

Definitionen von Grundbegriffen mit Bezug zu niedermolekularen und polymeren Flüssigkristallen**

Obleute: *Carsten Tschierske,* Gerhard Pelzl, Siegmur Diele*

Übersetzer: *Mario Müller, Weinheim*

Anmerkungen von Obleuten und Übersetzer

Der vorliegende Text ist eine möglichst originalgetreue Übersetzung des englischen Dokuments und entspricht nicht in allen Punkten unseren Auffassungen. Diesbezügliche Kommentare sind im Text als Lit. [41–80] verankert. Es wurde versucht, sachliche Fehler so weit wie möglich zu korrigieren. In manchen Punkten fehlt es den Richtlinien an der notwendigen Konsequenz. So werden an einigen Stellen die Begriffe „nonamphiphilic mesophase“, „amphiphilic mesophase“, „calamitic mesophase“ und „discotic mesophase“ verwendet. Die Begriffe „nonamphiphilic“, „amphiphilic“, „calamitic“ und „discotic“ beschreiben jedoch Strukturen von Einzelmolekülen und sollten daher nicht zur Beschreibung ihrer Aggregationsformen herangezogen werden. Diese sollten stattdessen als Mesophasen nichtamphiphiler, amphiphiler, calamitischer bzw. diskotischer Moleküle bezeichnet werden. Diese Änderungen wurden ohne besondere Kennzeichnung vorgenommen. Inkonsequent ist auch die Nomenklatur von nematischen Phasen diskotischer Moleküle^[62] und insbesondere der sanidischen Mesophase.^[69]

Weiterhin ist anzumerken, dass in Formulierungen wie „chirale Moleküle“ und „chirale Verbindungen“ der Begriff „chiral“ als Synonym für „optisch aktiv“ oder „enantiomerenangereichert“ verwendet wird und sich somit auf nicht in racemischer Form vorliegende Moleküle bezieht. Chiral bezeichnet aber lediglich die Tatsache, dass ein Molekül händig ist, und sagt noch nichts darüber aus, ob eine einzige enantiomere Form, eine beliebige Mischung der beiden Enantiomere oder gar ein Racemat vorliegt. An diesen Stellen haben wir daher zur Klarstellung jeweils Lit. [46] eingefügt. Als Abkürzung für Flüssigkristall und flüssigkristallin wurde die vom Englischen abgeleitete Abkürzung LC (liquid crystal, liquid crystalline) der deutschen Abkürzung FK(fk) vorgezogen, da LC bereits ein etablierter und vielfach verwendeter Terminus technicus ist, z. B. in LC-Displays. Generell werden die englischen Begriffe zusätzlich in Klammern angegeben, wenn die deutschen Begriffe wenig gebräuchlich sind.

[*] Prof. Dr. C. Tschierske
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Institut für Organische Chemie
Kurt-Mothes-Straße 2, 06120 Halle (Deutschland)
Fax: (+49) 3455-527-346
E-mail: Tschierske@chemie.uni-halle.de
Prof. Dr. G. Pelzl, Dr. S. Diele
Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg
Institut für Physikalische Chemie
Mühlpforte 1, 06108 Halle (Deutschland)
E-mail: pelzl@chemie.uni-halle.de
diele@chemie.uni-halle.de

[**] Copyright© der englischen Fassung, die unter dem Titel „Definitions Of Basic Terms Relating to Low-Molar-Mass and Polymer Liquid Crystals“ von M. Barón (Buenos Aires, Argentinien) für die Veröffentlichung in *Pure Appl. Chem.* **2001**, *73*, 845–895^[40] vorbereitet wurde: International Union of Pure and Applied Chemistry, 2001. Die Working Group, die das Originaldokument vorbereitet hat, bestand ursprünglich aus C. Noël, V. P. Shibaev, M. Barón, M. Hess, A. D. Jenkins, J.-I. Jin, A. Sirigu, R. F. T. Stepto und W. J. Work; sie wurde später um folgende Mitglieder der International Liquid Crystal Society erweitert: G. R. Luckhurst, S. Chandrasekhar, D. Demus, J. W. Goodby, G. W. Gray, S. T. Lagerwall, O. D. Lavrentovich und Martin Schadt. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieser Recommendation.

1. Vorbemerkungen

Dieses Dokument stellt Definitionen von Grundbegriffen bereit, die bei der Beschreibung von Flüssigkristallen und in den Polymerwissenschaften weit verbreitet sind (siehe Lit. [1–39]). Die Empfehlungen sind das Ergebnis einer gemeinsamen Anstrengung von IUPAC und International Liquid Crystal Society und behandeln die Terminologie von niedermolekularen wie polymeren Flüssigkristallen. Da viele Begriffe beiden Fachgebieten gemeinsam sind, werden die beiden Substanzklassen nicht getrennt behandelt. Nach einigen allgemeinen Definitionen (Abschnitt 2) folgen Abschnitte, die die Strukturen und optischen Texturen von Flüssigkristallen (Abschnitte 3 und 4), ihre physikalischen einschließlich der elektrooptischen und magnetooptischen Eigenschaften (Abschnitt 5) sowie flüssigkristalline Polymere behandeln (Abschnitt 6). Daran schließt sich eine Zusammenstellung der Abkürzungen und empfohlenen Symbole an.

Implizite Definitionen in Anmerkungen zu den Hauptdefinitionen sind durch Halbfettdruck der definierten Begriffe gekennzeichnet.

2. Allgemeine Definitionen

2.1. Mesomorpher Zustand

Ein Aggregatzustand, in dem der Grad der molekularen Ordnung zwischen der vollkommenen dreidimensionalen Positions- und Orientierungsfernordnung des festen Kristalls einerseits und dem Fehlen von Fernordnung in isotropen Flüssigkeiten, Gasen und amorphen Festkörpern andererseits liegt.

Anmerkungen:

1. Der Begriff mesomorpher Zustand ist allgemeiner als der Begriff flüssigkristalliner Zustand (siehe Definition 2.2), allerdings werden beide Begriffe häufig synonym verwendet.
2. Der Begriff wird für orientierungsungeordnete Kristalle, Kristalle aus Molekülen in zufällig verteilten Konformationen (konformationsungeordnete Kristalle), plastische Kristalle und Flüssigkristalle (siehe Definition 2.3) verwendet.
3. Eine Substanz, die in einem mesomorphen Zustand existieren kann, wird **mesomorphe Verbindung** genannt (siehe Definition 2.11).
4. Eine im mesomorphen Zustand glasartig erstarrte Verbindung wird **mesomorphes Glas** genannt und kann beispielsweise durch schnelles Abkühlen oder durch Vernetzung erhalten werden.

2.2. Flüssigkristalliner Zustand (liquid crystalline state; empfohlene Abkürzung: LC-Zustand)

Ein mesomorpher Zustand mit Orientierungsfernordnung und teilweise oder vollständig fehlender Positionsfernordnung.

Anmerkungen:

1. Im LC-Zustand vereint eine Substanz Eigenschaften einer Flüssigkeit (z.B. Fluidität und Tropfenbildung) und eines kristallinen Festkörpers (z.B. Anisotropie einiger physikalischer Eigenschaften).
2. Der LC-Zustand liegt zwischen dem Zustand des kristallinen Festkörpers und dem der isotropen Flüssigkeit und kann beispielsweise durch Temperaturänderung erreicht werden.

2.2.1. Flüssigkristalline Phase (empfohlene Abkürzung: LC-Phase)

Eine in einem bestimmten Temperaturbereich innerhalb des LC-Zustands auftretende Phase.

2.3. Flüssigkristall (liquid crystal; empfohlene Abkürzung: LC)

Eine Substanz im flüssigkristallinen Zustand.

Anmerkung: Eine ausgeprägte Anisotropie der Gestalt und der Wechselwirkungen der Moleküle oder Molekülaggregate ist für die Bildung von Flüssigkristallen notwendig.

2.4. Mesophase

Eine in einem bestimmten Temperatur-, Druck- oder Konzentrationsbereich innerhalb des mesomorphen Zustands auftretende Phase.

2.4.1. Enantiotrope Mesophase

Eine in einem bestimmten Temperatur- oder Druckbereich thermodynamisch stabile Mesophase.

Anmerkung: Der Bereich der thermischen Stabilität einer enantiotropen Mesophase wird durch den Schmelz- und den Klärpunkt der LC-Verbindung (siehe Definition 2.6) oder durch zwei beliebige, aufeinander folgende Mesophasenübergänge begrenzt.

2.4.2. Thermotrope Mesophase

Eine Mesophase, die durch Erhitzen eines Festkörpers oder Abkühlen einer isotropen Flüssigkeit oder durch Erhitzen oder Abkühlen einer thermodynamisch stabilen Mesophase entsteht.

Anmerkungen:

1. Das Adjektiv thermotrop beschreibt eine Phasenumwandlung, ausgelöst durch eine Temperaturänderung. „Thermotrop“ kann auch verwendet werden, um den Phasentyp zu beschreiben (z.B. thermotrop nematisch).
2. Analoge Umwandlungen können durch Druckänderung hervorgerufen werden. In diesem Fall kann die Mesophase als **barotrope Mesophase** bezeichnet werden.

2.4.3. Lyotrope Mesophase

Eine Mesophase, die durch Auflösen eines amphiphilen Mesogens in einem geeigneten Lösungsmittel in bestimmten Konzentrations-, Temperatur- und Druckbereichen entsteht.

Anmerkungen:

1. Wesentliches Merkmal einer lyotropen Mesophase ist die Bildung von Molekülaggregaten oder Micellen als Ergebnis spezifischer Wechselwirkungen zwischen den Molekülen des amphiphilen Mesogens und denen des Lösungsmittels.
2. Definition 2.11.1 beschreibt amphiphile Mesogene.
3. Der mesomorphe Charakter einer lyotropen Mesophase rührt von der periodischen Anordnung der solvensinduzierten Micellen her. Daher sollte als Ursache solcher Mesophasen nicht die Art der Anordnung einzelner Moleküle (wie in thermotropen Mesophasen nichtamphiphiler Mesogene), sondern vielmehr die der Anordnung in Multimolekül-domänen gesehen werden.

2.4.4. Amphitrope Verbindung

Eine Verbindung, die sowohl thermotrope als auch lyotrope Mesophasen bilden kann.

Anmerkung: Beispiele sind Kaliumsalze unverzweigter Alkansäuren, Lecithin, einige Polyisocyanate, Cellulosederivate mit langen Seitenketten wie (2-Hydroxypropyl)cellulose und (Cyanobiphenylalkyl)(triethyl)ammoniumbromide.

2.4.5. Monotrope Mesophase

Eine metastabile Mesophase, die durch Unterkühlung einer isotropen Flüssigkeit oder einer enantiotropen Mesophase bei einem bestimmten Druck unter den Schmelzpunkt des Kristalls erhalten werden kann.

Anmerkung: Umwandlungstemperaturen (siehe Definition 2.5) monotroper Phasen werden in runde Klammern () gesetzt.

2.5. Umwandlungstemperatur (empfohlenes Symbol: T_{XY} , SI-Einheit: K)

Die Temperatur, bei der die Umwandlung zwischen einer Mesophase X und einer Mesophase Y auftritt.

Anmerkung: Die Mesophase X sollte die bei tieferer Temperatur und die Mesophase Y die bei höherer Temperatur stabile Phase sein. Beispielsweise wird die Umwandlungstemperatur zwischen der nematischen und der isotropen Phase mit T_{NI} bezeichnet.

2.6. Klärpunkt, Klärtemperatur, Isotropisierungstemperatur (empfohlenes Symbol: T_d oder T_i , SI-Einheit: K)

Die Temperatur, bei der sich die bei der höchsten Temperatur stabile Mesophase in die isotrope Phase umwandelt.

Anmerkung: Der Begriff sollte nur verwendet werden, wenn die Identität der Mesophase unbekannt ist.

2.7. Virtuelle Umwandlungstemperatur

Eine Umwandlungstemperatur, die nicht direkt, sondern nur durch Extrapolation von Phasenumwandlungstemperaturen in binären Phasendiagrammen auf 100% der untersuchten Substanz ermittelt werden kann.

Anmerkungen:

1. Eine virtuelle Umwandlungstemperatur liegt außerhalb des Temperaturbereichs, in dem die betreffende (Meso)phase experimentell beobachtet werden kann.
2. Eine virtuelle Umwandlungstemperatur steht nicht eindeutig fest. Sie hängt beispielsweise von der Verbindung ab, die als zweite Komponente bei der Erstellung des Phasendiagramms verwendet wurde.
3. Eine virtuelle Umwandlungstemperatur wird in eckige Klammern [] gesetzt.

2.8. Umwandlungsentropie (empfohlenes Symbol: ΔS_{XY} , SI-Einheit: $J K^{-1} mol^{-1}$)

Die bei der Phasenumwandlung von X nach Y auftretende Entropieänderung.

Anmerkungen:

1. Die Umwandlungsentropie beschreibt die Änderung der Orientierungs- und Positionsordnung am Phasenübergang.
2. Die Mesophase X sollte die bei tieferer Temperatur und die Mesophase Y die bei höherer Temperatur stabile Phase sein.
3. Zahlenwerte der molaren Umwandlungsentropie sollten als dimensionslose Größe $\Delta S_{XY}/R$ angegeben werden, wobei R die universelle Gaskonstante ist.

2.9. Divergenztemperatur, Vorumwandlungstemperatur (empfohlenes Symbol: T^* , SI-Einheit: K)

Die Temperatur, bei der die Orientierungskorrelationen in einer isotropen Phase divergieren.

Anmerkungen:

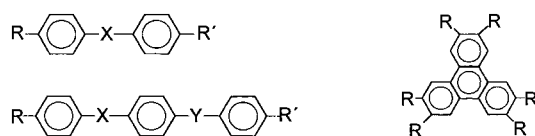
1. Die Divergenztemperatur ist die untere Grenze für eine metastabile Unterkühlung der isotropen Phase.
2. Die Divergenz tritt an dem Punkt auf, an dem man eine Umwandlung zweiter Ordnung der isotropen Phase in die Flüssigkristallphase erwarten würde, käme ihr nicht eine Umwandlung erster Ordnung zuvor.
3. Die Divergenztemperatur nematogener Verbindungen kann anhand des Kerr- oder des Cotton-Mouton-Effekts oder durch Lichtstreuexperimente bestimmt werden.
4. T^* liegt unterhalb der Klärtemperatur, im allgemeinen rund 1 K beim Übergang isotrop→nematisch und mindestens 10 K beim Übergang isotrop→smektisch.

2.10. Mesogene Gruppe, mesogene Einheit, mesogener Rest

Der Teil eines Moleküls oder Makromoleküls, der durch die Anisotropie seiner anziehenden und abstoßenden Wechselwirkungen wesentlich dazu beiträgt, dass niedermolekulare bzw. polymere Substanzen eine LC-Mesophase bilden.

Anmerkungen:

1. Das Adjektiv mesogen wird hier für Teile von Molekülen verwendet, die wegen ihrer Struktur die Bildung von Flüssigkristallphasen in dem System, dessen Bestandteil sie sind, begünstigen.
2. Mesogene Gruppen kommen sowohl in niedermolekularen als auch in polymeren Verbindungen vor.
3. Die Mehrzahl der mesogenen Gruppen besteht aus starren stab- oder scheibenförmigen Einheiten. Beispiele von mesogenen Gruppen sind in Schema 1 wiedergegeben.



Schema 1. Beispiele für mesogene Gruppen. X und Y bezeichnen kovalente Bindungen oder Brückenfunktionen wie $-N=N-$, $-CH=CH-$, $-CH=N-$, $-N^+(O^-)=N-$, $-C(O)-O-$ und $-C\equiv C-$.

2.11. Mesogen, mesogene Verbindung, mesomorphe Verbindung

Eine Verbindung, die unter geeigneten Druck-, Temperatur- und Konzentrationsbedingungen eine Mesophase, insbesondere eine flüssigkristalline Phase bildet.

Anmerkungen:

1. Ist der Typ der Mesophase bekannt, kann eine präzisere Bezeichnung verwendet werden, z. B. **Nematogen**, **Smek-togen** oder **chirales Nematogen**.
2. Bildet eine Verbindung mehrere flüssigkristalline Phasen und trifft somit mehr als eine Charakterisierung für die gleiche Verbindung zu, sollte der allgemeine Begriff Mesogen verwendet werden.

2.11.1. Amphiphiles Mesogen

Ein Mesogen, dessen Moleküle aus zwei Teilen mit gegensätzlichem Charakter bestehen, wie hydrophil/hydrophob oder lipophob/lipophil.

Anmerkungen:

1. Beispiele für amphiphile Mesogene sind Seifen, Detergentien und einige Blockcopolymere.
2. Bei geeigneten Temperatur- und Konzentrationsverhältnissen lagern sich die ähnlichen Teile amphiphiler Moleküle zu Aggregaten oder Micellen zusammen (siehe Definition 2.4.3).

2.11.2. Nichtamphiphiles Mesogen

Ein Mesogen, das nicht zur Gruppe der amphiphilen Mesogene gezählt wird.^[41]

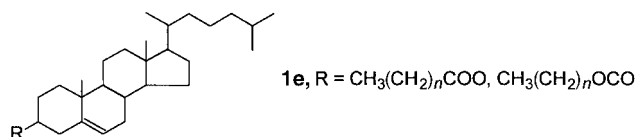
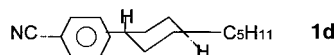
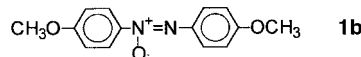
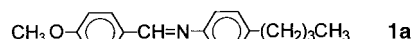
Anmerkungen:

1. Die frühere Annahme, nichtamphiphile Moleküle müssten lang und stabförmig sein, um Mesophasen bilden zu können, hat sich nicht bestätigt, und es sind heute z. B. auch scheiben- oder bananenförmige nichtamphiphile Moleküle bekannt, die Mesophasen bilden (siehe Lit. [6]).
2. Eine Auswahl der Arten nichtamphiphiler Mesogene findet sich in den Definitionen 2.11.2.1–2.11.2.8.

2.11.2.1. Calamitisches Mesogen

Ein Mesogen, das aus stab- oder lattenförmigen Molekülen besteht.

Beispiele:



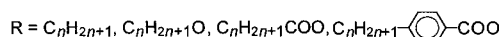
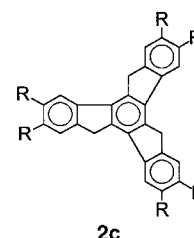
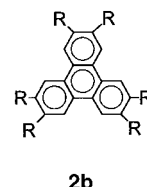
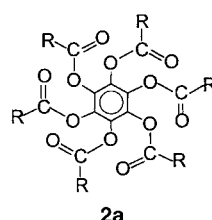
- 4-Butyl-N-(4-methoxybenzyliden)anilin (BMBA, auch MBBA, **1a**)
- 4,4'-Dimethoxyazobenzol (**1b**)
- 4-Cyano-4'-pentylbiphenyl (**1c**)
- 4-(trans-4-Pentylcyclohexyl)benzonitril (**1d**)
- Cholesterin und Cholest-5-en-3-carbonsäureester (**1e**).

2.11.2.2. Diskotisches Mesogen, diskoides Mesogen

Ein Mesogen, das aus relativ flachen, scheiben- oder blattförmigen (sheetlike) Molekülen besteht.

Anmerkungen:

1. Beispiele sind Hexa(acyloxy)benzol- **2a**, Hexa(acyloxy)- und Hexa(alkyloxy)triphenylen- **2b** sowie 5H,10H,15H-diindeno(1,2-a:1',2'-c)fluorenderivate **2c**.

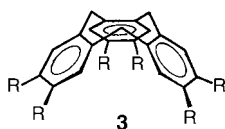


2. Das Adjektiv diskotisch wird auch verwendet, um die nematischen Mesophasen diskotischer Moleküle zu beschreiben. Die durch säulenartiges Stapeln scheibenförmiger Moleküle gebildeten Mesophasen werden demgegenüber als columnare Mesophasen bezeichnet (siehe Definition 3.2).

2.11.2.3. Pyramidales Mesogen, konisches oder kegelförmiges Mesogen, schüsselförmiges (bowllic) Mesogen

Ein Mesogen, das aus Molekülen mit einer kegelförmigen Zentraleinheit besteht.^[42]

Beispiel: hexasubstituierte 5*H*,10*H*,15*H*-dihydrotribenzo-*[a,d,g]*[9]annulene **3**.



2.11.2.4. Sanidisches Mesogen

Ein Mesogen, das aus brettartigen Molekülen besteht.^[43]

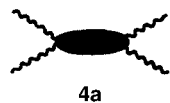
Anmerkung: Siehe auch Definition 3.4.

2.11.2.5. Polycatenares Mesogen

Ein Mesogen, das aus Molekülen mit einem langgestreckten starren Kernbereich (rigid core) und mehreren flexiblen Ketten an einem oder beiden Enden besteht.

Anmerkungen:

1. Die flexiblen Ketten sind meist aliphatisch.
2. Die Zahl der flexiblen Ketten an den Enden des Kernbereichs kann durch die Schreibweise *m,n*-polycatenares Mesogen angegeben werden.
3. Es gibt mehrere beschreibende Namen für diese Mesogene (Schema 2), z. B. Doppelgabelmesogen (biforked



4a



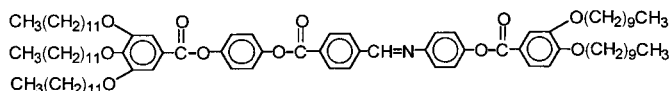
4b



4c



4d

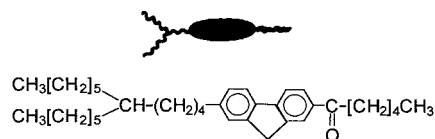


Schema 2. Schematische Darstellung der verschiedenen Typen polycatenarer Mesogene und konkretes Beispiel für ein hemiphasmidisches Gabelmesogen **4c**.

mesogen, 2,2-polycatenares Mesogen, **4a**), hemiphasmidisches Mesogen (3,1-polycatenares Mesogen, **4b**), hemiphasmidisches Gabelmesogen (forked hemiphasmidic mesogen, 3,2-polycatenares Mesogen, **4c**) und phasmidisches Mesogen (3,3-polycatenares Mesogen, **4d**).

2.11.2.6. Schwalbenschwanz-Mesogen

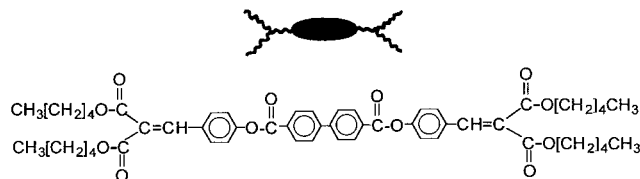
Ein Mesogen, das aus Molekülen mit einem langgestreckten starren Kernbereich und einer verzweigten flexiblen Kette mit etwa gleich langen Zweigen an einem Ende besteht (Schema 3).



Schema 3. Allgemeine Struktur von Schwalbenschwanz-Mesogenen und ein Fluorenderivat als konkretes Beispiel.

2.11.2.7. Doppelschwalbenschwanz-Mesogen

Ein Mesogen, das aus Molekülen mit einem langgestreckten starren Kernbereich und verzweigten flexiblen Ketten mit etwa gleich langen Zweigen an beiden Enden besteht (Schema 4).

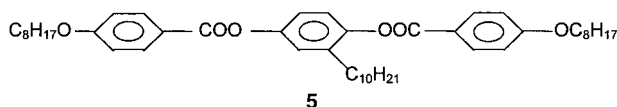


Schema 4. Allgemeine Struktur eines Doppelschwalbenschwanz-Mesogens und ein konkretes Beispiel.

2.11.2.8. Lateral (seitlich) verzweigtes Mesogen

Ein Mesogen, das aus stabförmigen Molekülen mit großen lateralen Seitenarmen, z. B. Alkyl-, Alkoxygruppen oder Ringstrukturen enthaltenden Gruppen, besteht.

Ein Beispiel ist Verbindung **5**.

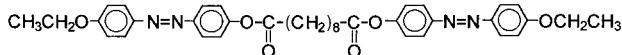
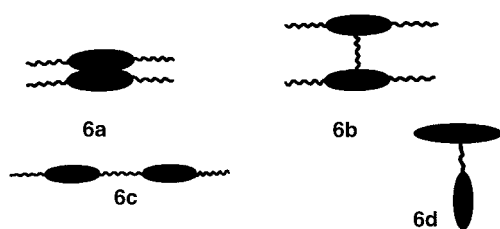


2.11.2.9. Flüssigkristalloligomer, mesogenes Oligomer

Ein Mesogen, dessen Moleküle mehr als eine mesogene Gruppe enthalten.

Anmerkungen:

1. Die mesogenen Gruppen haben meist identische Strukturen.
2. Ein **Flüssigkristalldimer** oder **mesogenes Dimer** wird mitunter auch als **Zwillingsmesogen** (twin mesogen) bezeichnet. Die Begriffe „dimesogene Verbindung“ und „Siamesische-Zwillinge-Mesogen“ statt Flüssigkristalldimer oder mesogenes Dimer werden nicht empfohlen.
3. Beispiele für mesogene Dimere sind in Schema 5 zusammengestellt: **anellierte Zwillingsmesogene** (fused twin mesogen, **6a**), in denen die mesogenen Gruppen starr über (meist anellierte) Ringsysteme verbunden sind, **verbrückte Zwillingsmesogene** (ligated twin mesogen, **6b**), in denen die mesogenen Gruppen durch einen **Spacer** (siehe Definition 6.4) in zentraler Position verknüpft sind, **Schwanz-Schwanz-Zwillingsmesogene** (tail-to-tail twin mesogen, **6c**) mit einem flexiblen Spacer zwischen den beiden Gruppen und **Seite-Schwanz-Zwillingsmesogene** (side-to-tail twin mesogen, **6d**).
4. Ein Flüssigkristalldimer mit unterschiedlichen mesogenen Gruppen ist auch unter der Bezeichnung **asymmetrisches Flüssigkristalldimer**^[44] bekannt.



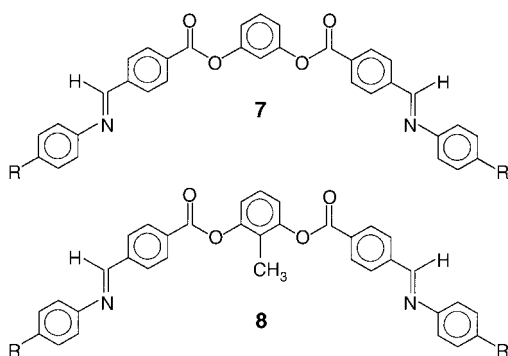
Schema 5. Allgemeine Strukturen von Flüssigkristalldimeren und konkretes Beispiel für ein Schwanz-Schwanz-Zwillingsmesogen **6c**, in dem $-(\text{CH}_2)_8-$ als flexibler Spacer die beiden mesogenen Gruppen verbindet. Die Ellipse symbolisiert jeweils die mesogene Gruppe.

5. Ein Flüssigkristalldimer mit flexiblem Alkylspacer, der eine ungerade Zahl an Kohlenstoffatomen enthält, wird als **ungeradzahliges Flüssigkristalldimer** bezeichnet, bei einer geraden Zahl an Kohlenstoffatomen spricht man von **geradzahligem Flüssigkristalldimeren**.^[45]

2.11.2.10. Bananen-Mesogen

Ein Mesogen, das aus gebogenen Molekülen besteht. In ihm sind zwei mesogene Gruppen durch eine (halb)starre Gruppe nichtkollinear verbunden.

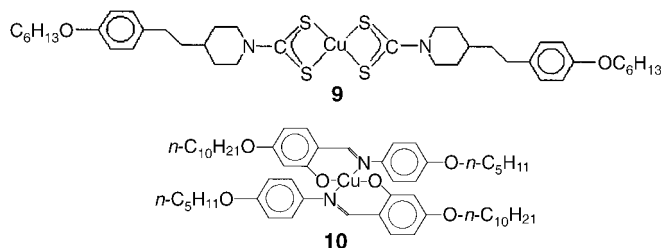
Beispiele sind die Verbindungen **7** und **8** mit $\text{R} = \text{Alkyloxy}$ ($\text{OC}_n\text{H}_{2n+1}$).



2.11.3. Metallomesogen

Ein Mesogen, das aus Molekülen mit einem oder mehreren Metallatomen besteht, wobei das Mesogen calamitisch oder diskotisch sein kann (siehe Definition 2.11.2.1 bzw. 2.11.2.2).

Beispiele sind die Kupferkomplexe **9** und **10**.



3. Arten von Mesophasen

3.1. Mesophasen calamitischer Mesogene

3.1.1. Einachsig nematische Phase, uniaxial nematische Phase, nematisch (empfohlenes Symbol: N oder N_u)

Eine Mesophase, die von einer achiralen Verbindung oder dem Racemat einer chiralen Verbindung gebildet wird und in der die Moleküle im Mittel eine Orientierungsordnung zu einer als Direktor definierten und durch den Einheitsvektor \mathbf{n} beschriebenen gemeinsamen Achse, aber keine Positionsfernordnung aufweisen.

Anmerkungen:

- Abbildung 1 zeigt die Molekülanordnung in einer nematischen Mesophase.

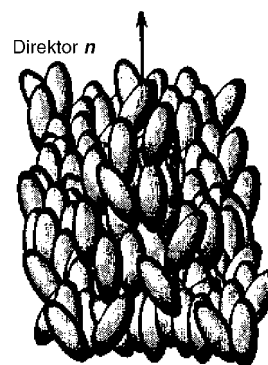


Abbildung 1. Darstellung der Molekülorganisation in einer einachsig nematischen Mesophase.

- Zum Einheitsvektor \mathbf{n} siehe Definition 3.1.1.1.
- Die Richtung von \mathbf{n} im Raum ist normalerweise nicht festgelegt.
- Das Ausmaß der Positionskorrelation der Moleküle in einer nematischen Phase ist mit der in einer isotropen Flüssigkeit vergleichbar, allerdings ist die Verteilungsfunktion notwendigerweise anisotrop.
- Die einachsig nematische Phase wird kristallographisch nach Schoenflies durch das Symbol $D_{\infty h}$, im Internationalen System mit $\infty/m\bar{m}$ beschrieben.
- Da die Mehrzahl der nematischen Phasen einachsig ist, gilt eine nematische Phase als einachsig, wenn keine nähere Bezeichnung angegeben ist. Besteht die Möglichkeit zur Bildung ein- und zweiachsig nematischer Phasen (siehe Definition 3.3.1), sollte die einachsige Phase mit N_u bezeichnet werden.

3.1.1.1. Direktor (empfohlenes Symbol: \mathbf{n})

Die lokale Symmetrieachse für die einachsige Orientierungsverteilung der Moleküle in einer Mesophase.

Anmerkungen:

- Der Direktor ist als Einheitsvektor definiert, aber die Richtungen $+\mathbf{n}$ und $-\mathbf{n}$ sind gleichwertig.

2. In einachsig nematischen Phasen stab- oder scheibenförmiger Moleküle fällt die mittlere Richtung der effektiven Molekülsymmetrieachse mit dem Direktor zusammen.
3. Der Direktor fällt auch mit den lokalen Symmetrieachsen aller richtungsabhängigen Eigenschaften einer Mesophase zusammen, z. B. des Brechungsindex oder der magnetischen Suszeptibilität.

3.1.2. Cybotaktische Gruppen

Gruppen von Molekülen mit smektischer Nahordnung in einer nematischen Phase.

Anmerkung: Zwei Arten smektischer Nahordnung sind möglich (Abbildung 2): Die eine ist analog zur smektischen

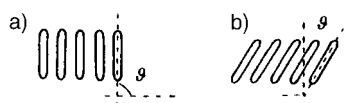


Abbildung 2. Schematische Darstellung der Anordnung von Molekülen in einer lokalen smektischen A-Struktur (a) und in einer lokalen smektischen C-Struktur (b).

A-Mesophase (siehe Definition 3.1.5.1.1), in der die Moleküle bevorzugt parallel zur Schichtnormalen liegen. Die andere entspricht der smektischen C-Mesophase (siehe Definition 3.1.5.1.2), in der die Moleküle gegen die Schichtnormale geneigt sind.

3.1.3. Chiral-nematische Mesophase, cholesterische Mesophase, chiral-nematisch, cholesterisch (empfohlenes Symbol: N^*)

Eine Mesophase mit helicaler Überstruktur des Direktors, die aus chiralen^[46] calamitischen oder diskotischen Molekülen oder aus einer Mischung einer einachsig nematischen Wirtphase mit chiralen^[46] Gastmolekülen besteht. Der lokale Direktor \mathbf{n} präzediert um eine ausgezeichnete Achse.

Anmerkungen:

1. Die helicale Struktur chiral-nematischer Mesophasen ist in Abbildung 3 dargestellt.
2. Die chiral-nematische Phase entspricht – abgesehen von der Präzession des Direktors \mathbf{n} um die Helixachse Z – lokal der einachsig nematischen Phase.
3. Die Richtung des lokalen Direktors wiederholt sich entlang Z im Abstand der Ganghöhe P , was jeweils einer Rotation um 2π entspricht.
4. Chiral-nematische Phasen zeigen Bragg-Reflexion circular polarisierten Lichts bei einer Wellenlänge λ_R , die der Ganghöhe P proportional ist ($\lambda_R = \langle n \rangle P$, $\langle n \rangle$: mittlerer Brechungsindex).
5. Die Direktorpräzession in einer chiral-nematischen Mesophase tritt spontan auf und muss von einer induzierten Verdrillung einer nematischen Mesophase unterschieden werden, die durch die mechanische Verdrillung einschränkender Grenzflächen hervorgerufen werden kann.

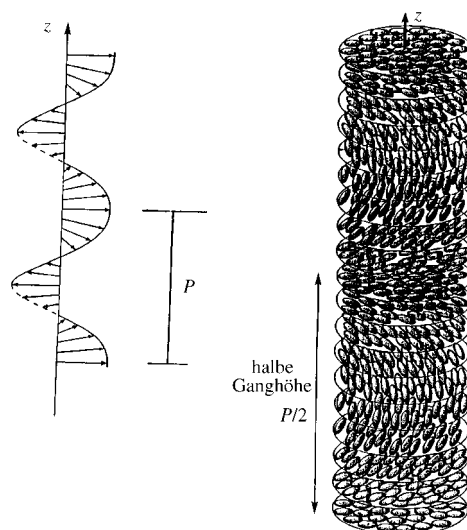


Abbildung 3. Schematische Darstellung der Struktur chiral-nematischer Mesophasen.

6. Die Begriffe chiral-nematische Mesophase und chiral-nematisch werden den Begriffen cholesterische Mesophase bzw. cholesterisch vorgezogen.

3.1.4. Blaue Phase (empfohlene Abkürzung: BP)

Eine Mesophase mit einer dreidimensionalen räumlichen Verteilung helicaler Direktorachsen, die zu frustrierten Strukturen mit Defekten führt, die in einem Gitter mit kubischer Symmetrie und Gitterkonstanten in der Größenordnung des sichtbaren Lichts angeordnet sind.

Anmerkungen:

1. Abbildung 4 zeigt ein Modell für eine Blaue Phase.
2. Der Name Blaue Phase rührt historisch von der optischen Bragg-Reflexion blauen Lichts her, Blaue Phasen mit größeren Gitterkonstanten können aber auch Licht mit längeren Wellenlängen reflektieren.
3. Chiral-nematische Verbindungen, die chiral-nematische Mesophasen mit kurzer Ganghöhe (< 700 nm) bilden, zeigen bis zu drei Blaue Phasen in einem kleinen Temperaturbereich zwischen der chiral-nematischen und der isotropen Phase.
4. Eine Blaue Phase ist optisch isotrop und zeigt Bragg-Reflexion von circular polarisiertem Licht.
5. Zurzeit sind zwei Blaue Phasen mit unterschiedlicher kubischer Symmetrie bekannt (Raumgruppe $I4_132$ für BPI und $P4_32$ für BP II), sowie eine dritte, amorphe (BP III). Mehrere andere Blaue Phasen unterschiedlicher kubischer Symmetrie existieren nur in Gegenwart elektrischer Felder.

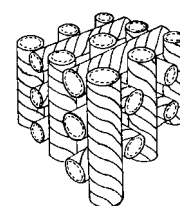


Abbildung 4. Kubisches Gitter aus doppelt verdrillten Zylindern als mögliches Modell einer Blauen Phase.

3.1.5. Smektische Mesophase (empfohlene Abkürzung: Sm)

Eine Mesophase, in der die Moleküle in Schichten angeordnet sind und eine eindimensionale periodische Struktur bilden.

Anmerkungen:

1. Es gibt mehrere Arten smektischer Mesophasen, die durch eine Vielfalt von Molekülanordnungen in den Schichten charakterisiert sind.
2. Die Gesamtzahl smektischer Phasen kann nicht angegeben werden; bisher wurden folgende definiert: SmA, SmB, SmC, SmF und SmI. Die alphabetische Reihenfolge der Suffixe spiegelt nur die Reihenfolge der Entdeckung wider.
3. Die Klassifizierung von SmD als smektisch hat im Wesentlichen historische Gründe und sollte aufgegeben werden (siehe Definition 3.1.9, Anmerkung 1).
4. Früher wurden einige Mesophasen anhand ihrer Texturen als smektisch identifiziert, bei denen es sich jedoch um stark gestörte Kristalle (soft crystals) handelt, die sich durch eine leichte Verformbarkeit auszeichnen. Daher sollten diese dreidimensional geordneten Phasen nicht mehr smektisch genannt werden. Sie ähneln vielmehr plastischen Kristallen mit einiger rudimentärer Fernordnung und werden mit den Buchstaben E, G, H, J und K bezeichnet (siehe Definition 3.1.5.3).
5. Smektische Mesophasen mit geneigter Molekülanordnung, die sich von chiralen^[46] Verbindungen oder Mischungen ableiten, werden durch einen hochgestellten Stern (*) gekennzeichnet: SmC*, SmF* usw. (siehe Definition 3.1.5.1.3).

3.1.5.1. Smektische Mesophasen mit unstrukturierten Schichten

3.1.5.1.1. Smektische A-Mesophase (empfohlene Abkürzung: SmA)

Eine smektische Mesophase, in der die Moleküllängsachsen im Mittel parallel zur Schichtnormalen angeordnet sind. Die Molekülschwerpunkte haben keine Positionsfernordnung in den Schichten.

Anmerkungen:

1. Abbildung 5 zeigt die Molekülanordnung in einer smektischen A-Mesophase.
2. Jede Schicht kann näherungsweise als echte zweidimensionale Flüssigkeit betrachtet werden. Das System ist

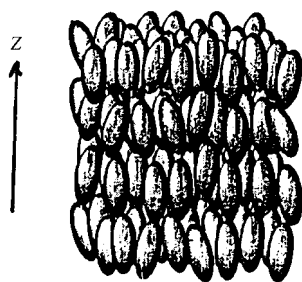


Abbildung 5. Struktur einer smektischen A-Mesophase.

optisch einachsig, die optische Achse Z steht senkrecht auf den Schichtebenen.

3. Die Richtungen $+Z$ und $-Z$ sind austauschbar.
4. Die Struktur einer smektischen A-Mesophase kann durch das Schoenflies-Symbol $D_{\infty h}$ ($\infty, 2$ im Internationalen System) beschrieben werden.
5. Das lyotrope Analogon der smektischen A-Mesophase ist als **lamellare Mesophase** (L_α -Phase) bekannt. Die Schichten amphiphiler Moleküle sind darin durch Lösungsmittelschichten getrennt. Dabei handelt es sich in der Regel um Wasser, manchmal aber auch um lipophile Lösungsmittel.^[47]
6. Eine smektische A-Phase, die aus chiralen^[46] Molekülen besteht oder chiral dotiert ist, kann als chiral-smektische A-Phase bezeichnet werden. Das empfohlene Symbol ist SmA*.^[48]

3.1.5.1.2. Smektische C-Mesophase (empfohlene Abkürzung: SmC)

Das Analogon zur smektischen A-Mesophase mit einer annähernd parallelen Anordnung der Moleküle in den Schichten, in denen der Direktor gegen die Schichtnormale geneigt ist und die Molekülschwerpunkte keine Positionsfernordnung in der Schicht aufweisen.

Anmerkungen:

1. Abbildung 6 zeigt die Molekülanordnung in einer smektischen C-Mesophase.

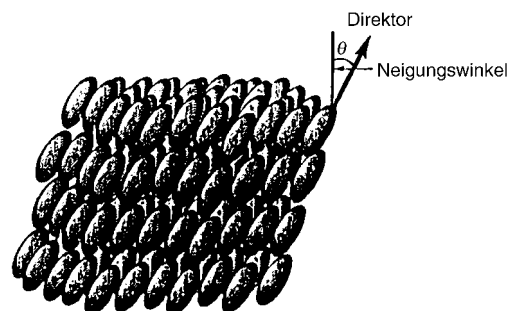


Abbildung 6. Struktur einer smektischen C-Mesophase.

2. Die physikalischen Eigenschaften einer smektischen C-Mesophase entsprechen denen eines zweiachsigen Kristalls.
3. Die smektische C-Struktur hat monokline Symmetrie und wird mit dem Schoenflies-Symbol C_{2h} beschrieben ($t2/m$ im Internationalen System).
4. In konventionellen smektischen C-Mesophasen ist die Neigungsrichtung (Tiltrichtung) des Direktors in benachbarten Schichten gleich.^[49] Sie kann aber auch von Schicht zu Schicht alternieren, wie in der **antiferroelektrischen chiralen SmC-Mesophase** (siehe Definition 5.9, Anmerkung 7) und in der smektischen C-Mesophase, die von einigen ungeradzahlig-flüssigkristallindimeren (siehe Definition 2.11.2.9, Anmerkung 5) gebildet wird. Das empfohlene Symbol für diesen Mesophasentyp ist SmCa.

3.1.5.1.3. Chiral-smektische C-Mesophase (empfohlene Abkürzung: SmC*)

Eine smektische C-Mesophase, in der sich die Richtung der Neigung des Direktors gegen die Schichtnormale von Schicht zu Schicht um einen bestimmten Winkel ändert, sodass eine helicale Struktur mit konstanter Ganghöhe resultiert.

Anmerkungen:

- Abbildung 7 zeigt die Molekülanordnung in einer chiral-smektischen C-Mesophase.
- Der hochgestellte Stern (*) in SmC* und analogen Notationen zeigt an, dass die makroskopische Struktur der Mesophase chiral ist (siehe Definition 3.1.5.1.1, Anmerkung 6). Er kann aber auch nur bedeuten, dass einige der Moleküle, die die selbst achirale Mesophase aufbauen, chiral sind.^[46]
- Eine SmC*-Mesophase wird von chiralen^[46] Verbindungen oder Mischungen mit chiralen^[46] Komponenten gebildet.
- Die lokale Struktur der SmC*-Mesophase ist mit der der achiralen SmC-Mesophase im Wesentlichen identisch, außer dass der Neigungswinkel um die Helixachse präzediert. Die Phase hat in der Schoenflies-Notation die Symmetrie C_2 .
- Die SmC*-Mesophase ist auch als ferroelektrische chiral-smektische C-Phase bekannt.^[50]
- Die Helix kann durch Grenzflächenkräfte aufgewunden werden. Dadurch erhält man eine grenzflächenstabilisierte SmC*-Phase. Diese weist eine makroskopische Polarisierung auf.

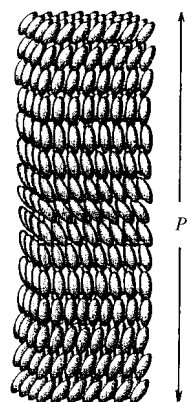


Abbildung 7. Struktur einer chiral-smektischen C-Mesophase; P: Helixganghöhe.

3.1.5.2. Hexatisch smektische Mesophase

Eine smektische Mesophase mit Positionsnaheordnung der Moleküle in den schwach gekoppelten zweidimensionalen Schichten und einer Fernordnung der Bindungsorientierung (bond-orientational order).^[51]

Anmerkung: Es gibt drei Arten hexatisch smektischer Phasen: smektisch B (SmB), smektisch F (SmF) und smektisch I (SmI). Der Begriff „hexatisch“ kann hier weggelassen werden, da diese Eigenschaft implizit zu den Charakteristika dieser smektischen Mesophasen gehört.

3.1.5.2.1. Smektische B-Mesophase (empfohlene Abkürzung: SmB)

Eine hexatisch smektische Mesophase, in der der Direktor senkrecht zu den Schichten steht und in der es eine hexagonale Fernordnung der Bindungsorientierung gibt.

Anmerkungen:

- Abbildung 8 zeigt die Molekülanordnung in einer smektischen B-Mesophase.

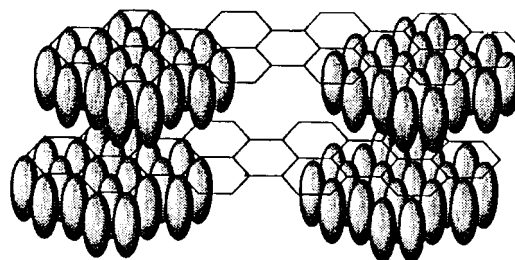


Abbildung 8. Struktur einer smektischen B-Mesophase.

- Die Positionsordnung der Moleküle reicht nicht weiter als einige wenige zehn Nanometer. Die Bindungsorientierungsordnung reicht dagegen über makroskopische Entfernungen in der und über die Schichtebene hinweg.
- Im Gegensatz zu einer smektischen B-Mesophase hat eine kristalline B-Mesophase Korrelationen der Positionsordnung in drei Dimensionen, d.h., Positionskorrelationen treten in den Schichten (hexagonal) und zwischen den Schichten auf.
- Wegen der Bindungsorientierungsordnung ergibt sich für die Struktur der smektischen B-Mesophase die Punktgruppe D_{6h} (Schoenflies-Notation).
- Eine smektische B-Mesophase ist optisch einachsig.
- Die smektische B-Mesophase wird mitunter mit **SmB_{hex}** bezeichnet. Der Index hex steht für die hexatische Struktur der Mesophase.^[52]

3.1.5.2.2. Smektische F-Mesophase (empfohlene Abkürzung: SmF)

Eine hexatisch smektische Mesophase, deren Struktur als C-zentrierte monokline Elementarzelle mit pseudo-hexagonaler^[53] Packung von Molekülen beschrieben werden kann, deren Direktor zur Schichtnormalen in Richtung der Seiten der Sechsecke geneigt ist.

Anmerkungen:

- Abbildung 9a zeigt die Molekülanordnung in einer smektischen F-Mesophase, einem Analogon der smektischen B-Mesophase mit geneigter Molekülanordnung.
- Eine SmF-Mesophase ist durch Positionsnaheordnung in den Schichten und schwache oder keine Positionskorrelationen zwischen den Schichten charakterisiert.
- Die Positionsordnung der Moleküle reicht nur über einige wenige zehn Nanometer. Ihre Bindungsorientierungsordnung dagegen weist in den Schichten eine Fernordnung auf.
- Die Punktgruppe ist C_{2h} ($2/m$) in der Schoenflies-Notation und die Raumgruppe $f2/m$ im Internationalen System.
- Die smektische F-Mesophase ist optisch zweiachsig.
- Chirale^[46] Verbindungen bilden **chiral-smektische F-Mesophasen**. Diese werden mit SmF* bezeichnet.

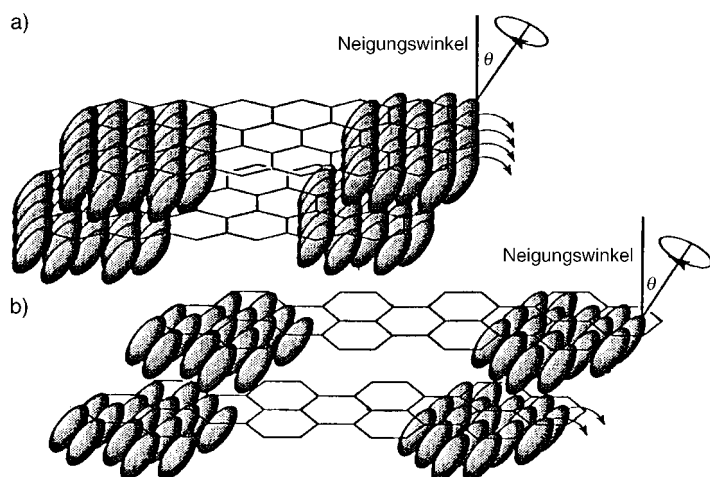


Abbildung 9. Neigungsrichtungen des Direktors in der SmF- ((a), zu den Seiten der Sechsecke hin) und der SmI-Mesophase ((b), zu einer Ecke der Sechsecke hin).

3.1.5.2.3. Smektische I-Mesophase (empfohlene Abkürzung: SmI)

Eine hexatisch smektische Mesophase, deren Struktur als C-zentrierte monokline Elementarzelle mit pseudo-hexagonal^[53] Packung von Molekülen beschrieben werden kann, deren Direktor zur Schichtnormalen in Richtung einer Ecke der Sechsecke geneigt ist.

Anmerkungen:

1. Abbildung 9b zeigt die Molekülanordnung in einer smektischen I-Mesophase, einem weiteren Analogon der smektischen B-Mesophase mit geneigter Anordnung der Moleküle.
2. Die smektische I-Mesophase ist optisch zweiachsig.
3. Die Positionskorrelationen in den Schichten sind in der smektischen I-Mesophase etwas größer als in der smektischen F-Mesophase.
4. Chirale^[46] Verbindungen bilden **chiral-smektische I-Mesophasen**. Diese werden mit SmI* bezeichnet.

3.1.5.3. Kristalline B-, E-, G-, H-, J- und K-Mesophasen

Stark gestörte Kristalle (soft crystals) aus Stapeln von miteinander korrelierten Schichten, in denen eine dreidimensionale Positionsfernordnung existiert.

Anmerkungen:

1. Diese Mesophasen wurden ursprünglich als smektisch klassifiziert, neuere Untersuchungen haben jedoch ihren dreidimensionalen Charakter gezeigt.
2. In den kristallinen B- und E-Mesophasen sind die langen Molekülachsen parallel zu den Schichtnormalen. In den G-, H-, J- und K-Mesophasen dagegen sind sie zur Schichtnormalen geneigt.
3. Die E-, J- und K-Mesophasen zeigen eine Fischgrätenpackung (herring-bone packing) der kurzen Molekülachsen. Die Mesophasen sind folglich optisch zweiachsig.

3.1.6. Polymorphe Modifikationen stark polarer Verbindungen

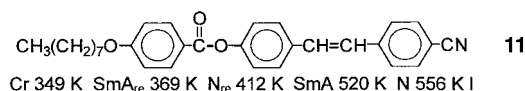
3.1.6.1. Reentrant-Mesophase (empfohlener Index: re)

Die bei der niedrigsten Temperatur auftretende Mesophase von Verbindungen, die zwei oder mehr Mesophasen desselben Typs in verschiedenen Temperaturbereichen bilden.

Anmerkungen:

1. Reentrant-Mesophasen werden am häufigsten bei Molekülen mit starken Längsdipolmomenten beobachtet (z. B. **11**).
2. Folgen von Reentrant-Mesophasen wurden auch bei binären Mischungen nichtpolarer flüssigkristalliner Verbindungen gefunden.

Beispiel: Verbindung **11** durchläuft mit fallender Temperatur eine isotrope (I), nematische (N), smektische A- (SmA), nematische Reentrant- (N_{re}) und smektische Reentrant-A-Mesophase (SmA_{re}) sowie eine kristalline Phase (Cr); die Umwandlungstemperaturen sind unter der Formel angegeben.



3.1.6.2. Smektische A₁-, A₂-, A_d-, C₁-, C₂- und C_d-Mesophasen (empfohlene Abkürzungen: SmA₁, SmA₂, SmA_d, SmC₁, SmC₂ bzw. SmC_d)

Smektische A- und C-Mesophasen, die durch eine regelmäßige (SmA₂, SmA_d, SmC₂ und SmC_d) oder unregelmäßige antiparallele (SmA₁, SmC₁) Anordnung der Molekül-Längsdipolmomente in den Schichten gekennzeichnet sind.^[54]

Anmerkungen:

1. Abbildung 10 und 11 zeigen die Molekülanordnungen in den SmA- bzw. SmC-Subphasen.
2. Die Indizes 1, d und 2 geben an, dass die Schichtdicke das 1-, d- bzw. 2fache der Moleküllänge beträgt, wobei für d gilt $1 < d < 2$.
3. In den SmA_d- und SmC_d-Mesophasen liegen Doppelschichten mit teilweiser Überlappung der Moleküle benachbarter Schichten vor.

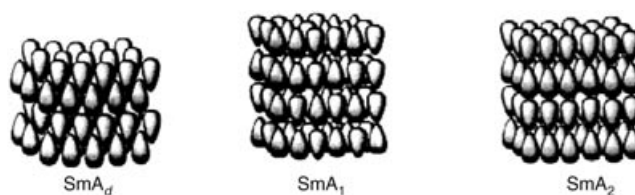


Abbildung 10. Strukturen der smektischen A-Subphasen.^[55]

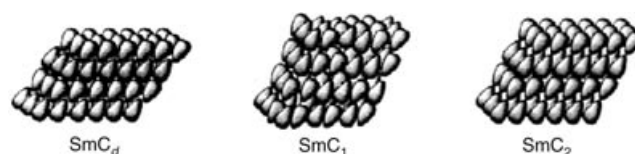


Abbildung 11. Strukturen der smektischen C-Subphasen.

4. In den SmA_2 - und SmC_2 -Mesophasen liegen Doppelschichten mit antiparalleler Anordnung der Moleküle vor.
5. Doppelschichtstrukturen treten auch in smektischen B- und kristallinen E-Mesophasen auf.

3.1.6.3. Modulierte smektische Mesophase (empfohlenes Zeichen: ~)

Eine smektische Mesophase mit periodischer Elektromechanische Änderung in den Schichten.^[56]

Anmerkungen:

1. Abbildung 12 zeigt die Molekülanordnung in modulierten smektischen Phasen.

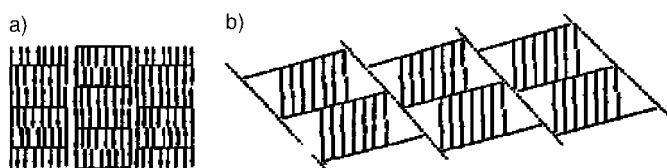


Abbildung 12. Strukturen der modulierten Mesophasen SmA (a) und SmC (b).

2. Die SmA -Mesophase ist auch als „Antiphase“ bekannt. Ihre Struktur wird durch eine **zentrierte rechteckige** Zelle beschrieben. Ihre Raumgruppe im Internationalen System ist *cm*.
3. Die SmC -Mesophase ist auch als **Bänderphase** (ribbon phase) bekannt. Ihre Struktur wird durch eine **schiefwinklige** (oblique) Zelle beschrieben. Ihre Raumgruppe im Internationalen System ist *pmg*.

3.1.7. Interkalierte smektische Mesophase (empfohlener Index: c)

Eine smektische Mesophase, deren Schichtabstand (smektische Periodizität) ungefähr der Hälfte der Moleküllänge entspricht.

Anmerkungen:

1. Interkalierte smektische Phasen werden häufig von Flüssigkristalldimeren gebildet.
2. Gegenwärtig sind interkalierte smektische A- (SmA_c) und C- (SmC_c) sowie kristalline B- (B_c), G- (G_c) und J-Mesophasen (J_c) bekannt.
3. Die lokale Struktur in der nematischen Mesophase mancher Dimere ähnelt der einer interkalierten smektischen Mesophase.

3.1.8. Induzierte Mesophase

Eine Mesophase, die von einer binären Mischung gebildet wird, die aber bei den reinen Komponenten nicht auftritt.^[57]

Anmerkungen:

1. Die Bildung einer induzierten Mesophase ist meist dann zu beobachten, wenn die attraktiven Wechselwirkungen zwischen ungleichen Molekülen stärker sind als die mittleren Wechselwirkungen zwischen gleichen.

2. Beispiele für solche Wechselwirkungen sind dipolare, hydrophobe, Charge-Transfer- oder Quadrupolwechselwirkungen.
3. Mesophasen können auch dadurch induziert werden, dass das freie Volumen zwischen großen, unregelmäßig geformten Molekülen von kleinen Molekülen einer zweiten Komponente ausgefüllt wird. Solche Mesophasen sind auch als „gefüllte“ smektische Mesophasen bezeichnet worden, jedoch wird die Bezeichnung „induziert“ empfohlen.
4. Eine enantiotrope Mesophase kann in einer Mischung auftreten, wenn eine metastabile Mesophase einer oder beider Komponenten als Ergebnis einer Gefrierpunktniedrigung zu einer thermodynamisch stabilen Mesophase wird. Eine solche Mesophase ist von einer induzierten zu unterscheiden.

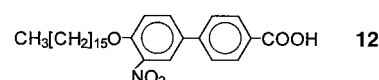
3.1.9. Kubische Mesophase (empfohlene Abkürzung: Cub)

Eine Mesophase mit dreidimensionaler Überstruktur kubischer Symmetrie, die zumeist aus Molekülaggregaten aufgebaut ist. Die Elementarzellen kubischer Phasen können einige hundert Einzelmoleküle enthalten. Die Einzelmoleküle weisen eine hohe Dynamik, vergleichbar mit der in einer isotropen Flüssigkeiten auf.^[58]

Anmerkungen:

1. Die früher als smektische D-Phase bezeichnete Mesophase gehört zu dieser Gruppe (siehe Definition 3.1.5, Anmerkung 3).
2. Eine kubische Mesophase ist optisch isotrop. Sie unterscheidet sich von einer isotropen Flüssigkeit oder einer homöotrop orientierten Phase dadurch, dass sie aus einer doppelbrechenden Mesophase oft in Quadraten, Rhomben, Sechsecken oder Rechtecken mit geraden Kanten wächst.^[59]
3. Eine kubische Mesophase kann unter anderem von stabförmigen Molekülen mit starken spezifischen intermolekularen Wechselwirkungen wie Wasserstoffbrücken und von polycatenaren Verbindungen (siehe Definition 2.11.2.5) ohne starke spezifische Wechselwirkungen gebildet werden.^[60]
4. Kubische Mesophasen sind seit langem von ionischen thermotropen Verbindungen und lyotropen Flüssigkristallen bekannt.
5. Es gibt mehrere Arten thermotroper und lyotroper kubischer Mesophasen, die sich unter anderem in Symmetrie und Mischbarkeit unterscheiden. Ist deren Raumgruppe bekannt, sollte diese in Klammern hinter der Abkürzung Cub angegeben werden.

Verbindung **12** bildet eine kristalline (Cr), smektische C- (SmC), kubische (Cub) und smektische A-Mesophase (SmA) sowie eine isotrope Phase (I) mit den angegebenen Umwandlungstemperaturen.



Cr 399.95 K SmC 444.15 K Cub 471.65 K SmA 472.15 K I

3.2. Mesophasen scheibenförmiger Moleküle^[61]

3.2.1. Diskotisch-nematische Phase, diskotisch-nematisch (empfohlenes Symbol: N)^[62]

Eine nematische Mesophase, in der die Symmetrieachsen scheibenförmiger Moleküle oder scheibenförmiger mesogener Einheiten von Makromolekülen annähernd parallel orientiert und die Molekülschwerpunkte räumlich zufällig verteilt sind.

Anmerkungen:

- Abbildung 13 zeigt die Molekülanordnung in einer diskotisch-nematischen Mesophase.

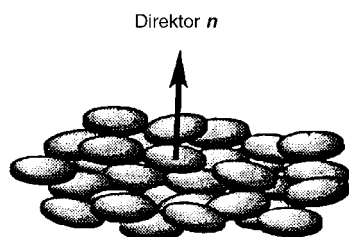


Abbildung 13. Struktur der diskotisch-nematischen Mesophase.

- Die Symmetrie^[63] einer nematischen Mesophase ist unabhängig davon, ob sie von scheiben- oder stabförmigen Molekülen gebildet wird. Die Verwendung des Index D im häufig genutzten Symbol N_D wird daher nicht empfohlen.
- Eine diskotisch-nematische Mesophase kann auch von Molekülen ohne Scheibenform gebildet werden (z. B. von scheibenförmigen micellaren Aggregaten amphiphiler Verbindungen in lyotropen Systemen).
- Es sind auch chirale diskotisch-nematische Mesophasen N* bekannt.

3.2.2. Columnare Mesophase^[64] (empfohlene Abkürzung: Col)

Eine Mesophase, in der beispielsweise scheibenförmige Moleküle, scheibenförmige mesogene Einheiten von Makromolekülen, keilförmige oder terminal verzweigte calamitische Moleküle zu Säulen gestapelt sind, die sich in einem zweidimensionalen Gitter parallel, jedoch ohne Positionsfernordnung entlang der Säulen anordnen.

Anmerkung: Je nach der Ordnung der Molekülstapelung in den Säulen und der zweidimensionalen Gittersymmetrie der Säulenpackung werden columnare Mesophasen in folgende drei Kategorien eingeordnet: hexagonal, rechtwinklig und schiefwinklig (siehe Definitionen 3.2.2.1 bis 3.2.2.3).

3.2.2.1. Hexagonal columnare Mesophase (empfohlene Abkürzung: Col_h)

Eine columnare Mesophase mit hexagonaler Packung der Säulen.

Anmerkungen:

- Abbildung 14 zeigt die Molekülanordnung in einer Col_h-Mesophase.

- Hexagonale Mesophasen werden häufig mit Col_{ho} oder Col_{hd} bezeichnet. Darin steht h für hexagonal; o (ordered) und d (disordered) beschreiben die Positionskorrelationen entlang der Säulenachsen. Die Indizes d und o sollten nicht mehr verwendet werden, da in beiden Fällen eine flüssigkeitsartige Ordnung vorliegt und nur die Korrelationslängen unterschiedlich sind.

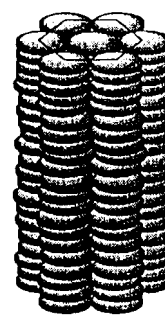


Abbildung 14. Struktur der hexagonal columnaren Mesophase.

- Die Raumgruppe einer Col_h-Mesophase ist P6/mmm (P6/m2/m im Internationalen System) und entspricht der Punktgruppe D_{6h} nach Schoenflies.
- Das lyotrope Äquivalent einer hexagonal columnaren Mesophase ist als **hexagonale Mesophase** bekannt. In einer solchen Phase sind Säulen amphiphiler Moleküle vom Lösungsmittel, typischerweise Wasser, umgeben, oder in einer **inversen hexagonalen Mesophase** von einem lipophilen Lösungsmittel.^[65]

3.2.2.2. Rechtwinklig columnare Mesophase (empfohlenes Symbol: Col_r)

Eine columnare Mesophase ohne Positionsfernordnung^[66] der Moleküle entlang der Säulen und mit einer Packung der Säulen in einem rechtwinkligen Gitter.

Anmerkungen:

- Die Abbildungen 15a–c zeigen Molekülanordnungen in Col_r-Phasen.
- Die mittlere Orientierung der Ebenen der scheibenförmigen Moleküle muss nicht senkrecht zu den Säulenachsen sein.
- Je nach planarer Raumgruppe unterscheidet man drei Col_r-Mesophasen (Abbildungen 15a–c).
- Es gibt auch **chirale rechtwinklig columnare Mesophasen**. Darin sind die scheibenförmigen Moleküle periodisch

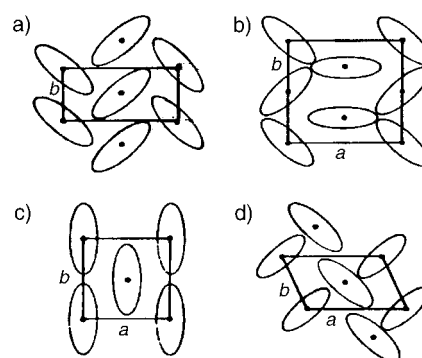


Abbildung 15. Aufsicht auf die zweidimensionalen Säulengitter in rechtwinklig ((a)–(c)) und schiefwinklig columnaren Mesophasen (d). Die Ellipsen deuten die Projektion der Molekülscheiben in die Ebene an. Die planare Raumgruppe ist im Internationalen System für a) P2₁/a, b) P2/a, c) C2m und d) P₁.^[67]

gegen die Säulen geneigt, und die Neigungsrichtung ändert sich regelmäßig entlang der Säulen.

3.2.2.3. Schiefwinklig columnare Phase (empfohlenes Symbol: Col_{ob})

Eine columnare Mesophase ohne Positionsfernordnung der Moleküle entlang der Säulen und mit einer Packung der Säulen in einem schiefwinkligen Gitter.^[66]

Anmerkungen:

1. Abbildung 15d zeigt die Molekülanordnung in einer Col_{ob} -Mesophase.
2. Die mittlere Orientierung der Ebenen der scheibenförmigen Moleküle muss nicht senkrecht zu den Säulenachsen sein.
3. Die planare Raumgruppe der Col_{ob} -Mesophase ist P_1 (siehe Abbildung 15d).
4. Es gibt auch **chirale schiefwinklig columnare Mesophasen**. Darin ändert sich die Neigungsrichtung der Scheiben regelmäßig entlang der Säulen.

3.3. Zweiachsige Mesophase, biaxiale Mesophase (empfohlener Index: b)

Eine aus brettförmigen Molekülen bestehende Mesophase mit Orientierungsfernordnung sowohl der längeren als auch der kürzeren Molekülachse.

Anmerkungen:

1. Eine zweiachsige Mesophase wird durch drei zueinander senkrecht stehende Direktoren, die Einheitsvektoren l , m und n , beschrieben.
2. Die Tensoreigenschaften einer zweiachsigen Mesophase haben anders als die einachsigen Mesophasen wie SmA und N eine zweiachsige Symmetrie.
3. Die Zweiachsigkeit der Phase ist nicht Folge einer geneigten Struktur wie etwa bei einer SmC -Mesophase.
4. Besondere zweiachsige Mesophasen werden gebildet, wenn die Molekülschwerpunkte in den Schichten korreliert sind. Solche Mesophasen sind für brettförmige Polymere vorgeschlagen und sanidische Mesophasen genannt worden (siehe Definitionen 3.4, 3.4.1 und 3.4.2).
5. Einige Mesophasen sanidischer Moleküle haben Ähnlichkeiten mit columnaren Mesophasen (siehe Definition 3.2.2).^[68]

3.3.1. Zweiachsige nematische Mesophase, biaxial nematische Mesophase, zweiachsige nematisch, biaxial nematisch (empfohlenes Symbol: N_b)

Eine Mesophase, in der die Längsachsen der Moleküle im Mittel entlang eines gemeinsamen Direktors orientiert sind und eine der kürzeren Molekülachsen im Mittel bezüglich eines zweiten, zum ersten senkrechten Direktors geordnet ist.

Anmerkungen:

1. Abbildung 16 zeigt die Molekülanordnung in einer N_b -Mesophase.

2. Kristallographisch wird die N_b -Phase durch die Punktgruppe D_{2h} nach Schoenflies oder $2/mmm$ im Internationalen System beschrieben.
3. In lyotropen Systemen konnten zweiachsige nematische Mesophasen anhand der biaxialen Symmetrie ihrer Tensoreigenschaften identifiziert werden.
4. Bei thermotropen Systemen ist die Situation weniger eindeutig, und bei einigen Substanzen, von denen zunächst behauptet wurde, sie bildeten N_b -Phasen, hat sich durch genauere Untersuchungen herausgestellt, dass es sich um N_u -Phasen handelt (siehe Definition 3.1.1).
5. Eine zweiachsige nematische Mesophase hat die gleiche Struktur wie eine ungeordnete sanidische Mesophase (siehe Definition 3.4, Anmerkung 2). Es wird empfohlen, letzteren Begriff nicht mehr zu verwenden und stattdessen von zweiachsige nematisch zu sprechen.

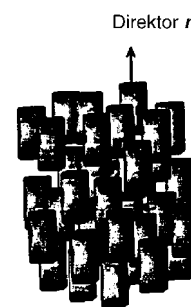


Abbildung 16. Struktur der zweiachsigen nematischen Mesophase.

3.3.2. Zweiachsige smektische A-Mesophase, biaxial smektische A-Mesophase (empfohlenes Symbol: SmA_b)

Eine smektische A-Mesophase, die aus brettförmigen Molekülen besteht, deren längere und kürzere Achse eine Orientierungsordnung aufweisen.

Anmerkung: Die Molekülschwerpunkte in einer SmA_b -Mesophase zeigen in den Schichten nur eine Positionsnaheordnung.

3.4. Sanidische Mesophase (empfohlenes Symbol: Σ)^[69]

Eine Mesophase, in der brettförmige Moleküle in Stapeln organisiert sind, die ein- oder zweidimensionale Gitter bilden.

Anmerkungen:

1. Die Abbildungen 17 und 18 zeigen Molekülanordnungen in sanidischen Mesophasen.
2. Kurze brettförmige Moleküle bilden zweiachsige nematische Mesophasen. Es wird empfohlen, den Begriff „ungeordnete sanidische Mesophase“ für solche Phasen nicht mehr zu verwenden (siehe Definition 3.3.1, Anmerkung 5).
3. Die Rotation der Moleküle um ihre Längsachse ist erheblich eingeschränkt.

3.4.1. Rechtwinklig sanidische Mesophase (empfohlenes Symbol: Σ_r)

Eine sanidische Mesophase, in der die Molekülstapel seitlich regelmäßig gepackt sind und die sowohl eine Fernordnung entlang der Stapelnormale als auch eine entlang der Stapelachsen aufweist.

Anmerkung: Abbildung 17 zeigt die Molekülanordnung in einer Σ_r -Mesophase.

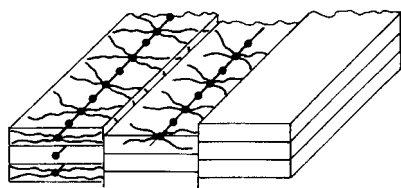


Abbildung 17. Struktur der rechtwinklig sanidischen Mesophase.

3.4.2. Geordnete sanidische Mesophase (empfohlenes Symbol: Σ_o)

Eine sanidische Mesophase, in der die Molekülstapel seitlich regelmäßig gepackt sind und eine Fernordnung entlang der Stapelnormalen, aber keine Positionskorrelation der Stapellängsachsen existiert.^[69]

Anmerkung: Abbildung 18 zeigt die Molekülanordnung in einer Σ_o -Mesophase.

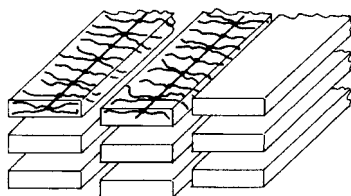


Abbildung 18. Struktur der geordneten sanidischen Mesophase.

3.5. Glasartige Mesophase (empfohlener Index: g)

Eine Mesophase, in der nichtvibratorische Freiheitsgrade durch Unterkühlung einer bei höherer Temperatur stabilen Mesophase eingefroren sind.

3.6. Twist-Grain-Boundary-Mesophase (empfohlene Abkürzung: TGB)

Eine durch Defekte stabilisierte Mesophase, die durch Verdrillung oder Verbiegung einer smektischen Mesophase entsteht.

Anmerkungen:

1. Die Verdrillung oder Verbiegung kann durch eine regelmäßige Anordnung von Schrauben- oder Stufenversetzungen stabilisiert werden.
2. Eine TGB-Mesophase ist analog zur Abrikosov-Phase einiger Supraleiter.

3.6.1. Twist-Grain-Boundary-A*-Mesophase (empfohlene Abkürzung: TGBA*)

Eine Mesophase mit einer helicalen supramolekularen Struktur, in der die Schichtnormalen von Molekülblöcken mit

lokaler SmA-Mesophasenstruktur, die durch Schraubenversetzungen voneinander getrennt sind, gegeneinander verdreht sind.

Anmerkungen:

1. Abbildung 19 zeigt die Molekülanordnung in einer TGBA*-Mesophase.
2. Die TGBA*-Mesophase wird von chiralen Verbindungen^[46] oder Mischungen chiraler Verbindungen^[46] gebildet.

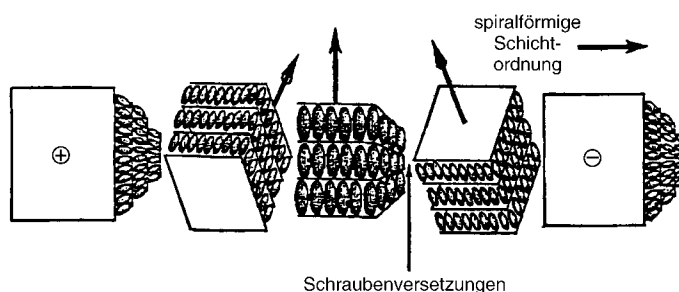


Abbildung 19. Ansicht einer TGBA*-Mesophase, die eine halbe Helixdrehung umfasst.

3. Zwei TGBA*-Strukturen sind möglich: in der einen ist die Zahl der Blöcke, die zu einer Drehung der Schichtnormalen um 2π führt, ganzzahlig, in der anderen gebrochen.
4. TGBA*-Mesophasen findet man zwischen einer smektischen A- und einer chiral-nematischen Mesophase oder zwischen einer smektischen A-Mesophase und der isotropen Phase.
5. Der Existenzbereich einer TGBA*-Mesophase beträgt typischerweise einige Kelvin.

3.6.2. Twist-Grain-Boundary-C*-Mesophase (empfohlene Abkürzung: TGBC*)

Eine Mesophase mit einer helicalen supramolekularen Struktur, in der die Schichtnormalen von Molekülblöcken mit lokaler SmC-Mesophasenstruktur, die durch Schraubenversetzungen voneinander getrennt sind, gegeneinander verdreht sind.

Anmerkungen:

1. Zwei Arten von TGBC*-Mesophasen sind möglich: in beiden ist der lokale Direktor bezüglich der Schichtnormalen geneigt, doch in der einen präzediert seine Neigungsrichtung innerhalb eines Blockes wie in einer SmC*-Mesophase, in der anderen nicht (Analogie zur SmC-Mesophase).
2. Im Falle kurzer Ganghöhen, wenn P kleiner als die Wellenlänge λ ist, liegt die makroskopische außerordentliche Achse des Brechungsindex senkrecht zum Direktor.

3.6.3. Melted-Grain-Boundary-Mesophase (empfohlene Abkürzung: MGBC*)

Eine Mesophase mit helicaler supramolekularer Struktur aus Blöcken mit lokaler SmC-Mesophasenstruktur. Die

Schichtnormale der Blöcke rotiert auf einem Kegel und erzeugt einen helixähnlichen Direktor in der SmC*-Meso- phase. Die Blöcke sind durch ebene Korngrenzen senkrecht zur Helixachse getrennt. An den Korngrenzen verschwindet die smektische Ordnung zugunsten einer lediglich nematischen Ordnung. In den Blöcken rotiert der Direktor von einer Korngrenze zur nächsten, sodass eine Drehung der Blöcke ohne Diskontinuität der thermomolekularen Orientierung möglich wird.

Anmerkung: Diese Phase tritt zwischen TGBA*- und SmC*- oder zwischen N*- und SmC*-Mesophasen auf.

4. Texturen und Defekte

4.1. Domäne

Raumbereich einer Mesophase mit einem einzigen Direktor (siehe Definition 3.1.1.1).

4.2. Monodomäne

Raumbereich einer einachsigen Mesophase oder eine vollständige einachsige Mesophase mit einem einzigen Direktor oder Raumbereich einer zweiachsigen Mesophase oder eine vollständige zweiachsige Mesophase mit zwei Direktoren.

Anmerkungen:

1. Zur einachsigen nematischen Mesophase siehe Definition 3.1.1, zu ihrer Anisotropie Definition 5.8.1; entsprechend sei für zweiachsige Mesophasen auf die Definitionen 3.3.1 und 5.8.2 verwiesen.
2. Bei smektischen Mesophasen impliziert der Begriff Monodomäne auch eine einheitliche Anordnung der smektischen Schichten.

4.3. Homöotrope Randanbindung (homeotropic alignment)

Eine Molekülanordnung, bei der der Direktor senkrecht zu einer Substratoberfläche steht.

Anmerkungen:

1. Abbildung 20a illustriert diese Anordnung.



Abbildung 20. Molekulare Randanbindungen: a) homöotrop, b) planar, c) einheitlich planar.

2. Wenn der Direktor in einer homöotropen Randanbindung von der Senkrechten abweicht, spricht man von einer **angekippten homöotropen Randanbindung**. Der Ankipfungswinkel ist als die Abweichung zu 90° definiert.

4.4. Planare Randanbindung, homogene Randanbindung (planar alignment, homogeneous alignment)

Eine Molekülanordnung, in der Direktoren parallel zu einer Substratoberfläche liegen (Abbildung 20b).

4.5. Einheitliche planare Randanbindung (twist alignment)

Eine Molekülanordnung, in der der Direktor parallel zu einer Substratoberfläche liegt.

Anmerkungen:

1. Abbildung 20c illustriert diese Anordnung.
2. Manchmal wird eine einheitliche planare Randanbindung auch „einheitliche homogene Randanbindung“ genannt. Dieser Begriff wird jedoch nicht empfohlen.
3. **Oberflächen-Ankippfung** bedeutet eine Abweichung des Direktors von der Oberfläche. Sie dient zur Steuerung der Schwellenspannung und hat Auswirkungen auf die Blickwinkelabhängigkeit.^[70]

4.6. Verdrillte Randanbindung (twist alignment)

Sie entsteht, wenn sich die einheitlichen planaren Randanbindungen des Direktors an der oberen und unteren Substratfläche um einen definierten Winkel unterscheiden. Dabei rotiert der Direktor um diesen Winkel zwischen der oberen und unteren Substratfläche.

Anmerkungen:

1. Abbildung 21 illustriert diese Anordnung. Die Pfeile stellen die Projektion des Direktors in die Papierebene dar.
2. Die Richtungen des Direktors an der oberen und unteren Substratoberfläche sind häufig senkrecht zueinander, d.h., der Direktor wird über die Dicke der Flüssigkristallschicht um 90° gedreht.

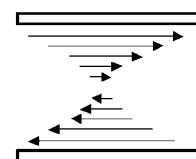


Abbildung 21. Verdrillte Randanbindung.

4.7. Defekt

Eine nichteinheitliche Molekülanordnung, die nicht in eine einheitliche überführt werden kann, ohne dass andere Defekte entstehen.

Anmerkungen:

1. In Flüssigkristallen kommen Defekte hauptsächlich in Form von Versetzungen und Disklinationen vor.
2. Man unterscheidet drei elementare Defekttypen: Punkt-, Linien- und Flächendefekte.
3. Eine Unstetigkeit in der Struktur (oder in der sie beschreibenden mathematischen Funktion) heißt Singularität; in vielen Fällen können Defekte als Singularitäten behandelt werden.

4.7.1. Versetzung

Eine Unstetigkeit in einer regelmäßigen Anordnung von Molekülpositionen.

Anmerkung: Versetzungen findet man hauptsächlich in festen Kristallen.

4.7.2. Disklination

Ein Liniendefekt in einer regelmäßigen Direktororientierung.

Anmerkungen:

1. Disklinationen sind für einige polarisationsmikroskopisch feststellbare Texturen verantwortlich, z. B. für die Schlierentextur (siehe Definition 4.9.2), die durch Disklinationen in nahezu vertikalen Orientierungen gebildet wird. Deren Projektionen sind als dunkle Punkte sichtbar, von denen meist zwei oder vier dunkle Streifen oder Fächer ausgehen.
2. Disklinationen sind Defekte in der Ordnung der Molekülorientierungen, während Versetzungen Defekte in der Ordnung der Molekülpositionen sind.

4.8. Optische Textur

Das Erscheinungsbild einer Flüssigkristallprobe, das mittels eines Polarisationsmikroskops, typischerweise zwischen gekreuzten Polarisatoren, beobachtet wird.

Anmerkung: Optische Texturen sind das Resultat der Oberflächenorientierung der Direktoren an den Proben-grenzflächen und von Defekten in der Probe.

4.9. Nematische Texturen

4.9.1. Nematisches Tröpfchen

Ein kugelförmiges Tröpfchen, das während der Umwandlung einer isotropen Phase in eine nematische Mesophase gebildet wird. Es hat charakteristische Texturen, die von der Tröpfchengröße und der Direktororientierung an der Grenzfläche zwischen nematischer und isotroper Phase abhängen.

Anmerkung: Nematische Tröpfchen zeigen Texturen, die ausschließlich bei nematischen Phasen auftreten.

4.9.1.1. Bipolare Tröpfchentextur

Eine Textur mit einem Punktdefekt an jedem der beiden Pole eines nematischen Tröpfchens.

Anmerkungen:

1. Ein Pol ist die Extremposition des Direktors in einem Tröpfchen.
2. Die Punktdefekte werden „Boojums“ genannt.
3. Eine bipolare Tröpfchentextur tritt auf, wenn der Direktor in der Ebene der Grenzfläche zwischen isotroper und nematischer Phase liegt.

4.9.1.2. Radiale Tröpfchentextur

Eine Textur mit einem Punktdefekt im Zentrum eines nematischen Tröpfchens.

Anmerkungen:

1. Dieser Punktdefekt tritt typischerweise auf, wenn der Direktor senkrecht zur Grenzfläche zwischen isotroper und nematischer Phase ist.
2. Die radiale Tröpfchentextur zeigt vier dunkle Streifen an den Stellen, an denen sich der Direktor in der Polarisations-ebene des Polarisators oder des Analysators befindet.

4.9.2. Schlierentextur

Eine Textur, die an einer dünnen Probe zwischen gekreuzten Polarisatoren beobachtet wird und die aus einem Netzwerk schwarzer Streifen besteht, die Punkt- und Liniendefektzentren verbinden.

Anmerkungen:

1. Die schwarzen Streifen werden auch Schlieren genannt.
2. Schwarze Streifen treten an den Stellen auf, an denen sich der Direktor in der Polarisations-ebene des Polarisators oder des Analysators befindet.
3. Schlierentexturen, wie sie in nematischen Proben mit planarer Orientierung beobachtet werden, zeigen Defekte, von denen zwei oder vier Streifen ausgehen. Schlierentexturen in nematischen Proben mit angekippter Randanbindung zeigen Defekte mit vier Streifen, während zwei Streifen hier von Flächendefekten (Defekt-wänden) verursacht werden.
4. Dünne Proben smektischer C-Phasen, deren Schichten parallel zu den Probenoberflächen liegen, zeigen Schlierentexturen mit vier Streifen pro Defekt. Smektische C-Phasen von ungeradzahligem Flüssigkristalldimeren (siehe Definition 2.11.2.9, Anmerkung 5) zeigen Defekte sowohl mit vier als auch mit zwei Streifen.^[71]

4.9.2.1. Kern

Das Zentrum eines Punkt- oder Liniendefekts, von dem bei der Beobachtung durch gekreuzte Polarisatoren schwarze Streifen ausgehen.

Anmerkung: Ein Kern kann entweder das Ende einer Disklinationslinie an einer Oberfläche oder einen isolierten Defekt anzeigen.

4.9.2.2. Disklinationsstärke (empfohlenes Symbol: s)

Die Zahl der Drehungen des Direktors um 2π um das Zentrum eines Defekts herum [Gl. (1)].

$$|s| = \frac{\text{Zahl der Streifen}}{4} \quad (1)$$

Anmerkungen:

1. Dreht man Polarisator und Analysator gemeinsam und drehen sich die Streifen in die gleiche Richtung, so ist s

positiv, drehen sie sich in die entgegengesetzte Richtung, dann ist s negativ.

- Die Disklinationsstärke s kann in nematischen Phasen ganz- oder halbzahlig sein, da die Direktoren $+n$ und $-n$ nicht unterscheidbar sind.
- Die Winkelverteilung ϕ der lokalen Direktorachse um einen Defekt in einer nematischen planaren Textur kann in der x - y -Projektion als Funktion des Polarwinkels θ_r ausgedrückt werden [Gl. (2)], wobei θ_r der Polarwinkel des betrachteten Punktes relativ zum Mittelpunkt der Disklination ist. Der Winkel ϕ beschreibt den Winkel der

$$\phi = s\theta_r + \phi_0 \quad (2)$$

lokalen Direktorachse mit der Achse, für die $\theta_r = 0$ gilt; ϕ_0 ist eine Konstante, $0 < \phi_0 < 2\pi$ (Abbildung 22 a).

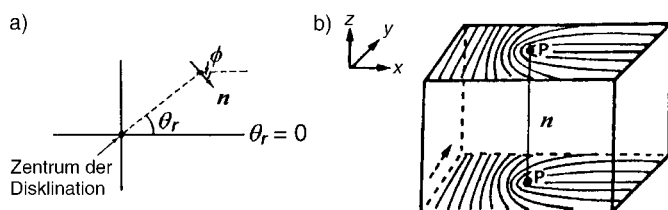


Abbildung 22. a) Definition der Winkel ϕ und θ_r zur Beschreibung einer Disklination. b) Direktorfeld um eine Singularitätslinie der Stärke $s = +1/2$. Die Enden der Linie an der Probenoberfläche erscheinen als Punkte P mit $s = +1/2$. Die Direktoranordnung oder das Direktorfeld ändert sich in z -Richtung nicht. Es wurde nur an der oberen und unteren Fläche gezeichnet.

Das Produkt $s\theta_r$ ergibt den Winkel, um den sich der Direktor auf einem geschlossenen Pfad um den Mittelpunkt der Disklination dreht. Wird der gesamte Pfad um das Zentrum einer $s = \pm 1/2$ -Disklination durchlaufen, dreht sich der Direktor um π (Abbildung 22b). Für $s = \pm 1$ erhält man eine Direktordrehung um 2π . Somit definiert $s = \pm 1/2$ eine **π -Liniendisklination** und $s = \pm 1$ eine **2π -Liniendisklination**.

- Direktorfelder an Punkdefekten mit verschiedenen Werten von s zeigt Abbildung 23.

4.9.3. Fadentextur (threaded texture)

Eine Textur mit π -Liniendisklinationen, die im Wesentlichen parallel zu den begrenzenden Oberflächen liegen und deren Enden an den Oberflächen festliegen, während andere Teile der Linien sich frei im Flüssigkristall bewegen und als dünne, fadenartige Linien erscheinen.

4.9.3.1. Oberflächendisklinationslinie, anhaftender Faden

Eine dicke, fadenartige Disklination, die auf ihrer gesamten Länge an der oberen oder unteren Oberfläche der Probenhalterung verankert ist.

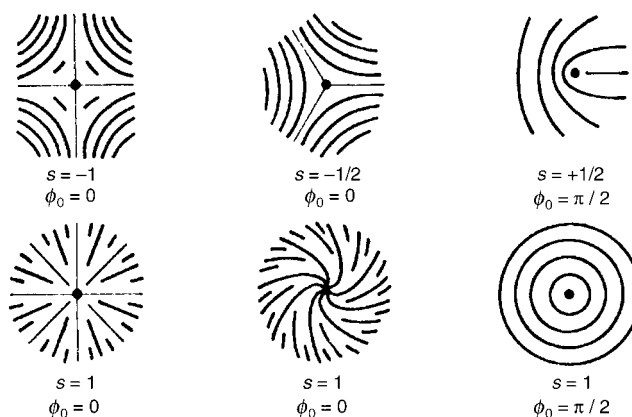


Abbildung 23. Direktorfelder um Disklinationen mit verschiedenen Werten für die Stärke s und den Winkel ϕ_0 ; $s = \pm 1/2$ entspricht Defekten mit zwei Streifen, $s = \pm 1$ solchen mit vier Streifen.

4.9.4. Marmorierte Textur

Eine Textur, die aus mehreren Bereichen mit unterschiedlicher Orientierung des Direktors besteht.

Anmerkung: Eine marmorierte Textur liefert zwischen gekreuzten Polarisatoren in jedem Bereich eine im Wesentlichen homogene Interferenzfarbe, was auf weitgehend homogene Bereiche hindeutet.

4.10. Smektische Texturen

4.10.1. Bâtonnet

Ein typischerweise nichtkugelförmiges Tröpfchen (Wachstumskeim), das während der Umwandlung einer isotropen Phase in eine smektische Mesophase gebildet wird.

4.10.2. Fokal-konische Domäne

Eine Domäne aus verformten smektischen Schichten, die sich um zwei konfokale Liniendefekte herum biegen; in einiger Entfernung von den Defekten bleiben dabei die Schichtabstände konstant.

Anmerkungen (siehe Abbildung 24):

- Bei den konfokalen Liniendefekten kann es sich um eine Ellipse und eine Hyperbel oder um zwei Parabeln handeln.
- Die smektischen Schichten in einer fokal-konischen Domäne lassen sich durch eine Dupinsche Zyklide beschreiben, weil wie dort konzentrische Kreise als Ergebnis eines Schnittes zwischen Ellipsen und Hyperbeln erscheinen. Auch der Abstand zwischen ihnen bleibt konstant.
- Eine fokal-konische Domäne um eine Ellipse und eine Hyperbel herum ist der häufigste Defektyp in thermotropen smektischen A-Phasen. Die Hyperbel verläuft durch einen der Brennpunkte der Ellipse, und die Ellipse verläuft durch den Brennpunkt der Hyperbel.
- In einem besonderen Grenzfall einer fokal-konischen Domäne aus einer Ellipse und einer Hyperbel wird die

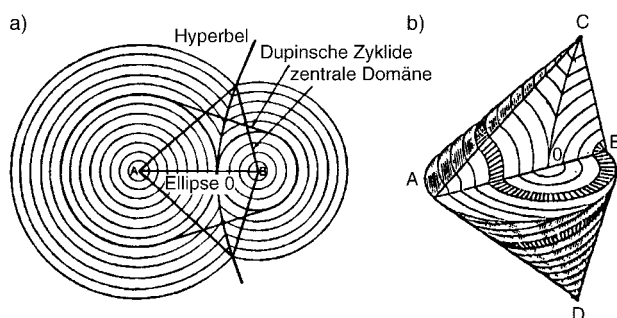


Abbildung 24. Dupinsche Zyklide und ideale fokal-konische Domäne. a) Vertikaler Schnitt, der die smektischen Schichten zeigt. Ellipse, Hyperbel, Dupinsche Zyklide und die zentrale Domäne sind durch dickere Linien gekennzeichnet. b) Fokal-konische Domäne mit smektischen Schichten und Anordnung der Moleküle darin.

Ellipse eine Gerade, die durch den Mittelpunkt eines Kreises verläuft.

5. Eine fokal-konische Domäne um zwei konfokale Parabeln herum wird **parabolische fokal-konische Domäne** genannt.
6. An jedem Punkt innerhalb einer fokal-konischen Domäne ist der Direktor entlang einer Geraden orientiert, die durch den Punkt und die beiden Liniendefekte verläuft (Ellipse und Hyperbel oder zwei Parabeln oder Kreis und Gerade). Beispiele sind die Geraden BD, BC und B0 in Abbildung 24b.

4.10.3. Polygontextur

Eine Textur, die aus fokal-konischen Domänen aus Ellipsen und Hyperbeln besteht, wobei Ellipsen oder Teile davon an den Grenzflächen sichtbar sind.

Anmerkungen:

1. Abbildung 25 illustriert diese Textur.

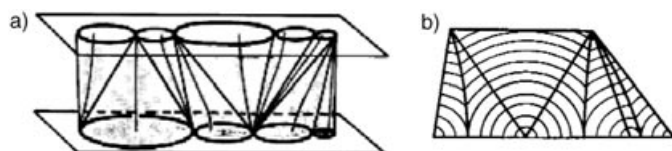


Abbildung 25. Darstellung einer SmA-Polygontextur. a) Fokal-konische Domänen, die den Raum effizient füllen, b) Schnitt durch die Domänen, der die Anordnung der smektischen Schichten zeigt.

2. Ein Zweig der Hyperbel (oberhalb oder unterhalb der Ebene der Ellipse) fehlt meist in der Polygontextur.
3. Benachbarte Domänen bilden eine Familie mit gemeinsamer Spitze, an der sich die Hyperbeln dieser Domänen treffen. Dieser gemeinsame Punkt liegt an der Oberfläche gegenüber derjenigen, auf der sich die Ellipsen befinden (Abbildung 26). Jede Familie ist durch ein Polygon begrenzt, das von Hyperbel- und Ellipsenachsen gebildet wird. Diese gehören zu fokal-konischen Domänen, die für eine stetige Änderung der smektischen Schichten zwischen den Domänen verschiedener Familien sorgen. Die Tetraeder in Abbildung 26 stellen solche Domänen dar.

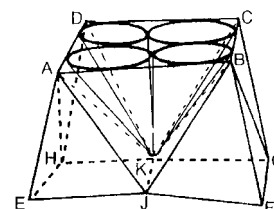


Abbildung 26. Elemente einer komplexen SmA-Polygontextur. Obere Grenzfläche: ein Polygon mit vier Ellipsen; untere Grenzfläche: zwei Polygone. Der gesamte Raum kann in drei Pyramiden (ABCDK, AEHKJ und BFGKJ) und drei Tetraeder (ABJK, ADHK und BCGK) aufgeteilt werden.

4. Die smektischen Schichten verlaufen kontinuierlich von einer fokal-konischen Domäne zur nächsten.

4.10.4. Fokal-konische Fächertextur

Eine Textur, die teilweise aus fokal-konischen Domänen besteht, deren Hyperbeln in der Beobachtungsebene liegen.

Anmerkungen:

1. Abbildung 27 illustriert diese Textur.

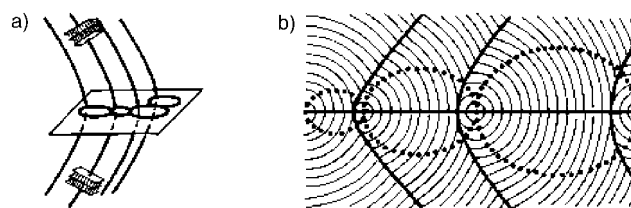


Abbildung 27. a) Konfokale Ellipsen und Hyperbeln. Die Direktoren werden an den Extrema der Hyperbeln nahezu parallel. b) Schnitt durch die Schichtstruktur. Die gepunkteten Ellipsen in der Zeichenebene sind senkrecht zu den fokal-konischen Domänen.

2. Die Schichten liegen fast senkrecht zu den Probenoberflächen. Die Scharen von Hyperbeln heißen **Grandjean-Linien**; sie bilden die Grenzflächen zwischen Domänen mit unterschiedlichen Direktororientierungen.

5. Physikalische Eigenschaften von Flüssigkristallen

Allgemeine Anmerkung: In diesem Abschnitt wird der Direktor mathematisch als Einheitsvektor \mathbf{n} mit den Komponenten n_1 , n_2 und n_3 entlang der Raumachsen X_1 , X_2 und X_3 behandelt.

5.1. Ordnungsgrad (empfohlenes Symbol: $\langle P_2 \rangle$)

Ein Parameter, der gemäß Gleichung (3) die Orientierungsfernordnung bezüglich des Direktors charakterisiert.

$$\langle P_2 \rangle = (3\langle \cos^2 \beta \rangle - 1)/2 \quad (3)$$

Darin ist β der Winkel zwischen der Hauptsymmetrieachse des Moleküls und dem Direktor, und $\langle \rangle$ symbolisiert einen Ensemblemittelwert.

Anmerkungen:

1. Der Ordnungsgrad $\langle P_2 \rangle$ beschreibt die Orientierungsfernordnung der Moleküle.
2. Bei stabförmigen Molekülen beträgt der Ordnungsgrad der effektiven Molekülsymmetrie am Nematisch-isotrop-Übergang ungefähr 0.3 (bis 0.4, der Übersetzer); er kann auf 0.7 in der nematischen Phase steigen.
3. Für Moleküle eines Nematogens mit Abweichungen von der idealen Zylindersymmetrie erhält man die Orientierungsordnung mithilfe der Saupe-Matrix, deren Elemente $S_{\alpha\beta}$ als $(3 \langle \alpha | \beta \rangle - \delta_{\alpha\beta})/2$ definiert sind (α und β sind die Richtungskosinusse zwischen dem Direktor und den Molekülachsen α bzw. β , $\delta_{\alpha\beta}$ ist das Kronecker-Symbol, und α, β bezeichnen die Molekülachsen X, Y, Z).
4. Die Moleküle eines Nematogens sind selten vollständig starr. Daher ist die durch die Saupe-Matrix definierte Orientierungsordnung nur für jede starre Untereinheit streng gültig.
5. Selbst die Ordnung von Molekülen mit Zylindersymmetrie kann nicht vollständig durch $\langle P_2 \rangle$ beschrieben werden. Eine solche Beschreibung erfordert eine einzige Orientierungsverteilungsfunktion, die als Reihenentwicklung mit einer Basis von Legendre-Polynomen $P_L(\cos \beta)$ (L gerade) dargestellt werden kann. Die Entwicklungskoeffizienten sind proportional den Ordnungsgraden $\langle P_L \rangle$ derselben Stufe. Erst diese Ordnungsgrade ermöglichen eine vollständige Beschreibung der Orientierungsfernordnung.

5.2. Deformationen in Flüssigkristallen (empfohlenes Symbol: a)

Eine Verformung, die zu einer Änderung des Direktors führt, wobei die Deformation durch einen Tensor dritter Stufe nach Gleichung (4) beschrieben wird, in der die ursprüngliche

$$a_{3ij} = n_3(\partial n_i / \partial x_j) \quad (4)$$

Orientierung \mathbf{n} als 3. Achse (X_3) gewählt wird; $i = 1, 2$; $j = 1-3$; $n_3 = 1$; n_i ist die i -te Komponente des Direktors \mathbf{n} , und x_j ist eine Koordinate auf der Achse X_j .

5.2.1. Spreizung, S-Deformation (splay deformation)

Eine Verformung senkrecht zum ursprünglichen Direktor \mathbf{n} , die durch $\text{div } \mathbf{n} \neq 0$ beschrieben wird.

Anmerkungen:

1. Siehe Abbildung 28 und Definition 5.3.
2. Eine Spreizung wird durch nichtverschwindende Ableitungen $n_3(\partial n_1 / \partial x_1)$ und $n_3(\partial n_2 / \partial x_2)$ beschrieben (Erklärung der Symbole in Definition 5.2).

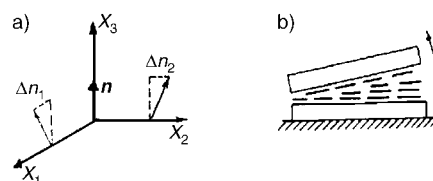


Abbildung 28. a) Änderungen der Komponenten des Direktors \mathbf{n} , die die Änderungen der Orientierung durch Spreizung beschreiben; b) Spreizung einer orientierten Schicht eines nematischen Flüssigkristalls.

5.2.2. Biegung, B-Deformation (bent deformation)

Eine Verformung in Richtung des ursprünglichen Direktors \mathbf{n} , die durch $\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n} \neq 0$ beschrieben wird.

Anmerkungen:

1. Siehe Abbildung 29 und Definition 5.3.
2. Das Ausmaß der Biegung wird durch die Komponente von $\text{rot } \mathbf{n}$ beschrieben, die senkrecht zu \mathbf{n} steht.
3. Eine Biegung wird durch nichtverschwindende Ableitungen $n_3(\partial n_1 / \partial x_3)$ und $n_3(\partial n_2 / \partial x_3)$ beschrieben (Erklärung der Symbole in Definition 5.2).

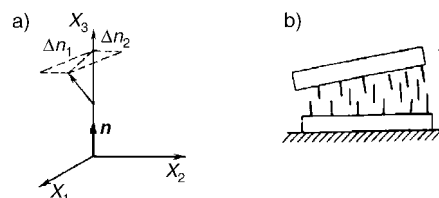


Abbildung 29. a) Änderungen der Komponenten des Direktors \mathbf{n} , die die Änderungen der Orientierung durch Biegung beschreiben; b) Biegung einer orientierten Schicht eines nematischen Flüssigkristalls.

5.2.3. Verdrillung, T-Deformation (twist deformation)

Eine Verformung einer planar orientierten Schicht in Richtung des ursprünglichen Direktors \mathbf{n} , die durch $\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n} \neq 0$ beschrieben wird.

Anmerkungen:

1. Siehe Abbildung 30 und Definition 5.3.
2. Das Ausmaß der Verdrillung wird durch die Komponente von $\text{rot } \mathbf{n}$ beschrieben, die parallel zu \mathbf{n} ist.
3. Eine Verdrillung wird durch nichtverschwindende Ableitungen $n_3(\partial n_1 / \partial x_2)$ und $-n_3(\partial n_2 / \partial x_1)$ beschrieben (Erklärung der Symbole in Definition 5.2).

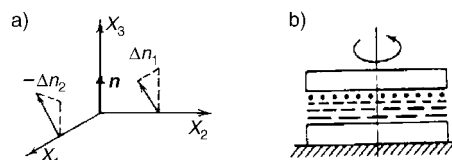


Abbildung 30. a) Änderungen der Komponenten des Direktors \mathbf{n} , die die Änderungen der Orientierung durch Verdrillung beschreiben; b) Verdrillung einer orientierten Schicht eines nematischen Flüssigkristalls.

5.3. Elastische Konstanten, Elastizitätsmodule (empfohlenes Symbol: K_i mit $i=1-3$; Einheit: N m^{-2})

Koeffizienten K_1 (Spreizung), K_2 (Verdrillung) und K_3 (Biegung) im Ausdruck für die Gibbs-Energiedichte g der Verformung in einem nematischen Flüssigkristall mit dem Direktor \mathbf{n} im Vergleich zur Energiedichte g_0 des ungestörten Flüssigkristalls [Gl. (5), gegenüber dem Original korrigiert].

$$g = g_0 + 1/2 [K_1(\text{div } \mathbf{n})^2 + K_2(\mathbf{n} \cdot \text{rot } \mathbf{n})^2 + K_3(\mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n})^2] \quad (5)$$

Anmerkungen:

1. In Gleichung (5) ist der Term g_0 gewöhnlich null, da der ungestörte Zustand eines Nematen durch eine einheitliche Orientierung charakterisiert ist. Für den Fall chiraler Nematen erlaubt ein von null verschiedener Wert von g_0 die Berücksichtigung der intrinsischen Verdrillung der Struktur. Zur Beschreibung smektischer Phasen muss aufgrund der Schichtstruktur ein weiterer Term hinzugefügt werden.
2. In Nematen aus nichtpolymeren stabförmigen Molekülen ist die elastische Konstante der Biegung, K_3 , am größten, die der Verdrillung, K_2 , am kleinsten. K_1 liegt in der Größenordnung von 10^{-11} – $10^{-12} \text{ N m}^{-2}$.
3. Die Namen Oseen, Zocher und Frank sind mit der Entwicklung einer Theorie der elastischen Eigenschaften verknüpft und daher können die elastischen Konstanten auch **Oseen-Zocher-Frank-Konstanten** genannt werden, gebräuchlich ist der Ausdruck **Frank-Konstanten**.

5.4. Leslie-Ericksen-Koeffizienten (empfohlenes Symbol: α_i mit $i=1-6$; Einheit: Pa s)

Die sechs Viskositätskoeffizienten, die zur Beschreibung der Dynamik eines inkompressiblen nematischen Flüssigkristalls benötigt werden.

Anmerkungen:

1. Mit der Onsagerschen Reziprozitätsbeziehung für irreversible Prozesse ($\alpha_2 + \alpha_3 = \alpha_6 - \alpha_5$) sinkt die Zahl der unabhängigen Koeffizienten auf fünf.
2. Für nematische Phasen niedermolekularer Verbindungen findet man Leslie-Ericksen-Koeffizienten in der Größenordnung von 10^{-2} – 10^{-1} Pa s .

5.5. Miesowicz-Koeffizienten (empfohlenes Symbol: η_i mit $i=1-3$; Einheit: Pa s)

Das Verhältnis von Scherspannung σ und Gradient χ der Schergeschwindigkeit für einen nematischen Flüssigkristall mit einer bestimmten Direktororientierung i in einem äußeren Feld [Gl. (6)].

$$\eta_i = \sigma / \chi \quad (6)$$

Anmerkungen:

1. Die drei Miesowicz-Koeffizienten η_1 , η_2 und η_3 beschreiben die Scherströmung einer nematischen Phase für drei verschiedene Direktororientierungen (Abbildung 31): η_1 , wenn der Direktor parallel zur Strömungsachse liegt, η_2 , wenn der Direktor parallel zum Geschwindigkeitsgradienten liegt, und η_3 , wenn der Direktor senkrecht zur Strömungsachse und zum Geschwindigkeitsgradienten liegt.

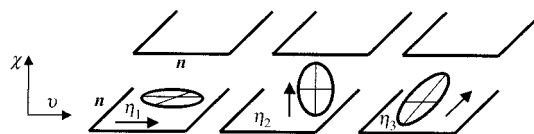


Abbildung 31. Direktororientierungen einer nematischen Phase unter Scherung mit einer Geschwindigkeit v und zugehörige Miesowicz-Koeffizienten.

2. Gewöhnlich findet man $\eta_1 < \eta_2 < \eta_3$.
3. Die Miesowicz-Koeffizienten sind mit den Leslie-Ericksen-Koeffizienten (Definition 5.4) durch die Gleichungen (7a)–(7c) verknüpft.

$$\eta_1 = 0.5(\alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_6) \quad (7a)$$

$$\eta_2 = 0.5(\alpha_4 + \alpha_5 - \alpha_2) \quad (7b)$$

$$\eta_3 = 0.5\alpha_4 \quad (7c)$$

4. Das äußere Feld, das den Direktor orientiert, muss hinreichend stark sein, um eine konstante Ausrichtung zu gewährleisten.

5.6. Reibungskoeffizienten, Rotationsviskositätskoeffizienten (empfohlenes Symbol: γ_i , $i=1,2$; Einheit: Pa s)

Die Koeffizienten, die die Energiedissipation aufgrund der Drehung des Direktors in einem inkompressiblen nematischen Flüssigkristall beschreiben.

Anmerkungen:

1. Die Rotationsviskositätskoeffizienten niedermolekularer Flüssigkristalle liegen in der Größenordnung von 10^{-2} – 10^{-1} Pa s ; bei polymeren Flüssigkristallen hängen sie stark von der relativen Molekülmasse des Polymers ab.
2. Die Reibungskoeffizienten lassen sich durch die Leslie-Ericksen-Koeffizienten (siehe Definition 5.4) ausdrücken [Gl. (8) und (9)].

$$\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2 \quad (8)$$

$$\gamma_2 = \alpha_6 - \alpha_5 \quad (9)$$

3. γ_1 wird häufig Rotationsviskosität oder Verdrillungsviskosität genannt, d.h., der Koeffizient beschreibt die Viskosität, die der Rotation des Direktors ohne Materialfluss zugeordnet ist.

5.7. Rückfluss (backflow)

Die Bewegung eines Flüssigkristalls, die davon abhängt, wie leicht sich der Direktor in die Richtung umorientiert, die dem äußeren Feld entgegengesetzt ist.

5.8. Anisotropie physikalischer Eigenschaften

Die Richtungsabhängigkeit bestimmter physikalischer Eigenschaften wie der Dielektrizitätskonstanten, des Brechungsindex und der magnetischen Suszeptibilität.

Anmerkung: Die Symmetrie des Tensors, der die mittlere anisotrope Eigenschaft beschreibt, kann nicht niedriger sein als die Symmetrie der Phase.

5.8.1. Anisotropie einer uniaxialen Mesophase (empfohlenes Symbol: $\Delta\tilde{\xi}$)

Der Wert einer Größe $\tilde{\xi}$ parallel zum Direktor ($\tilde{\xi}_{\parallel}$) abzüglich des Wertes senkrecht zu ihm ($\tilde{\xi}_{\perp}$, Gl. (10)).

$$\Delta\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_{\parallel} - \tilde{\xi}_{\perp} \quad (10)$$

Anmerkungen:

1. Die Tilde dient dazu, die Eigenschaft einer flüssigkristallinen Mesophase zu bezeichnen.
2. Die Anisotropie $\Delta\tilde{\xi}$ stellt ein praktisches Maß der Orientierungsordnung einer Mesophase dar und verschwindet notwendigerweise in der isotropen Phase.
3. Für Mesophasen aus zylindersymmetrischen Molekülen existiert ein exakter Zusammenhang [Gl. (11)] zwischen

$$\Delta\tilde{\xi} = \frac{2}{3}(\tilde{\xi}_{zz} - \tilde{\xi}_{xx})\langle P_2 \rangle / 3 \quad (11)$$

der **magnetischen Anisotropie** und dem Ordnungsgrad zweiter Stufe $\langle P_2 \rangle$ (siehe Definition 5.1).

5.8.2. Anisotropien zweiaxialer Mesophasen (empfohlene Symbole: $\Delta\tilde{\xi}$ und $\delta\tilde{\xi}$)

Werden die Hauptachsen X, Y und Z der Phase (entsprechend den Direktoren ***l***, ***m*** und ***n***; siehe Definition 3.3, Anmerkung 1) so gewählt, dass $\tilde{\xi}_{zz} > \tilde{\xi}_{xx} > \tilde{\xi}_{yy}$, sind die zweiaxialen Anisotropien $\Delta\tilde{\xi}$ (Hauptanisotropie) und $\delta\tilde{\xi}$ gemäß Gleichung (12a) bzw. (12b) definiert.

$$\Delta\tilde{\xi} = \tilde{\xi}_{zz} - (\tilde{\xi}_{xx} + \tilde{\xi}_{yy})/2 \quad (12a)$$

$$\delta\tilde{\xi} = (\tilde{\xi}_{xx} - \tilde{\xi}_{yy}) \quad (12b)$$

Anmerkungen:

1. Die zweiaxiale Fernordnung der Mesophase führt zu drei Hauptkomponenten tensorieller Eigenschaften zweiter Stufe und daher zu zwei Maßen für die Anisotropie: $\Delta\tilde{\xi}$ und $\delta\tilde{\xi}$.

2. Am Übergang zu einer einachsigen Mesophase verschwindet $\delta\tilde{\xi}$. Die **relative Zweiaxialität** η ist als Verhältnis von $\delta\tilde{\xi}$ zu $\Delta\tilde{\xi}$ definiert.

5.9. Ferroelektrische Effekte

Eine ferroelektrische Mesophase entsteht beispielsweise durch Symmetriebrechung in einer Mesophase mit geneigter Molekülanordnung bei Einführung molekularer Chiralität, und folglich Mesophasenchiralität, vorausgesetzt, die Bildung einer Helix wird unterdrückt.^[72]

Anmerkungen:

1. Liegen ungleich viele Schichten mit entgegengesetzten Neigungsrichtungen vor, so kann die smektische Mesophase ferroelektrisch sein.^[73,74]
2. Das Auftreten einer spontanen Polarisation \mathbf{P}_s ^[75] in chiralen smektischen Mesophasen mit geneigter Anordnung der Moleküle ist auf eine Vorzugsrichtung der Molekül-Querdipolmomente zurückzuführen.
3. Die Polarisation \mathbf{P}_s ^[75] kann mithilfe eines elektrischen Feldes zwischen zwei stabilen Zuständen hin- und hergeschaltet werden, die auch nach Ausschalten des Feldes erhalten bleiben.
4. Die Schaltzeit τ hängt entsprechend Gleichung (13) von

$$\tau = \gamma_1 \sin\theta / (\mathbf{P}_s \cdot \mathbf{E}) \quad (13)$$

der Verdrillungviskosität γ_1 (siehe Definition 5.6, Anmerkung 3) und dem Neigungswinkel θ ab.

5. Die spontane Polarisation hängt von der Querkomponente μ_t des Molekül-Dipolmoments, der Teilchendichte ρ und dem polaren Ordnungsgrad $\langle \cos\phi \rangle$ erster Stufe (also dem Ensemblemittelwert von $\cos\phi$, ϕ ist der Winkel zwischen der Querachse und dem kleineren Direktor) gemäß Gleichung (14) ab.

$$|\mathbf{P}_s| = \rho \mu_t \langle \cos\phi \rangle \quad (14)$$

6. Die spontane Polarisation $|\mathbf{P}_s|$ liegt in chiral-smektischen C-Mesophasen typischerweise zwischen 10^{-3} und 10^{-4} Cm^{-2} .
7. Alterniert die Neigungsrichtung von Schicht zu Schicht, ist die smektische Mesophase antiferroelektrisch. Solche Mesophasen zeigen keine spontane Polarisation. Sie können durch Anlegen eines elektrischen Feldes in eine ferroelektrische Struktur überführt werden.

5.10. Fredericks-Effekt

Eine elastische Verformung des Direktors eines einheitlich orientierten, dünnen Films eines nematischen Flüssigkristalls zwischen zwei Grenzflächen durch ein magnetisches oder elektrisches Feld.^[76]

Anmerkungen:

1. Der Fredericks-Effekt tritt auf, wenn die Stärke des Feldes einen bestimmten Schwellenwert überschreitet (siehe Definition 5.12).

2. Im magnetischen Feld ist es die Schwellenflussdichte B_{th} , die gemäß Gleichung (15) von der Filmdicke d , der

$$B_{th} = (\pi/d)(\mu_0 K_i / \Delta\tilde{\chi})^{1/2} \quad (15)$$

magnetischen Anisotropie $\Delta\tilde{\chi}$ (siehe Definition 5.8.1) und einer elastischen Konstanten K_i abhängt. Die Konstante K_i ist von den experimentellen Bedingungen abhängig; μ_0 ist die Permeabilität des Vakuums.

3. Im elektrischen Feld ist es die Schwellenfeldstärke E_{th} , die gemäß Gleichung (16) von der dielektrischen Anisotropie $\Delta\tilde{\epsilon}$ abhängt; ϵ_0 ist die Permittivität des Vakuums.

$$E_{th} = (\pi/d)(K_i / \epsilon_0 \Delta\tilde{\epsilon})^{1/2} \quad (16)$$

5.11. Elektrokliner Effekt

Eine durch ein elektrisches Feld induzierte Neigung der Moleküle in einer chiral-smektischen A-Mesophase wird elektrokliner Effekt genannt.^[77]

Anmerkung: In manchen Substanzen konnten induzierte Neigungswinkel bis zu 10° beobachtet werden.

5.12. Schwellenfeldstärken (threshold fields; empfohlene

Symbole: E_{th} für elektrische Schwellenfeldstärke und B_{th} für Schwellenflussdichte;^[78] **Einheit** Vm^{-1} bzw. T)

Die kritische elektrische oder magnetische Feldstärke, die nötig ist, um die Gleichgewichtsorientierung des Direktors in Konkurrenz mit Oberflächenkräften zu ändern.

Anmerkung: Siehe Definition 5.10, Anmerkungen 1–3.

5.13. Elektrohydrodynamische Instabilitäten (empfohlene Abkürzung: EHD-Instabilitäten)

Instabilitäten, die auf die Anisotropie der Leitfähigkeit zurückzuführen sind und zu einer periodischen Verformung des Direktorfeldes in einer Monodomäne unter dem Einfluss einer Gleichspannung oder einer niederfrequenten Wechselspannung führen.

Anmerkungen:

1. Zum Begriff Monodomäne siehe Definition 4.2.
2. Die wesentlichen Parameter, die das Entstehen von EHD-Instabilitäten beeinflussen, sind die dielektrische Anisotropie $\Delta\tilde{\epsilon}$ und die (ionische) Leitfähigkeitsanisotropie $\Delta\tilde{\sigma}$. Direktorverzerrungen, Raumladungen und die Bewegung des Fluids sind durch das elektrische Feld gekoppelt. Oberhalb eines Schwellenwerts werden Fluktuationen dieser Größen verstärkt und führen zu EHD-Instabilitäten.

5.14. Williams-Kapustin-Domänen

Bereiche in einem Flüssigkristall mit spezifischen zellenartigen Strömungsmustern in Form langer Rollen, die durch Anlegen eines elektrischen Feldes senkrecht zu einem nematischen Film mit ursprünglich planarer Anordnung des Direktors entstehen.

Anmerkungen:

1. Der nematische Flüssigkristall muss eine negative dielektrische Anisotropie ($\Delta\epsilon < 0$) und eine positive Leitfähigkeitsanisotropie ($\Delta\sigma > 0$) haben. Die optische Textur des Flussmusters besteht aus einer regelmäßigen Anordnung schwarzer und weißer Streifen gleicher Breite senkrecht zur ursprünglichen Direktorrichtung. Diese Streifen sind die Folge einer periodischen Änderung des außerordentlichen Brechungsindex aufgrund von Variationen in der Direktororientierung.
2. Die Domänen existieren nur in einem engen Spannungsbereich (siehe Definition 5.15, Anmerkung 1).

5.15. Dynamischer Streueffekt (empfohlene Abkürzung: DS-Effekt)

Die oberhalb einer kritischen elektrischen Spannung innerhalb eines nematischen Flüssigkristalls entstehenden Turbulenzen, die zu einer starken Lichtstreuung führen.

Anmerkungen:

1. Beim DS-Effekt werden die Williams-Kapustin-Domänen verzerrt und beweglich, die makroskopische Direktoranordnung ist vollständig zerstört.
2. Im Flüssigkristall verursacht der DS-Effekt ein komplexes optisches Erscheinungsbild.

5.16. Flexoelektrischer Effekt

Die elektrische Polarisation, die durch Biegung oder Spreizung des Direktors in einer nematischen Phase hervorgerufen wird.

Anmerkungen:

1. Abbildung 32 illustriert diesen Effekt.
2. Die molekularen Ursachen für das Auftreten dipolarer Flexoelektrizität sind die besondere Formanisotropie der

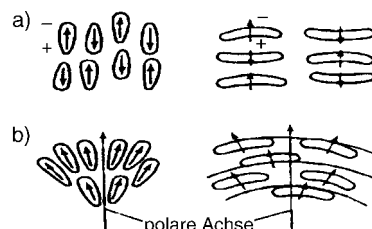


Abbildung 32. Flexoelektrischer Effekt. a) Strukturen nichtdeformierter nematischer Flüssigkristalle aus birnen- oder bananenförmigen Molekülen; b) dieselben Flüssigkristalle unter dem Einfluss von Spreizung oder Verbiegung.

Moleküle (z.B. birnen- oder bananenförmige Moleküle) und ein permanentes Dipolmoment.

3. Die Nettopolarisation \mathbf{P} ist der jeweiligen Deformation proportional und von den flexoelektrischen Koeffizienten e_1 und e_3 abhängig [Gl. (17)]; diese haben beliebiges

$$\mathbf{P} = e_1 \mathbf{n} (\text{div } \mathbf{n}) + e_3 \mathbf{n} \times \text{rot } \mathbf{n} \quad (17)$$

Vorzeichen und die gleiche Einheit wie das elektrische Potential (JC^{-1}).

4. Der flexoelektrische Effekt ist das Analogon zum piezoelektrischen Effekt in Festkörpern, bei dem die Polarisierung durch einen mechanischen Stress verursacht wird, der eine Translationsdeformation des Kristalls verursacht. Der flexoelektrische Effekt in einem Flüssigkristall wird ausschließlich durch eine Orientierungsdeformation verursacht.

5.17. Flexoelektrische Domäne

Eine Domäne mit periodischer Deformation aufgrund des inversen flexoelektrischen Effekts in einem nematischen Flüssigkristall.

Anmerkung: Eine flexoelektrische Domäne tritt auf, wenn für $K_1 = K_3 = K$ und $e_1 = -e_3 = e$ $\Delta \tilde{\epsilon} < 4\pi e l / K$ gilt (K : elastische Konstante, e : flexoelektrischer Koeffizient; siehe Definition 5.3 bzw. 5.16, Anmerkung 3).

5.18. Drehzelle (twisted-nematic cell)

Ein verdrehter nematischer Flüssigkristall, der mit planarer Randanbindung zwischen zwei Glasplatten eingeschlossen ist, wobei eine der Platten gegen die andere um eine Achse senkrecht zu ihr gedreht ist.

5.19. Einschaltzeit des elektrooptischen Effekts, Anklingzeit (empfohlenes Symbol: τ_{on} , Einheit: s)

Die Zeit nach dem Einschalten der Spannung bis zur Abnahme der Lichtintensität, die durch eine elektrooptische Drehzelle mit gekreuzten Polarisatoren transmittiert wird, auf 90 % des Ausgangswerts.^[79]

Anmerkung: Im ausgeschalteten Zustand enthält die elektrooptische Zelle einen dünnen Film eines nematischen Flüssigkristalls mit senkrecht zueinander stehenden Direktoren an den beiden Glasplatten; der Direktor muss also eine Drehung um 90° über die Dicke des Films hinweg vollführen.

5.20. Ausschaltzeit des elektrooptischen Effekts, Abklingzeit (empfohlenes Symbol: τ_{off} , Einheit: s)

Die Zeit nach dem Abschalten der Spannung bis zur Zunahme der Lichtintensität, die durch eine elektrooptische Drehzelle mit gekreuzten Polarisatoren transmittiert wird, auf 90 % des Endwerts.

Anmerkung: Siehe Anmerkung zu Definition 5.19.

5.21. Anstiegszeit (Einheit: s)

Die Zeit, die eine elektrooptische nematische Zelle nach dem Einschalten der Spannung für eine Abnahme der Lichtintensität von 90 auf 10 % der maximalen Intensität benötigt.

Anmerkung: Siehe Anmerkung zu Definition 5.19.

5.22. Abfallzeit (Einheit: s)

Die Zeit, die eine elektrooptische nematische Zelle nach dem Abschalten der Spannung für eine Zunahme der Lichtintensität von 10 auf 90 % der maximalen Intensität benötigt.

Anmerkung: Siehe Anmerkung zu Definition 5.19.

5.23. Wirt-Gast-Effekt

Feldinduzierte Änderung der Orientierung in einer Mesophase (Wirt) gelöster dichroitischer Farbstoffmoleküle (Gast) oder dichroitischer Farbstoffgruppen (Gast) eines Polymers (Wirt), die zu Änderungen des Absorptionsspektrums einer mesomorphen Mischung führt.

6. Flüssigkristallpolymere

6.1. Flüssigkristallpolymer, polymerer Flüssigkristall, flüssigkristallines Polymer (empfohlene Abkürzungen: LCP, PLC)

Ein polymeres Material, das unter geeigneten Bedingungen unter Druck, Temperatur und Zusammensetzung als flüssigkristalline Mesophase existiert.

6.2. Hauptketten-Flüssigkristallpolymer, flüssigkristallines Hauptkettenpolymer (main-chain LC polymer; empfohlene Abkürzungen: MCPLC, MCLCP)

Ein Polymer, das mesogene Gruppen in der Hauptkette, nicht aber in Seitenketten enthält (Abbildung 33).

Anmerkungen:

- Man erhält ein MCPLC durch Verbinden geeigneter relativ starrer Einheiten entweder direkt oder über funktionelle Gruppen.

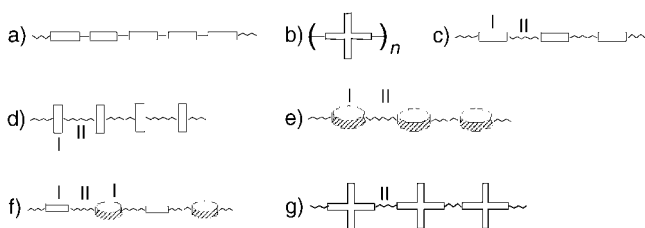


Abbildung 33. Beispiele für flüssigkristalline Hauptkettenpolymere (I: mesogene Gruppe, II: Spacer).

- Die starren Einheiten (I) können direkt (Abbildung 33 a) oder über flexible Spacer (II, siehe Definition 6.4) verbunden sein (Abbildung 33 b–g).
- MCPLCs mit kreuzförmigen mesogenen Resten sind als **Kreuz- oder Stern-Flüssigkristallpolymere** bekannt (Abbildung 33 b und g).
- Die starren Gruppen können, müssen aber nicht selbst mesogen sein.

6.3. Seitengruppen- oder Seitenketten-Flüssigkristallpolymer, flüssigkristallines Seitengruppen- oder Seitenkettenpolymer, Polymer mit mesogenen Seitengruppen oder -ketten, kammförmiges (kammartiges) Flüssigkristallpolymer (side-group oder side-chain LC polymer; empfohlene Abkürzungen: SGPLC, SCPLC, SGLCP, SCLCP)

Ein Polymer mit mesogenen Gruppen ausschließlich in den Seitengruppen oder -ketten (Abbildung 34).

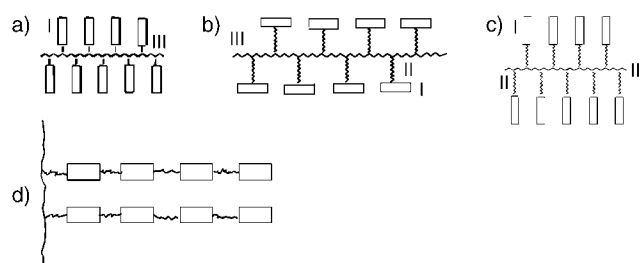


Abbildung 34. Beispiele für flüssigkristalline Seitengruppenpolymere (I: mesogene Gruppe, II: Spacer, III: Hauptkette). Für (a) wird der Begriff **Seitengruppe** verwendet, für (b) **lateral (seitlich) angebunden**, für (c) **terminal (längs) angebunden** und für (d) **Seitenkette**.

Anmerkungen:

- Die mesogenen Gruppen (I) können in einem SGPLC entweder direkt (Abbildung 34 a) oder über einen flexiblen Spacer (Abbildung 34 b und c) an die Hauptkette (III) gebunden sein.
- In den in Abbildung 34 gezeigten Strukturen können die Seitengruppen auch durch mesogene Gruppen enthaltene Ketten ersetzt werden.
- Beispiele für Polymerhauptketten sind Polyacrylate, Polymethacrylate und Polysiloxane; die Spacer sind typischerweise Polymethylen-, Polyoxyethylen- oder Polysiloxaneinheiten.
- Die Seitengruppenstrukturen solcher Polymere begünstigen die Bildung von Mesophasen, d. h., die Gruppen sind mesogen, müssen aber nicht selbst mesomorph sein. Beispiele sind in Schema 1 und bei Definition 2.11.2.1 zu finden.
- Wenn die mesogenen Seitengruppen stabförmig (calamitisch) sind, kann das Polymer in Abhängigkeit von seiner genauen Struktur die typischen Mesophasen calamitischer Moleküle bilden: nematisch, chiral-nematisch und smektisch. SGPLCs mit lateral (seitlich) angebundenen mesogenen Gruppen sind vorwiegend nematisch oder chiral-

nematisch. Analog begünstigen diskotische Seitengruppen die Bildung diskotisch-nematischer oder columnarer Mesophasen, während amphiphile Seitengruppen meist zu thermotropen oder lyotropen Mesophasen führen.

- Eine große Vielfalt an Copolymeren kann hergestellt werden. So können nichtmesogene zusammen mit mesogenen Seitengruppen verwendet werden, und die Polymerhauptkette kann in unterschiedlichem Ausmaß mit Seitengruppen oder -ketten substituiert sein.

6.4. Spacer

Ein flexibles Segment, mit dem die mesogenen Gruppen in den Molekülen der MCPLCs miteinander verknüpft sind oder das die mesogenen Gruppen als Seitengruppen mit der Polymerhauptkette eines SGPLC verbindet.

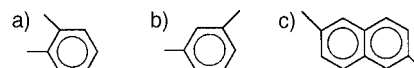
Anmerkungen:

- Spacer sind typischerweise Polymethylen-, Polyoxyethylen- oder Polysiloxanketten.
- Der Begriff wird auch für die Brückengruppen zwischen zwei oder mehr mesogenen Resten in Flüssigkristalloligomeren (siehe Definition 2.11.2.9) verwendet.

6.5. Störgruppe (disruptor)

Eine chemische Gruppe, die die Linearität der Hauptkette von MCLCP-Molekülen stört.

Anmerkung: Beispiele sind starre Knick- (Schema 6 a und b) und Kurbelwellengruppen (Schema 6 c).



Schema 6. Beispiele für Störgruppen.

6.6. Kombiniertes flüssigkristallines Polymer

Ein flüssigkristallines Polymer mit mesogenen Gruppen sowohl in der Hauptkette als auch in den Seitengruppen.

Anmerkung: Die mesogenen Seitengruppen können als seitliche (laterale) Substituenten an die – direkt oder über Spacer miteinander verbundenen – mesogenen Gruppen in der Hauptkette (Abbildung 35 a, b) oder an die Spacer in der Hauptkette (Abbildung 35 c) gebunden sein.



Abbildung 35. Kombinierte flüssigkristalline Polymere.

6.7. Starre Kette

Die stabförmige Kette eines MCPLC mit direkten Bindungen zwischen den mesogenen Gruppen, deren Persistenz-

länge mindestens vergleichbar mit der Umrisslänge und wesentlich größer als der Kettendurchmesser ist.

Anmerkungen:

1. Die Persistenzlänge ist im Grenzfall unendlicher Kettenlänge charakteristisch für die Steifigkeit der Kette [siehe *Compendium of Macromolecular Nomenclature* (Hrsg.: W. V. Metanomski), Blackwell, Oxford, **1988**, S. 47].
2. Polymere, die ausschließlich aus starren, stabförmigen Gruppen oder Ketten aufgebaut sind, bilden gewöhnlich keine thermotropen Mesophasen, da ihre Zersetzung bei Temperaturen unterhalb des Schmelzpunkts beginnt.
3. Polymere, die ausschließlich aus starren, stabförmigen Gruppen oder Ketten aufgebaut sind, können in Lösung unter geeigneten Bedingungen flüssigkristalline Mesophasen bilden. Diese werden mitunter als lyotrop beschrieben, was jedoch nicht zutreffend ist, da das Lösungsmittel keine Bildung von Aggregaten oder Micellen induziert.

6.8. Halbstarre Kette

Eine Kette, deren Umrisslänge größer als die Persistenzlänge ist; das Verhältnis dieser Größen ist jedoch kleiner als der Gaußsche Grenzwert.

Anmerkung: Einige Polymere mit halbstarren Ketten sind amphiphile Mesogene (siehe Definition 2.11.1).

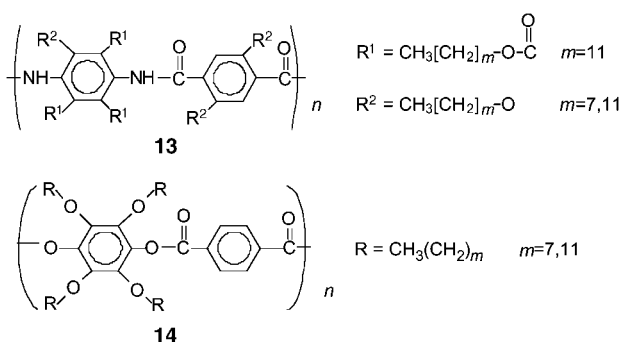
Beispiele: Polyisocyanate und (2-Hydroxyethyl)cellulose

6.9. Brettförmiges Polymer

Ein Polymer mit starrer Hauptkette, an die viele Seitengruppen gebunden sind, sodass die Wiederholungseinheit die Form eines Bretts hat.

Anmerkungen:

1. Die starre Hauptkette hat häufig eine polyester- (**14**), polyamid- (**13**) oder poly(esteramid)artige Struktur.



2. Ein polymerer Flüssigkristall aus Makromolekülen mit brettförmiger Gestalt kann brettförmiges Flüssigkristallpolymer genannt werden. Solche Polymere können sandische Mesophasen bilden (siehe Definition 3.4).

6.10. Flüssigkristalldendrimer, dendrimere Flüssigkristall, dendritischer Flüssigkristall

Ein hochverzweigtes Oligomer oder Polymer mit dendritischer Struktur, das mesogene Gruppen enthält und Mesophasen bilden kann.^[80]

Anmerkungen:

1. Die mesogenen Gruppen können entlang der Ketten des Moleküls (Abbildung 36a) oder als Endgruppen (Abbildung 36b) gebunden sein.
2. Die mesogenen Gruppen können z.B. stab- oder scheibenartig sein und seitlich oder längs an die flexiblen Spacer gebunden sein.

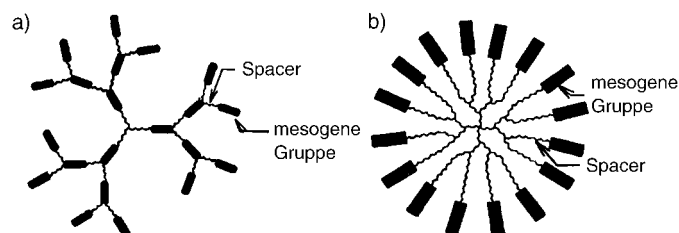


Abbildung 36. Flüssigkristalldendrimere mit mesogenen Gruppen im gesamten Makromolekül (a) oder mit mesogenen Endgruppen (b).

6.11. Flüssigkristallines hyperververzweigtes Polymer

Ein Polymer aus hochverzweigten Makromolekülen mit mesogenen Gruppen, in dem jede lineare Unterkette in beiden Richtungen zu mindestens zwei anderen Unterketten führen kann.

6.12. Streifentextur

Abwechselnde helle und dunkle Streifen, die man nach Scherung in vielen Polymeren mit nematischen und chiral-nematischen Hauptketten beobachtet.

Anmerkungen:

1. Die Streifen verlaufen stets senkrecht zur Scherrichtung.
2. Meist erscheinen die Streifen nach Ende der Scherung, unter bestimmten Umständen können sie aber auch während dieses Prozesses auftreten.
3. Die Streifen sind auf eine periodische Variation der Direktororientierung bezüglich der Strömungsachse zurückzuführen.

7. Glossar empfohlener Abkürzungen und Symbole

7.1. Abkürzungen

b (Index)	zweiachsiges Mesophasen
BP	Blaue Phase
Col	columnare Mesophasen
Col _h	hexagonal columnare Mesophasen
Col _{ob}	schiefwinklig columnare Phase

Col _r	rechtwinklig columnare Mesophase	~	modulierte smektische Mesophase
Cr	kristalline Phase	<i>a</i>	Deformationen in Flüssigkristallen
DS-Effekt	dynamischer Streueffekt	<i>B_{th}</i>	Schwellenflussdichte
EHD instabilities	elektrohydrodynamische Instabilitäten	<i>c</i> (Index)	interkalierte smektische Mesophase
<i>g</i> (Index)	glasartige Mesophase	<i>e₁, e₃</i>	flexoelektrische Koeffizienten
I	isotrope Phase	<i>E_{th}</i>	Schwellenfeldstärke
LC	Flüssigkristall	<i>K_i</i>	elastische Konstanten, Elastizitätsmodule
LCP	Flüssigkristallpolymer, polymerer Flüssigkristall, flüssigkristallines Polymer	<i>l, m</i>	zwei der Direktoren einer zweiachsigen Mesophase
MCLCP oder MCPLC	Hauptketten-Flüssigkristallpolymer, flüssigkristallines Hauptkettenpolymer	<i>n</i>	Direktor
MGBC*	Melted-Grain-Boundary-Mesophase	<i>n_i</i>	Direktorkomponente
N	nematische Mesophase	$\langle P_2 \rangle$	Ordnungsgrad
N*	chiral-nematische Mesophase, cholesterische Mesophase	<i>P</i>	Nettopolarisation
N _b	zweiachsig nematische Mesophase	<i>P_s</i>	spontane Polarisation
N _u	einachsig nematische Mesophase	<i>s</i>	Disklinationsstärke
PLC	Flüssigkristallpolymer, polymerer Flüssigkristall, flüssigkristallines Polymer	<i>T*</i>	Divergenztemperatur, Vorumwandlungstemperatur
re (Index)	Reentrant-Mesophase	<i>T_{cl}</i> oder <i>T_i</i>	Klärpunkt, Klärtemperatur, Isotropisierungstemperatur
Σ	sanidische Mesophase	<i>T_{XY}</i>	Umwandlungstemperatur (X und Y stehen für zwei Mesophasen oder für eine Phase und eine Mesophase)
Σ _o	geordnete sanidische Mesophase		
Σ _r	rechtwinklig sanidische Mesophase		
SCLCP, SCPLC, SGLCP oder SGPLC	Seitengruppen- oder Seitenketten-Flüssigkristallpolymer, flüssigkristallines Seitenkettenpolymer, Polymer mit mesogenen Seitengruppen oder -ketten, kammförmiges (kammartiges) Flüssigkristallpolymer		
Sm	smektische Mesophase		
SmA, SmA ₁ , SmA ₂ , SmA _d	smektische A-Mesophasen		
SmA _b	zweiachsig smektische A-Mesophase		
SmB, SmB _{hex}	smektische B-Mesophase		
SmC*	chiral-smektische C-Mesophase		
SmC, SmC ₁ , SmC ₂ , SmC _d	smektische C-Mesophasen		
SmF	smektische F-Mesophase		
SmF*	chiral-smektische F-Mesophase		
SmI	smektische I-Mesophase		
SmI*	chiral-smektische I-Mesophase		
TGB	Twist-Grain-Boundary-Mesophase		
TGBA*	Twist-Grain-Boundary-A*-Mesophase		
TGBC*	Twist-Grain-Boundary-C*-Mesophase		

7.2. Symbole

α_i	Leslie-Ericksen-Koeffizienten
γ_i	Reibungskoeffizienten, Rotationsviskositätskoeffizienten
η	relative Zweiachsigkeit einer zweiachsigen Mesophase
η_i	Miesowicz-Koeffizienten
τ_{off}	Ausschaltzeit des elektrooptischen Effekts, Abklingzeit
τ_{on}	Einschaltzeit des elektrooptischen Effekts, Anklingzeit
ΔS_{XY}	Umwandlungsentropie

- [1] *Handbook of Liquid Crystals, Vol. 1, 2a, 2b und 3* (Hrsg.: D. Demus, G. W. Gray, H.-W. Spiess, V. Vill), Wiley-VCH, Weinheim, **1998**.
- [2] *Polymer Liquid Crystals Mechanical and Thermophysical Properties* (Hrsg.: W. Brostow), Chapman & Hall, London, **1996**.
- [3] V. Vill, LIQCRYST 2.1, Database of Liquid Crystalline Compounds for Personal Computers, LCI Publishers, Hamburg, **1996**.
- [4] L. M. Blinov, V. G. Chigrinov, *Electrooptic Effects in Liquid Crystal Materials*, Springer, New York, **1994**.
- [5] *Liquid Crystalline and Mesomorphic Polymers* (Hrsg.: V. P. Shibaev, L. Lam), Springer, New York, **1994**.
- [6] *Topics in Physical Chemistry, Vol. 3* (Hrsg.: H. Stegmeier), Springer, New York, **1994**.
- [7] *The Molecular Dynamics of Liquid Crystals* (Hrsg.: G. R. Luckhurst, C. A. Veracini), Kluwer, Dordrecht, **1994**.
- [8] P.-G. de Gennes, J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, 2. Aufl., Clarendon, Oxford, **1993**.
- [9] *Liquid-Crystal Polymers* (Hrsg.: N. A. Platé), Plenum, New York, **1993**.
- [10] S. Chandrasekhar, *Liquid Crystals*, 2. Aufl., University Press, Cambridge, **1992**.

Die *Angewandte Chemie* veröffentlicht Übersetzungen von Recommendations und Technical Reports der IUPAC, um die chemische Fachsprache im Deutschen zu fördern. Sauber definierte Begriffe und klare Nomenklaturregeln bilden die Basis für eine Verständigung zwischen den Wissenschaftlern einer Disziplin und sind für den Austausch zwischen Wissenschafts- und Fachsprache sowie Allgemesprache essenziell. Alle Übersetzungen werden von einem ausgewiesenen Experten (dem „Obmann“) geprüft, korrigiert und autorisiert. Die nächste Übersetzung („Modellierung der Lebensdauer und Abbaubarkeit organischer Verbindungen in Luft, Boden und Wasser“) ist für Heft 05/2005 vorgesehen. Empfehlungen von Themen und Obleuten sind willkommen.

- [11] A. M. Donald, A. H. Windle, *Liquid Crystalline Polymers*, Cambridge University Press, Cambridge, **1992**.
- [12] *Liquid Crystal Polymers: From Structures to Applications* (Hrsg.: A. A. Collyer), Elsevier Applied Science, London, **1992**.
- [13] „Liquid Crystals“: V. Vill in *Landolt-Börnstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. New Series. Group IV: Macroscopic and Technical Properties of Matter, Vol. 7*, Subvolumes a–f, Springer, Berlin (**1992**–).
- [14] *Liquid Crystallinity in Polymers. Principles and Fundamental Properties* (Hrsg.: A. Ciferri), VCH, New York, **1991**.
- [15] C. Noël, P. Navard, *Prog. Polym. Sci.* **1991**, 16, 55.
- [16] *Ferroelectric Liquid Crystals* (Hrsg.: J. W. Goodby), Gordon and Breach, Philadelphia, **1991**.
- [17] *Liquid Crystals. Applications and Uses, Vols. 1–3*, (Hrsg.: B. Bahadur), World Scientific, Singapur, **1990/1992**.
- [18] W. Brostow, *Polymer* **1990**, 31, 979.
- [19] D. Demus, *Liq. Cryst.* **1989**, 5, 75.
- [20] *Side-Chain Liquid Crystal Polymers* (Hrsg.: C. B. McArdle), Blackie, Glasgow, **1989**.
- [21] N. A. Platé, V. P. Shibaev, *Comb-Shaped Polymers and Liquid Crystals*, Plenum, New York, **1988**.
- [22] B. S. Hsiao, M. T. Shaw, E. T. Samulski, *Macromolecules* **1988**, 21, 543.
- [23] G. Vertogen, W. H. De Jeu, *Thermotropic Liquid Crystals, Fundamentals, Vol. 45*, Springer, Berlin, **1988** (*Springer Series in Classical Physics*).
- [24] S. Chandrasekhar, N. V. Madhusudana, *Proc. Indian Acad. Sci. (Chem. Sci.)* **1985**, 94, 139.
- [25] *Polymeric Liquid Crystals* (Hrsg.: A. Blumstein), Plenum, New York, **1985**.
- [26] *Recent Advances in Liquid-Crystalline Polymers* (Hrsg.: L. Chapoy), Elsevier Applied Science, London, **1985**.
- [27] E. T. Samulski, *Faraday Discuss. Chem. Soc.* **1985**, 79, 7.
- [28] G. W. Gray, J. W. Goodby, *Sanidic Liquid Crystals*, Lenard Hill, Glasgow, **1984**.
- [29] B. Wunderlich, J. Grebowicz, *Adv. Polym. Sci.* **1984**, 60/61, 2.
- [30] D. Demus, H. Demus, H. Zashke, *Flüssige Kristalle in Tabellen II*, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, **1984**.
- [31] W. H. De Jeu, *Philos. Trans. R. Soc. London Ser. A* **1983**, 304, 217.
- [32] *Polymer Liquid Crystals* (Hrsg.: A. Ciferri, W. Krigbaum, R. Meyer), Academic Press, New York, **1982**.
- [33] H. Kelker, R. Hatz, *Handbook of Liquid Crystals*, Verlag Chemie, Weinheim, **1980**.
- [34] *The Molecular Physics of Liquid Crystals* (Hrsg.: G. R. Luckhurst, G. W. Gray), Academic Press, London, **1979**.
- [35] D. Demus, L. Richter, *Textures of Liquid Crystals*, Verlag Chemie, Weinheim, **1978**.
- [36] *Liquid Crystals and Plastic Crystals, Vols. 1 und 2* (Hrsg.: G. W. Gray, P. A. Winsor), Ellis Horwood, Chichester, **1974**.
- [37] D. Demus, H. Demus, H. Zashke, *Flüssige Kristalle in Tabellen*, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, Leipzig, **1974**.
- [38] P. H. Hermans, *Contribution to the Physics of Cellulosic Fibres*, Elsevier, Amsterdam, **1946**.
- [39] M. Miesowicz, *Nature* **1946**, 158, 27.
- [40] Der Originaltext wurde von der Commission on Macromolecular Nomenclature der International Union of Pure and Applied Chemistry betreut. – Dieser Kommission gehörten während der Vorbereitung des Berichts (1987–1997) folgende Personen an: Titularmitglieder: G. Allegra (bis 1990), R. E. Bareiss (bis 1994), M. Barón (seit 1996), N. M. Bikales (Sekretär bis 1988), K. Hatada (seit 1990), J. Kahovec (seit 1992), P. Kratochvíl (Vorsitzender bis 1992), E. Maréchal (seit 1994), W. V. Metanowski (seit 1992), I. Mita (bis 1990), C. Noël (bis 1994), I. M. Papisov (bis 1988), V. P. Shibaev (1996), R. F. T. Stepto (seit 1990, Vorsitzender seit 1992), U. W. Suter (bis 1992), W. J. Work (Sekretär seit 1988); assoziierte Mitglieder: J. V. Alemán (1996), M. Barón (1992–1996), K. Hatada (1988–1990), A. D. Jenkins (bis 1988), M. Hess (seit 1996), J.-I. Jin (seit 1994), J. Kahovec (1988–1992), E. Maréchal (1992–1994), K. Matyjaszewski (1992–1996), W. V. Metanowski (1988–1992), I. Mita (1990–1992), I. M. Papisov (1988–1992), S. Penczek (seit 1994), R. F. T. Stepto (1988–1990), S. Tripathy (bis 1992), L. Shi (1988–1996), W. J. Work (seit 1986); Ländervertreter: M. Barón (Argentinien, 1988–1996), J.-I. Jin (Korea, 1992–1994). Weiter haben zu diesem Dokument beigetragen: H. J. Coles, R. B. Fox, N. A. Platé (Russland, Ländervertreter), A. Sirigu (Italien, Ländervertreter).
- [41] Die große Mehrheit der Mesogene hat einen mehr oder weniger ausgeprägten amphiphilen Charakter, da bereits starre Kernsegmente und flexible Alkylketten eine gewisse Unverträglichkeit aufweisen. Die Unterscheidung zwischen amphiphilen und nichtamphiphilen Mesogenen ist unter anderem historisch bedingt, und die Grenze zwischen ihnen ist fließend.
- [42] Originaltext: „A mesogen composed of molecules containing a semi-rigid conical core.“ Der Begriff semi-rigid wurde nicht mit übernommen, da diese Molekülgestalt eine gewisse Starrheit voraussetzt und diese Einheit auch starr sein kann.
- [43] Originaltext: „A mesogen composed of board-like molecules with the long-range orientational order of the phase reflecting the symmetry of the constituent molecules.“ Der letzte Teil des Originaltextes wurde weggelassen, da er über die Definition der Molekülform hinausgeht und somit nicht konsequent zwischen Molekülform und Mesophasentyp unterscheidet (siehe allgemeine Anmerkungen von Obeluten und Übersetzer sowie Lit. [68]).
- [44] Der vorgeschlagene Begriff „asymmetrisches Flüssigkristalldimer“ ist nicht mit den Richtlinien zur stereochemischen Nomenklatur konsistent, nach denen „asymmetrisch“ ein Molekül ohne jegliches Symmetrieelement charakterisiert. Die Begriffe Heteroflüssigkristalldimer (und Homoflüssigkristalldimer) wären hier exakter. Es ist weiterhin anzumerken, dass die Wahl des Begriffs Flüssigkristalldimer problematisch ist, da z. B. in ungeradzähligen Flüssigkristalldimeren die monomere Einheit nicht definiert werden kann.
- [45] Der Originaltext „a liquid-crystal dimer with flexible hydrocarbon chains having an odd number of carbon atoms is called an odd-membered liquid-crystal dimer“ bringt nicht klar zum Ausdruck, dass die Länge des Spacers und nicht die der terminalen Ketten für die Bezeichnung entscheidend ist; der Text wurde daher modifiziert.
- [46] ... und nicht in racemischer Form vorliegen[de(n)] ...
- [47] Der im Originaltext enthaltene Begriff „inverse lamellar mesophase“ wurde nicht übernommen, da inverse Phasen nur bei Mesophasen mit gekrümmten polaren/apolaren Grenzflächen, also nicht bei lamellaren Phasen definiert sind.
- [48] Die im zweiten Teil des Satzes des Originaltextes enthaltene Aussage „wherein the (*) indicates that the macroscopic structure of the mesophase is chiral“ steht im Widerspruch zur Phasensymmetrie der SmA-Phase und zu Definition 3.1.5, Anmerkung 5 und wurde daher gestrichen.
- [49] Die Aussage „the tilt direction varies in a random manner from layer to layer in conventional smectic C mesophases“ ist sachlich falsch und wurde korrigiert.
- [50] Die Verwendung der Bezeichnung ferroelektrische chiral-smektische C-Phase für die SmC*-Phase ist allerdings nicht korrekt, da erst nach Aufwinden der Helix ferroelektrische Eigenschaften resultieren (siehe Definition 3.1.5.1.3, Anmerkung 6).
- [51] Der Begriff Bindungsorientierung ist eine direkte Übertragung aus dem Englischen und beschreibt die Orientierung lokaler Gittervektoren.

- [52] Die Aussage „The subscript 'hex' denotes the hexagonal structure of the mesophase.“ Ist nicht zutreffend und wurde korrigiert.
- [53] „Hexagonal“ wurde durch „pseudo-hexagonal“ ersetzt.
- [54] SmA- und SmC-Subphasen können auch bei anderen Substanzklassen, z. B. mesogenen Dimeren, Oligomeren und Polymeren, beobachtet werden.
- [55] Die Darstellung der Moleküle in Tropfenform soll lediglich die Orientierung der Molekül-Dipolmomente veranschaulichen und impliziert keine (!) sterischen Aspekte.
- [56] Der Begriff „density variation“ im Originaltext wurde durch Elektronendichteänderung ersetzt.
- [57] Kommentar zum Originaltext „a particular mesophase formed by a binary mixture, the components of which do not separately form mesophases, with the particular mesophase existing above the melting points of both components“: Von einer induzierten Mesophase kann man auch dann sprechen, wenn zwischen zwei gleichen oder verschiedenen Mesophasen oder zwischen einer Komponente, die keine Mesophase bildet, und einem Mesogen eine neue Mesophase induziert wird. Diese muss auch nicht unbedingt enantiotrop sei. Die Formulierung wurde daher allgemeiner gehalten.
- [58] Kommentar zum Originaltext „a mesophase with an overall three-dimensional order of cubic symmetry in which each micellar unit cell contains several hundred molecules in random configurations, as in a liquid“: Man muss zwischen bikontinuierlichen und diskontinuierlichen kubischen Phasen sowie Mesophasen kubischer Symmetrie, die durch ein Gitter von Defekten beschrieben werden können (Blaue Phasen), unterscheiden. Der Begriff „micellar unit cell“ ist daher verwirrend, und der Begriff „micellar“ ist auch nicht für alle kubischen Phasen zutreffend. Die Zahl der Moleküle in den Elementarzellen diskontinuierlicher kubischer Phasen kann auch wesentlich kleiner als der angegebene Wert sein.
- [59] Ein wesentliches Merkmal einer kubischen Mesophase ist weiterhin ihre Viskoelastizität, während isotrope flüssige Phasen und homöotrop orientierte smektische Phasen fluides Verhalten zeigen.
- [60] Kubische Mesophasen werden darüber hinaus von einer Vielzahl anderer Moleküle mit ganz unterschiedlichen Molekülstrukturen gebildet.
- [61] Im Originaltext werden weiterhin „discotic mesophases“ und „discotics“ aufgeführt, die nicht übernommen wurden, da sie lediglich Molekülgestalten beschreiben.
- [62] Der gesamte Abschnitt ist in sich inkonsistent: a) Einerseits wird das Symbol N_D nicht empfohlen, andererseits werden aber die nematischen Phasen als diskotisch-nematisch bezeichnet (siehe auch Definition 2.11.2.2, Anmerkung 2) und damit wird die Molekülgestalt wieder in die Phasenbezeichnung mit einbezogen. b) Die eigentlich viel häufigeren nematischen Phasen aus columnaren Aggregaten diskotischer Moleküle (N_{CD}) finden im gesamten Abschnitt 3.2 keine Erwähnung. c) Schließlich sind die im Originaltext unter Anmerkung 3 angegebenen Beispiele („phasmidic compounds, salt-like materials and oligosaccharides“) nicht zutreffend.
- [63] Im Original: „symmetry and structure“.
- [64] Der Originaltext führt zusätzlich die Bezeichnungen „columnar discotic mesophase“ und „columnar discotic“ auf, die auf der Molekülgestalt basieren und beispielsweise die in den Anmerkungen aufgeführten keilförmigen Moleküle (die sich nicht zu Scheiben organisieren) ausschließen würden. Die überaus wichtige Klasse der polycatenaren Moleküle (terminal verzweigte calamitische Moleküle) ist wegen ihrer besonderen Bedeutung als zusätzliches Beispiel aufgenommen worden. Zusätzlich sind auch quadratisch columnare und lamellar columnare Mesophasen bekannt.
- [65] Im Originaltext wird das Wort „oil“ verwendet.
- [66] Der im Original verwendete Ausdruck „liquid-like order along the columns“ umfasst eine beliebige Translation und Rotation um drei Achsen, was hier nicht der Fall ist. Er wurde daher durch „ohne Positionsfernordnung der Moleküle“ ersetzt.
- [67] Diese Raumgruppen beziehen sich streng genommen auf columnare Phasen mit geneigter Anordnung der Moleküle in den Säulen, da die relative Orientierung der Neigungsrichtungen in benachbarten Säulen in diesen Raumgruppen impliziert ist (siehe C. Destrad, P. Foucher, H. Gasparoux, H. T. Nguyen, A. M. Levelut, J. Malthête, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **1984**, *106*, 121). Für die entsprechenden Mesophasen mit nichtgeneigter Anordnung der Moleküle und für columnare Phasen, in denen keine Neigungsrichtung der Moleküle definiert werden kann (z. B. bei keilförmigen Molekülen und den thermotropen und lyotropen columnaren Mesophasen amphiphiler Moleküle), wäre daher eigentlich die Verwendung zweidimensionaler Punktgruppen ($p2gg = P2_1/a$, $p2mg = P2/a$, $c2mm = C2/m$, $p1 = P1$) angezeigt.
- [68] Der Originaltext „sanidic structures are analogous to the columnar mesophases formed by disc-like molecules“ ist verwirrend, da er nicht zwischen Molekülform und Mesophasenstruktur unterscheidet, und wurde daher mit „einige Mesophasen sanidischer Moleküle haben Ähnlichkeiten zu columnaren Mesophasen“ wiedergegeben, siehe auch Lit. [69].
- [69] Die hier wiedergegebenen Strukturmodelle beruhen auf Modellen, die für bestimmte starre Polymere mit Polyamidketten entwickelt wurden (M. Ebert, O. Herrmann-Schönherr, J. H. Wendorff, H. Ringsdorf, P. Tschirner, *Liq. Cryst.* **1990**, *7*, 63), die aber, zumindest für einige Verbindungen, in späteren Publikationen zurückgezogen wurden: z. B.: „... the biaxial phase is shown to consist of poorly developed microcrystals embedded in a liquid-like amorphous matrix. Only some materials are able to form a liquid crystalline phase at higher temperatures, but this phase is uniaxial“ (I. G. Voigt-Martin, P. Simon, S. Bauer, H. Ringsdorf, *Macromolecules* **1995**, *28*, 236). Es sei weiterhin darauf hingewiesen, dass die Phasenbezeichnung sanidisch eine Molekülform beschreibt und somit nicht konsequent zwischen Molekülform und Mesophasentyp unterscheidet.
- [70] Diese Anmerkung erscheint im Originaltext bei Definition 4.3 als Anmerkung 3, wo sie aber inhaltlich nicht hingehört.
- [71] Das Auftreten von Defekten mit zwei Streifen ist ein Charakteristikum aller SmC_s-Phasen; es ist nicht auf die LC-Phasen ungeradzahligter Flüssigkristalldimere beschränkt.
- [72] Der Originaltext „a ferro-electric mesophase that appears through the breaking of symmetry in a tilted smectic mesophase by the introduction of molecular chirality and, hence, mesophase chirality“ beschreibt einen Spezialfall ferroelektrischer Mesophasen, der jedoch erst dann erhalten wird, wenn die helicale Verdrillung der Schichten entlang der Schichtnormalen aufgehoben wird. Dies wurde in der Übersetzung hinzugefügt. Darüber hinaus wurden ferroelektrische Mesophasen aber auch in chiralen columnaren Mesophasen mit geneigter Molekülanordnung und in Mesophasen achiraler bananenförmiger Moleküle realisiert.
- [73] Die ursprüngliche Formulierung „when the numbers of layers with opposite tilt directions are not the same, the smectic mesophase has ferro-electric properties“ ist nicht korrekt und wurde daher geändert.
- [74] Allerdings belegen neuere Untersuchungen, dass in derartigen smektischen C-Phasen keine alternierenden Neigungsrichtungen vorliegen, sondern der Azimutwinkel des Direktors innerhalb von n Schichten ($n = 3, 4, \dots$) eine Rotation um 2π ausführt.
- [75] Im Original ist der Betrag von P_s verwendet worden. Dieser wurde durch P_s ersetzt, wodurch zum Ausdruck gebracht werden soll, dass diese Größe Vektoreigenschaften hat.
- [76] Der Freedericks-Effekt tritt auch in SmC-, SmF- und SmI-Phasen auf.

- [77] Der Originaltext „a tilt in an A mesophase is called the electroclinic effect“ beschreibt das Phänomen nur unzureichend und wurde daher ergänzt. Der Effekt tritt zudem auch in columnaren Phasen auf.
- [78] Die im Original hier verwendete Definition von B_{th} als „threshold magnetic field“ wurde durch die in Definition 5.10, Anmerkung 2 gegebene ersetzt.
- [79] Die Formulierung des Originaltextes („The time required for the light intensity viewed through crossed polarizers to increase to 90% of the final value from the off-state to the on-state of an electro-optical twisted-nematic cell ...“) ist nicht korrekt, da bei gekreuzten Polarisatoren der ausgeschaltete Zustand nicht dunkel, sondern hell und der eingeschaltete Zustand dunkel und nicht hell ist. Dies wurde in der Übersetzung berichtigt. Analog wurde auch bei den Definitionen 5.20–5.22 verfahren.
- [80] Dendrimere können auch ohne Anwesenheit mesogener Gruppen in ihrer Grundstruktur Mesophasen bilden und können daher inhärent mesogene Gruppen sein, deren Mesogenität auf Mikroseggregation und/oder eine spezifische Form zurückzuführen sein kann.
-