynamical theory of light diffraction in BP which takes into account the symmetry restrictions on the spatially periodic BP dielectric tensor is developed. The polarization peculiarities of light interaction with BP connected with light diffraction are theoretically investigated and that caused by diffraction circular dichroism and linear birefringence are examined in detail.

Within the framework of Landau phase transition theory (S.A.Brazovskii, S.G.Dmitriev, Sov. Phys. JETP (1975) 42, 497; R.M.Hornreich, S.Shtrikman, Phys.Rev. (1981) A24, 635) the BP free energy is analysed as a function of the structure amplitudes F_{hkl} for the space groups of O and T classes and F_{hkl} are calculated. It is shown that the minimum values of the BP free energy are reached for O^2 , O^5 and O^8 space groups. It is noted that the relative values of F_{hkl} are almost independent on the BP unit cell size and on the proximity of the BP temperature to the phase transition point. For the O^8 and O^2 groups the theoretical ratios of structure amplitudes are given by $|F_{110}| : |F_{200}| : |F_{211}| = 1:1.1:0.33$ and $|F_{100}| : |F_{110}| = 1:0.4$ respectively, with much smaller relative values of the other amplitudes. The calculated values of F_{hkl} ratios are in good agreement with the experimental ones determined from the circular dichroism measurements (V.A.Kizel' and V.V.Prokhorov, Pis'ma v Zh. Exp. i Teor. Fiz. (1983) 38, 283). The applications of the developed theory and the mentioned methods of structure investigations to the smectic and lyotropic liquid crystals with the cubic structure are briefly discussed.

22.1-10 РЕНТГЕНОВСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ИЗМЕНЕНИЯ БЛИЖНЕГО ПОРЯДКА ОБЪЕМНОЙ ВОДЫ И ЕЕ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ
А.Б.Киселев, Иркутский университет им.А.А.Жданова. А.Ш.Минин, Институт земной коры СО АН СССР, Иркутск, СССР.

Известно /Акта Кристаллография. Тезисы I2 Международного конгресса кристаллографов. Август 1978г., стр.3-17 С201/, что структура ближнего порядка дистиллированной воды в объеме при нормальных условиях периодически изменяется от структуры сжатой тетраэдральной льдоподобной с полостными молекулами и расстоянием между ними 2,7 Å к расширенной упаковке с расстоянием между молекулами 3,1 Å. В расширенной упаковке сеточные и полостные молекулы перераспределяются, образуя молекулярно-ионные ассоциаты $H_3O^+ - OH^-$ с расстоянием между ионами гидроксония и гидроксила 2,3 Å. При дальнейшем движении молекул расстояние между ними увеличивается от 2,3 до 2,7 Å и от 3,1 до 3,6 Å и в воде вновь образуется сжатая тетраэдральная упаковка с полостными молекулами.

Исследования показали, что период изменения структуры объемной воды зависит от физико-химических воздействий и обусловленного этим модифицированного состояния воды. Для нагретой до кипения и свежерасплавленной воды первый период достигает 30 ч. Со временем период уменьшается до 12 ч.

Период изменения структуры воды зависит от величины потока рентгеновских фотонов, в котором получается дифракционная картина воды. С увеличением потока период возрастает до бесконечности.

Дифракционные картины получены с помощью методики рентгеновской дифрактометрии макроизотропных веществ для малого потока

рентгеновского излучения, которая в объемной воде исключает межмолекулярные колебания атомов молекулы H_2O в области заторможенной трансляции, а также исключает из сферы действия на структуру воды молекулярное давление и активные центры граничных с водой сред. Методика используется для изучения механизмов структурных преобразований водных сред и их модификаций в процессе физических и физико-химических воздействий.

Изменение структуры объемной воды должно отразиться и на структуре ее поверхностного слоя. Нами зарегистрированы кривые рассеяния от поверхностного слоя объемной воды. Кривая 1 записана в течение 85 мин., 2 - 85-170 мин., 3 - 170-255 мин. ... 6 - 510-600 мин. Кривые сильно изменяются со временем, однако фурье-анализ кривых интенсивности 1-6 показывает, что характер расположения молекул поверхностного слоя объемной воды определяется тетраэдральной структурой типа кварца, обладающей большой флуктуацией атомной плотности и расстояний между атомами кислорода молекул H_2O . Расстояние между атомами кислорода колеблется от 2,8 до 2,6 Å, координационное число изменяется от 3,2 до 6,0, а координационное число, определяющее количество полостных молекул, изменяется от 2 до 6,4.

Дополнительные исследования показали, что молекулярное давление поверхностного слоя воды ответственно за сохранение в этом слое неустойчивой кварцеподобной структуры.