

# Glossar von Begriffen zur Assoziatbildung und Selbstorganisation in den Polymerwissenschaften (IUPAC-Empfehlung 2013)\*\*

Obmann: *Carsten Schmuck\**

Übersetzerin: *Juliane Keilitz*

## 1. Einleitung

Ursprünglich wurden Assoziatbildung und Selbstorganisation im Allgemeinen nur mit micellaren und kolloidalen Molekülsystemen in Verbindung gebracht, die von Polymerwissenschaftlern vorrangig als oligomere Systeme betrachtet werden. Mit dem Aufkommen der supramolekularen Chemie wurde durch ein breiteres Verständnis der molekularen Selbstorganisation der Zugang zur Konstruktion neuer und faszinierender Molekülarchitekturen eröffnet. Dabei haben die Methoden der Polymerwissenschaft eine große Rolle beim Erreichen dieser Fortschritte gespielt.

Jedes aufkeimende Gebiet bringt auch eine sich schnell erweiternde Terminologie mit sich, wobei alte Begriffe neue Bedeutung erhalten und neue Begriffe je nach Bedarf entstehen. Manche Verdoppelung ist dabei unvermeidlich und da die Chemie der Assoziatbildung und Selbstorganisation einige Gemeinsamkeiten mit den beiden benachbarten Bereichen, den biologischen Systemen und der Materialphysik, aufweist, gibt es viele Gelegenheiten für Verwirrungen in Hinblick auf das, was ein Fachmann mit einem bestimmten Begriff sagen will. Darum haben wir hier versucht, die wichtigsten Begriffe zusammenzustellen, die derzeit in diesem

Bereich verwendet werden. Dies ist keine endgültige Liste, aber sie soll den Lesern helfen, die nicht mit den Konzepten vertraut sind, und den Forschern als Leitfaden für die Verwendung der Standardterminologie dienen.

Aus Gründen der Konsistenz wurden die Begriffe, die im Rahmen der Polymerwissenschaften schon zufriedenstellend definiert sind, aus anderen IUPAC-Veröffentlichungen übernommen. Trotzdem sollte sich der Leser darüber im Klaren sein, dass einige Begriffe in anderen Zusammenhängen eine zwar ähnliche, aber trotzdem abweichende Bedeutung haben können. In einigen Fällen wurden die Definitionen von bereits existierenden Begriffen abgewandelt, um eine größere Allgemeingültigkeit zu erreichen oder die Definitionen zu verbessern. Alle anderen Begriffe und ihre Definitionen wurden in Zusammenarbeit mit Experten der jeweiligen Fachgebiete zusammengestellt.

Für eine einfache Suche wurden die Begriffe alphabetisch geordnet. Wenn einem Begriff in den Folgezeilen weitere Begriffe folgen, so handelt es sich bei diesen um anerkannte Synonyme. In Fällen, in denen zwei Begriffe eine ähnliche, aber nicht die gleiche Bedeutung haben und es wichtig ist, den Unterschied deutlich zu machen, verweist jede Definition auch auf die jeweils andere. Auf die Kennzeichnung von Begriffen, zu denen es einen eigenen Eintrag gibt, wurde in der Übersetzung vollständig verzichtet, weil sie im Originaltext nicht konsequent durchgehalten wurde.

[\*] Prof. Dr. C. Schmuck  
Lehrstuhl für Organische Chemie 2  
Fakultät für Chemie  
Universität Duisburg-Essen  
Universitätsstraße 7  
45141 Essen (Deutschland)  
E-Mail: carsten.schmuck@uni-due.de  
Dr. J. Keilitz  
Berlin (Deutschland)

[\*\*] Copyright© der englischen Fassung, die unter dem Titel „Terminology for aggregation and self-assembly in polymer science“ von Richard G. Jones (Großbritannien), Christopher K. Ober (USA), Philip Hodge (Großbritannien), Pavel Kratochvíl (Tschechien), Graeme Moad (Australien) und Michel Vert (Frankreich) für die Veröffentlichung in *Pure Appl. Chem.* **2013**, *85*, 463–492 vorbereitet wurde: International Union of Pure and Applied Chemistry, 2013. – Wir danken der IUPAC für die Genehmigung zum Druck einer deutschen Fassung dieses Glossars.<sup>[14]</sup> – Fehler/Unklarheiten im englischen Original wurden in der Übersetzung behoben, wobei darauf nicht immer explizit hingewiesen wird.

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 Allgemeinsprache essenziell. Alle Übersetzungen werden von einem ausgewiesenen Experten (dem „Obmann“) geprüft, korrigiert und autorisiert. Empfehlungen von Themen und Obleuten sind willkommen.

## 2. Terminologie

### 1 Aggregat Agglomerat

Unregelmäßige Cluster aus individuellen Molekülen oder Partikeln.

*Anmerkung 1:* Angelehnt an die Definitionen in Lit. [1–3] mit stärkerer Betonung des Fehlens von Ordnung.

*Anmerkung 2:* Ob sich die Begriffe „Aggregat“ und „Agglomerat“ im größeren wissenschaftlichen Zusammenhang unterscheiden, ist umstritten. Die Definitionen dieser Begriffe, wie sie mit und ohne den Polymerbezug verwendet werden, sind in Lit. [2] zu finden. Die hier präsentierte Definition ist zwar überarbeitet, stimmt aber mit der früheren überein.

### 2 Amphiphil

Eine Verbindung, deren Molekülbausteine bezüglich eines bestimmten Lösungsmittels sowohl solvophile als auch solvophobe Gruppen enthalten.

*Anmerkung 1:* Je nach Lösungsmittel können die solvophilen und solvophoben Gruppen des Moleküls ionisch oder nicht-ionisch sein.

*Anmerkung 2:* Als Lösungsmittel wird meist ein wässriges Medium angenommen, in dem gelöste Moleküle mit ausgeprägten polaren (hydrophilen) und unpolaren (hydrophoben) Bereichen leicht Micellen, Vesikel oder Aggregate bilden.

*Anmerkung 3:* Gegenüber der Definition in Lit. [1] korrigiert, weil jene auf Moleküle mit anionischen und kationischen Bereichen im wässrigen Medium beschränkt ist.

#### a) Bolaamphiphil

Ein Amphiphil mit solvophilen Gruppen an beiden Enden einer solvophoben Kette.

### 3 Anisotrop

Richtungsabhängige Eigenschaften von Molekülen, selbstorganisierten Systemen und Materialien.

### 4 Assoziatbildung Agglomeration

Der Prozess, durch den individuelle Moleküle oder Partikel Aggregate bilden. Siehe auch Selbstorganisation.

*Anmerkung:* Angelehnt an die Definitionen in Lit. [1–3], aber an die überarbeiteten Definitionen von Aggregat/Agglomerat angepasst.

### 5 Assoziation

Selbstorganisation separater molekularer oder supramolekularer Bausteine.

*Anmerkung 1:* Dieser Begriff wird insbesondere, aber nicht ausschließlich für die Selbstorganisation von gegensätzlich geladenen freien Ionen zu Ionenpaaren oder größeren, nicht notwendigerweise gut definierten Ionenclustern verwendet, die durch elektrostatische Anziehung zusammengehalten werden.

*Anmerkung 2:* Der Begriff beschreibt das Gegenteil der Dissoziation, wird aber üblicherweise nicht für die Bildung von Addukten durch Zusammenlagerung oder Koordination verwendet (Gold Book online<sup>[\*]</sup>).

*Anmerkung 3:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], aber allgemeingültiger.

### 6 Äußeres Feld

Das eine molekulare oder ionische Spezies umgebende Feld, das von einer außerhalb der Spezies befindlichen Quelle ausgeht.

*Anmerkung:* Dazu gehören elektromagnetische, hydrodynamische und mechanische Felder.

### 7 Barotrope Mesophase

Eine Mesophase, die durch Veränderung des Druckes bei konstanter Temperatur gebildet wird.

### 8 Bildung supramolekularer Assoziate

Eine Selbstorganisation, die durch reversible nichtkovalente gerichtete Wechselwirkungen zwischen Molekülen zu einem System mit großer Molmasse führt. (Anmerkung des Obmanns: Die Einschränkung „mit großer Molmasse“ scheint nicht angebracht, da der Begriff üblicherweise synonym mit Komplexbildung verwendet wird, also nicht nur für die Aggregatbildung ausgehend von vielen Molekülen, sondern auch beispielsweise für 1:1-Komplexe gilt.)

*Anmerkung:* Von der Verwendung des Begriffs „supramolekulare Polymerisation“ wird abgeraten.

### 9 Biomimetisch

Einen natürlichen Prozess oder ein natürliches Material nachahmend.

### 10 Block

Ein Block ist der Teil eines aus vielen Bausteinen zusammengesetzten Makromoleküls, der mindestens ein konstitutionelles oder Strukturmerkmal aufweist, das in den benachbarten Einheiten nicht vorhanden ist<sup>[4,5]</sup> (Gold Book online).

### 11 Blockcopolymer

Ein Polymer, das aus Blockmakromolekülen besteht.<sup>[4]</sup>

[\*] Der Hinweis „Gold Book online“ hier und an anderen Stellen besagt, dass Details in der Online-Version des „Goldenen Buchs“ der IUPAC unter dem englischen Originalbegriff gefunden werden können.

## 12 Blockmakromolekül

Ein Makromolekül, das in linearer Sequenz aus Blöcken aufgebaut ist (Gold Book online).

## 13 Carceplex

Ein Wirt-Gast-Komplex, der von einem Carceranden und einem vollständig verkapselten Gast gebildet wird.

*Anmerkung:* Siehe auch Hemicarceplex.

## 14 Carcerand

Ein Wirtmolekül, das ein Gastmolekül vollständig verkapselt.

## 15 Catenan

Ein mechanisch verzahntes Molekülgerüst aus zwei oder mehr verzahnten Ringen oder Makrocyclen.

*Anmerkung:* Die verzahnten Ringe können nicht voneinander getrennt werden, ohne kovalente Bindungen zu brechen.

## 16 Charge-Transfer-Komplex

Ein Elektronendonator-Elektronenakzeptor-Komplex, bei dem es beim elektronischen Übergang in einen angeregten Zustand zu einer partiellen Übertragung von elektronischer Ladung von der Donor- zur Akzeptoreinheit kommt (Gold Book online).

*Anmerkung:* Die Begriffe Donor-Akzeptor-Komplex oder Elektronen-Donor-Akzeptor-Komplex, die manchmal statt Charge-Transfer-Komplex oder Lewis-Addukt verwendet werden, sind veraltet.

## 17 Clathrat

Eine Einlagerungsverbindung, in der sich das Gastmolekül in einem Käfig befindet, den ein Gitter aus Wirtmolekülen bildet (Gold Book online).

## 18 Co-Selbstorganisation

Eine Selbstorganisation von zwei oder mehr selbstorganisierenden Spezies, die dabei noch eine weitere nichtselbstorganisierende Komponente in die geordnete Struktur einlagern können, aber nicht müssen.

## 19 Dialyse

Trennung kleinerer Teilchen von größeren, die auf der Fähigkeit ersterer beruht, selektiv eine Membran zu passieren.

*Anmerkung 1:* Die durch Dialyse vermittelte Nanofällung ist eine Methode zur Selbstorganisation von Polymernanopartikeln.

*Anmerkung 2:* Gegenüber der Definition in Lit. [1] korrigiert, die auf die Trennung kolloidaler Spezies beschränkt ist.

## 20 Direktor, $n$

Lokale Symmetrieachse für die Richtungsverteilung der Moleküle einer Mesophase.<sup>[6]</sup>

*Anmerkung 1:* Der Direktor ist als ein Einheitsvektor definiert, aber die Richtungen  $+n$  und  $-n$  sind frei wählbar.

*Anmerkung 2:* In uniaxialen nematischen Phasen, die aus entweder stäbchen- oder scheibenförmigen Molekülen bestehen, stimmt die mittlere Richtung der effektiven molekularen Symmetrieachse mit dem Direktor überein.

*Anmerkung 3:* Der Direktor stimmt auch mit einer lokalen Symmetrieachse richtungsabhängiger Eigenschaften der Mesophase, z.B. dem Brechungsindex oder der magnetischen Suszeptibilität, überein.

## 21 Discotisch

### Discoid

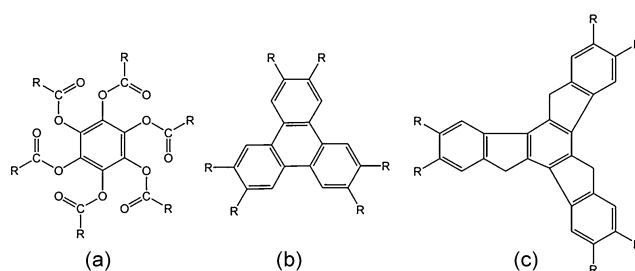
Eine scheibenförmige Gestalt habend.

## 22 Discotisches Mesogen

### Discoides Mesogen

Ein Mesogen, das aus relativ flachen, scheiben- oder blattförmigen Molekülen besteht.<sup>[6]</sup>

*Anmerkung 1:* Beispiele für discotische Mesogene sind Hexakis(acyloxy)benzole (a), Hexakis(acyloxy)- und Hexaalkoxytriphenylene (b) und 10,15-Dihydro-5H-diindeno[1,2-a:1',2'-c]fluorene (c).



*Anmerkung 2:* Das Adjektiv discotisch wird auch zur Beschreibung der nematischen Mesophasen verwendet, die aus discotischen Mesogenen gebildet werden. Die Mesophasen, die durch die kolumnare Stapelung von scheibenförmigen Molekülen gebildet werden, werden als kolumnare Mesophasen bezeichnet.

## 23 Ditope Rezeptor

Ein Rezeptor mit zwei Bindungsstellen.

*Anmerkung:* Ditope Rezeptoren können homo- oder heterotop sein, je nachdem, ob die Bindungsstellen gleich (meist selbstkomplementäre Bindungsstellen) oder unterschiedlich sind.

## 24 Donor-Akzeptor-Komplex

Siehe Charge-Transfer-Komplex.

## 25 Doppelhelix

Die hier im Original zu findende Definition ist in wesentlichen Teilen fehlerhaft, weshalb sie nicht wiedergegeben wird.

### 26 Dynamer

Eine Molekulanordnung, deren einzelne Teile durch reversible kovalente Bindungen miteinander verknüpft sind, sodass sie auf Änderungen der chemischen oder physikalischen Umgebung mit einer Umstrukturierung reagieren kann.

*Anmerkung:* Beispiele sind bestimmte Polyacylhydrazone und Polyazomethine.

### 27 Dynamische Selbstorganisation

Siehe Selbstorganisation.

### 28 Elektroklines Polymer

Ein Polymer, dessen Bausteine unter dem Einfluss eines elektrischen Feldes ihre Orientierung ändern können, was zu einer induzierten Polarität im System führt.

### 29 Ferroelektrischer Übergang

Ein durch ein elektrisches Feld ausgelöster Übergang, bei dem ein Kristall von einem stabilen Orientierungszustand in einen anderen wechselt.

*Anmerkung:* Gegenüber der Definition in Lit. [1] korrigiert, in der fälschlich speziell eine mechanische Belastung als Ursache des Übergangs genannt wird.

### 30 Ferroelektrisches Polymer

Ein Polymer, das eine spontane Polarisierung zeigt, wenn sich die Dipole aufgrund eines elektrischen Feldes parallel zueinander anordnen (Gold Book online).

*Anmerkung:* Ein Beispiel für ein solches Polymer ist Poly(1,1-difluorethen) nach der Einwirkung einer Corona-Entladung.

### 31 Ferromagnetischer Übergang

Ein durch ein magnetisches Feld ausgelöster Übergang, bei dem ein Kristall von einem stabilen magnetischen Zustand in einen anderen wechselt.

### 32 Ferromagnetisches Polymer

Ein Polymer, das magnetische Eigenschaften zeigt, weil es parallel zueinander angeordnete ungepaarte Elektronenspins hat oder solche, die leicht parallel angeordnet werden können (Gold Book online).

### 33 Fluorhaltig

Beschreibt das Vorhandensein einer genügenden Zahl an Kohlenstoff-Fluor-Bindungen, die dafür sorgen, dass eine Substanz in Wasser und den üblichen organischen Lösungsmitteln unlöslich, dafür aber in Fluorkohlenwasserstoffen löslich ist.

### 34 Fluorophil

Bezeichnet die Anziehung durch fluorhaltige Verbindungen.

### 35 Fluorophile Wechselwirkung

Anziehende Wechselwirkung mit fluorhaltigen Verbindungen.

### 36 Fluorophob

Bezeichnet die Abstoßung durch fluorhaltige Verbindungen.

### 37 Fluorophobe Wechselwirkung

Abstoßende Wechselwirkung zwischen fluorhaltigen und fluorfreien Verbindungen.

### 38 Flüssigkristall

Eine Substanz in einem mesomorphen Zustand, der eine weitreichende Orientierungsordnung und entweder nur eine teilweise Lageordnung oder eine komplette Lageunordnung aufweist.

*Anmerkung 1:* Flüssigkristalle bestehen überwiegend aus stäbchen- oder scheibenförmigen Molekülen, die sowohl eine oder mehrere geordnete Flüssigphasen als auch eine isotrope Flüssigphase aufweisen.

*Anmerkung 2:* Für weitere Details zu Flüssigkristallen siehe Lit. [5] oder Kapitel 7 von Lit. [8].

*Anmerkung 3:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], wo nur auf einen anderen Begriff verwiesen wird.

### 39 Flüssigkristallines Polymer

#### Flüssigkristallpolymer

#### Polymerer Flüssigkristall

Ein Polymer, das unter geeigneten Bedingungen (Medium, Temperatur, Druck und Konzentration) als flüssigkristalline Mesophase vorliegt (Gold Book online).

*Anmerkung 1:* Siehe auch Flüssigkristall.

*Anmerkung 2:* Ein flüssigkristallines Polymer kann eine oder mehrere flüssige Zustände mit ein- oder zweidimensionaler weitreichender Orientierungsordnung über bestimmte Temperaturbereiche entweder in der Schmelze (thermotropes flüssigkristallines Polymer) oder in Lösung (lyotropes flüssigkristallines Polymer) zeigen.

*Anmerkung 3:* Für weitere Details zu flüssigkristallinen Polymeren siehe Lit. [5] oder Kapitel 7 von Lit. [8].

### 40 Foldamer

Ein Polymer- oder Oligomermolekül, das eine Sekundärstruktur annimmt, die durch nichtkovalente Wechselwirkungen stabilisiert ist.

*Anmerkung:* Typische Sekundärstrukturen sind Helix,  $\beta$ -Faltblatt und Globulus.

### 41 Funktionalität, $f$

Zahl der kovalenten Bindungen oder nichtkovalenten Verknüpfungen, die ein Monomermolekül, eine monomere Einheit oder ein Substituent in einem Makro- oder Oligomermolekül mit anderen Reaktanten bilden kann.

*Anmerkung:* Angelehnt an die Definition in Lit. [2].

#### 42 Gast

Ein Atom, Molekül oder Ion, das in einer Wirteinheit eine Kavität, Spalte oder Tasche besetzt.

*Anmerkung:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1]; die hier gegebene wird wegen ihrer größeren Genauigkeit empfohlen.

#### 43 Gelmikropartikel

Siehe Mikrogel.

#### 44 Gelnanopartikel

Siehe Nanogel.

#### 45 Globulus

Konformation eines Makromoleküls, in der sich die Bausteine in ihrer Gesamtheit zu einer kompakten eiförmigen oder kugelförmigen Gestalt anordnen.

#### 46 Globulus-Knäuel-Übergang

Gegenteil des Knäuel-Globulus-Übergangs.

#### 47 Halogenbrücke

##### X-Brücke

Anziehende Wechselwirkung zwischen einem elektronegativen Atom und einem Halogenatom.

*Anmerkung 1:* Das Halogenatom kann Iod, Brom oder Chlor, aber normalerweise nicht Fluor sein.

*Anmerkung 2:* Eine Halogenbrücke wird am besten als elektrostatische Wechselwirkung zwischen einer Lewis-Base und einem elektrophilen Halogenatom betrachtet und hängt von der Polarisierbarkeit und der Anwesenheit elektronegativer Substituenten am Halogenatom ab.

#### 48 Hauptkette

##### Rückgrat

Diejenige lineare Kette, bezüglich derer alle anderen Ketten, lang, kurz oder beides, als Substituenten gesehen werden können.<sup>[1,4,9]</sup>

*Anmerkung:* Wenn zwei oder mehr Ketten gleichwertig als Hauptkette in Frage kommen, wird diejenige gewählt, die zur einfachsten Darstellung des Moleküls führt.

#### 49 Hauptkettenpolymer-Flüssigkristall

Ein flüssigkristallines Polymer, dessen Bausteine nur in ihren Hauptketten mesogene Einheiten aufweisen (Gold Book online).

#### 50 H-Brücke

Siehe Wasserstoffbrückenbindung.

#### 51 Helix

Eine dreidimensional gekrümmte Struktur, die einer aufgewickelten zylindrischen Feder ähnelt.

*Anmerkung 1:* Eine Helix ist chiral.

*Anmerkung 2:* Regelmäßig sich wiederholende Rotationen um die Rückgrat-Bindungen eines Makromoleküls führen zu einer helicalen Konformation.

*Anmerkung 3:* Siehe auch Helizität.

*Anmerkung 4:* Gegenüber den Definitionen in Lit. [9,10] korrigiert, in denen der Begriff irrtümlicherweise über die Molekülkonformation definiert wurde.

#### 52 Helizität

Chiralität einer helicalen, propeller- oder schraubenförmigen molekularen oder supramolekularen Einheit.

*Anmerkung:* Eine rechtsgängige Helix wird mit *P* (oder plus), eine linksgängige mit *M* (oder minus) bezeichnet.

#### 53 Hemicarceplex

Ein Komplex, der aus einem Hemicarceranden und einem eingeschlossenen Gast besteht.

*Anmerkung:* Siehe auch Carceplex.

#### 54 Hemicarcerand

Da die hier im Original gegebene Definition völlig unverständlich ist, wird auf ihre Wiedergabe verzichtet.

*Anmerkung:* Siehe auch Carcerand.

#### 55 Heterotop

Siehe ditoper Rezeptor.

#### 56 Hexagonale Mesophase

Eine kolumnare Mesophase, die durch eine hexagonale Packung der Molekülsäule charakterisiert ist.<sup>[6]</sup>

*Anmerkung:* Für weitere Details siehe Lit. [5].

#### 57 Homotop

Siehe ditoper Rezeptor.

#### 58 Honigwaben-Polymerfilm

##### Honigwabenpolymer

Hexagonale Anordnung von Löchern in einem Polymerfilm.

*Anmerkung 1:* Die Durchmesser der Löcher sind üblicherweise kleiner als 1 mm.

*Anmerkung 2:* Die Herstellung von geordneten, mikrometergroßen Honigwabenstrukturen durch Kondensation von mikrometergroßen Wassertropfen auf der Oberfläche von Blockcopolymerlösungen hat zum Gebrauch des erweiterten Begriffs „honeycomb polymer from breath figures“ geführt.

#### 59 Hydrophil

Bezeichnet die Fähigkeit eines Moleküls oder eines Substituenten, mit polaren Molekülen, und hier besonders mit Wasser oder polaren Gruppen, anziehend zu wechselwirken.



*Anmerkung 1:* Die wörtliche Übersetzung lautet „wasserliebend“.

*Anmerkung 2:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], aber präziser.

### 60 Hydrophile Wechselwirkung

Die anziehende Wechselwirkung zwischen hydrophilen Gruppen, Molekülen oder Substanzen.

### 61 Hydrophob

Bezeichnet die Fähigkeit eines Moleküls oder eines Substituenten, abstoßend mit polaren Molekülen, und hier insbesondere mit Wasser oder polaren Gruppen, zu wechselwirken.

*Anmerkung:* Die wörtliche Übersetzung lautet „wasserhasend“.

### 62 Hydrophobe Wechselwirkung

Die schwache und räumlich nicht gerichtete wechselseitige Aggregation unpolarer Moleküle oder Molekülgruppen in Wasser.

*Anmerkung 1:* Der Begriff geht auf die scheinbare Abstoßung zwischen Wasser und beispielsweise Kohlenwasserstoffen zurück. Dieses Phänomen wird jedoch besser damit erklärt, dass Kohlenwasserstoff-artige Gruppen die Wasser-Wasser-Wechselwirkung stören.

*Anmerkung 2:* Vom irreführenden alternativen Begriff „hydrophobe Bindung“ wird abgeraten.

*Anmerkung 3:* Die englische Definition wurde für falsch erachtet und darum geändert.

### 63 Inverser Opal

Ein kolloidaler Kristall mit periodisch angeordneten kugelförmigen Fehlstellen in einem festen Polymerkontinuum.

*Anmerkung:* Ein inverser Opal wird normalerweise dadurch erhalten, dass runde Partikel angeordnet, die Zwischenräume mit einem Feststoff gefüllt und die Partikel anschließend entfernt werden.

### 64 Ionisches Tensid

Siehe Tensid.

### 65 Isotrop

Richtungsunabhängige Eigenschaften von Molekülen, selbstorganisierten Systemen und Materialien.

### 66 Kalamitisch

Eine Stäbchen- oder Lattenform aufweisend.

### 67 Kante-Fläche-Wechselwirkung

Siehe T-Stapelung.

### 68 Kern-Schale-Struktur

Molekulare Einheit mit sphärischer, elliptischer oder zylindrischer Symmetrie, in der sich die Beschaffenheit des Kerns von der externen Oberfläche, der Schale, unterscheidet.

### 69 Kernvernetzte Micelle

Kern-Schale-Struktur, die durch Selbstorganisation von Amphiphilen und anschließende kovalente Vernetzung über Funktionalitäten im Kern gebildet wird.

*Anmerkung 1:* Die Amphiphile sind häufig amphiphile Blockcopolymere.

*Anmerkung 2:* Solche Strukturen werden zum Beispiel für den Wirkstofftransport und die Verkapselung von Farbstoffen verwendet.

*Anmerkung 3:* Siehe auch schalenvernetzte Micelle.

### 70 Knäuel-Globulus-Übergang

Wechsel der Konformation einer makromolekularen Kette in Lösung von der Knäuelform zu einer relativ kompakten Struktur, in der die Kette als Reaktion auf einen externen Stimulus kollabiert vorliegt.

*Anmerkung 1:* Ein Knäuel-Globulus-Übergang ist die Umkehrung eines Globulus-Knäuel-Übergangs.

*Anmerkung 2:* Typische externe Stimuli sind die Temperatur, der pH-Wert, die Elektrolytkonzentration und die Lösungsmittelzusammensetzung.

### 71 Knödel

Siehe schalenvernetzte Micelle.

### 72 Kolloid

Synonym für ein kolloidales System (Gold Book online).

### 73 Kolloidale Kristalle

Zwei- oder dreidimensional geordnete Bereiche von Nanopartikeln, deren Ausdehnung in mindestens einer Richtung grob zwischen 1 nm und 1 µm liegt.

*Anmerkung:* Beispiele für kolloidale Kristalle sind photonische Kristalle wie Opal.

### 74 Kolloidales System

Ein System, das Partikel mit durchschnittlichen Größen zwischen 1 nm und 1 µm oder eine andere Diskontinuität in dieser Größenordnung feinverteilt in einer sonst kontinuierlichen Phase aufweist.

*Anmerkung 1:* Der Begriff wird üblicherweise für supramolekulare Spezies verwendet, die in einem Medium dispergiert sind.

*Anmerkung 2:* Gegenüber der Definition in Lit. [1] korrigiert, die grammatikalisch falsch ist.

### 75 Kolumnare Phase

Zylindrische Assoziate von Molekülen in separaten Schichten, in denen die Molekülachsen in den Ebenen der Schichten liegen und in den angrenzenden Schichten identisch ausgerichtet und orientiert sind.

*Anmerkung:* Ein kolumnares Assoziat aus discotischen Molekülen, das auch kolumnare Mesophase, kolumnare discotische Mesophase oder kolumnare Discotik genannt wird, ist eine Klasse der Flüssigkristallmesophasen.<sup>[6]</sup>

### 76 Komplex

Eine molekulare Einheit, die durch die wechselseitige Anziehung von zwei oder mehr – ionischen oder ungeladenen – molekularen Bausteinen gebildet wird.

*Anmerkung 1:* Die Bindung zwischen den Komponenten ist normalerweise schwächer als eine kovalente Bindung.

*Anmerkung 2:* Angelehnt an die Definition im Gold Book online.

### 77 Kristallgitterdefekt

#### Kristallographischer Defekt

Eine Unterbrechung der regulären Atomanordnung in Kristallgittern.

*Anmerkung:* Meist verwendet man nur die Kurzform „Defekt“.

### 78 Kubisch

Dreidimensional geordnete Anordnungen von Atomen, Molekülen oder Ionen mit kubischer Symmetrie.

### 79 Kubische Mesophase

Eine dreidimensional geordnete Mesophase mit kubischer Symmetrie.<sup>[6]</sup>

### 80 Lamelle

Eine organisierte Struktur mit einheitlicher Dicke, die sich in zwei Richtungen ausdehnt und einer dünnen Schicht, einer Platte oder einer Membran ähnelt.

#### a) Lamellares Blockcopolymer

Eine Anordnung von Blockcopolymer-Molekülen, in der gleiche Blöcke in Lamellen getrennt sind.

*Anmerkung:* Die einzelnen Lamellen haben normalerweise eine Dicke von 5–100 nm.

#### b) Lamellarer Kristall

Ein Kristall mit einer großen Ausdehnung in zwei Richtungen und einheitlicher Dicke.<sup>[1]</sup>

*Anmerkung:* Ein lamellarer Kristall hat normalerweise eine Dicke im Bereich von 5–100 nm und kann einzeln oder in Clustern vorkommen.

### 81 Langmuir-Film

Monoschicht einer unlöslichen Substanz an einer Gas-flüssig- oder Flüssig-flüssig-Grenzfläche.

*Anmerkung 1:* Die Monoschichtenbildung wird durch die Abnahme der Gibbs-Energie bei der Selbstorganisation der Substanz an der Grenzfläche begünstigt.

*Anmerkung 2:* Der Begriff „Langmuir-Monoschicht“ wurde kürzlich für Langmuir-Filme mit gleichmäßig ausgebreiteten Monoschichten geprägt.

#### a) Langmuir-Blodgett-Film

Eine oder mehrere Monoschichten einer Substanz, die durch wiederholtes Übertragen von Langmuir-Filmen an der Luft-Wasser-Grenzfläche auf ein festes Substrat entstehen.

*Anmerkung 1:* Zum Übertragen wird das Substrat entweder durch die Grenzfläche gezogen oder mit der Grenzfläche in Kontakt gebracht.

*Anmerkung 2:* Die adsorbierte Substanz ist im Allgemeinen, aber nicht ausschließlich, ein organisches Amphiphil.

*Anmerkung 3:* Siehe auch schichtweise Assoziation.

### 82 Ligand

In der Komplexchemie bezeichnet man so ein Atom oder Molekül, das in einer Koordinationsverbindung an das Zentralatom gebunden ist. In der Biochemie und der medizinischen Chemie ist ein Ligand eine niedermolekulare Verbindung (z. B. ein Hormon oder Arzneistoff), die bei der Bindung an einen biologischen Rezeptor (meistens ein Protein) einen biologischen Vorgang auslöst (Signalweiterleitung, Öffnen oder Schließen von Ionenkanälen etc.).

*Anmerkung 1:* Der Wortstamm von Ligand wurde auch für die Schaffung anderer Begriffe verwendet: z. B. ligieren, d. h., an etwas als Ligand koordinieren, und die davon abgeleiteten Partizipien ligierend und ligiert.

*Anmerkung 2:* Die Begriffe „ligierendes Atom“ und „Donoratom“ werden synonym verwendet.

*Anmerkung 3:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], um mit der Definition von Ligand auf S. 145 des Red Book in Einklang zu sein.<sup>[8]</sup>

### 83 Lipophil

Bezeichnet die Anziehung von oder Kompatibilität mit unpolaren Molekülen, und hier insbesondere Kohlenwasserstoffen, und unpolaren Einheiten.

*Anmerkung 1:* Die wörtliche Übersetzung lautet „fettliebend“.

*Anmerkung 2:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], wo Anmerkung 1 als Definition gegeben wurde.

## 84 Liposom

Siehe Vesikel.

## 85 Lyophil

Beschreibt die Affinität zu den Molekülen des Lösungsmittels.

*Anmerkung 1:* Die wörtliche Übersetzung lautet „Lösungsmittel bevorzugend“.

*Anmerkung 2:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], bei der das Verständnis durch die Einbeziehung von Begriffen für spezifischere Lösungsmittelwechselwirkungen erschwert wird.

## 86 Lyophob

Beschreibt die fehlende Affinität zu den Molekülen eines Lösungsmittels.

*Anmerkung:* Die wörtliche Übersetzung lautet „Lösungsmittel hassend“.

## 87 Lyotrope Mesophase

Eine Mesophase, die durch das Auflösen eines Mesogens in einem geeigneten Lösungsmittel bei geeigneten Bedingungen (Konzentration, Temperatur, Druck) entsteht.<sup>[6]</sup>

*Anmerkung:* Lyotrope Mesophasen gehören zur Klasse der Flüssigkristalldmesophasen.<sup>[6]</sup>

## 88 Mechanisch verzahntes

### Molekülgerüst

Eine supramolekulare Struktur, in der die Moleküle nur aufgrund ihrer Topologie miteinander verknüpft sind.

*Anmerkung:* Beispiele für solche mechanisch verzahnten Molekülgerüste sind die Catenane und Rotaxane.

## 89 Mesogen

### Mesogene Verbindung

### Mesogene Einheit

### Mesomorphe Verbindung

Eine Verbindung, die je nach den Bedingungen (Medium, Temperatur, Druck und Konzentration) als Mesophase oder als flüssigkristalline Phase vorliegen kann.<sup>[6]</sup>

*Anmerkung 1:* Wenn die Art der gebildeten Mesophase bekannt ist, kann eine genauere Terminologie verwendet werden, z.B. nematogen, chiral nematogen und smectogen.

*Anmerkung 2:* Wenn mehr als eine Art von Mesophase gebildet werden kann, kann mehr als eine Bezeichnung auf dieselbe Verbindung zutreffen, weshalb dann der allgemeine Begriff Mesogen verwendet werden sollte.

*Anmerkung 3:* Für weitere Details siehe Lit. [5].

## 90 Mesomorphe Verbindung

Siehe Mesogen.

## 91 Mesomorpher Zustand

Zustand eines Materials, in dem das Ausmaß der molekularen Ordnung zwischen der perfekten dreidimensionalen Ordnung in Kristallen und dem Fehlen von weitreichender Ordnung in isotropen Flüssigkeiten, Gasen und amorphen Feststoffen liegt.<sup>[6]</sup>

*Anmerkung:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], die eine überflüssige Erklärung zur Ordnung in Kristallen enthält.

## 92 Mesophase

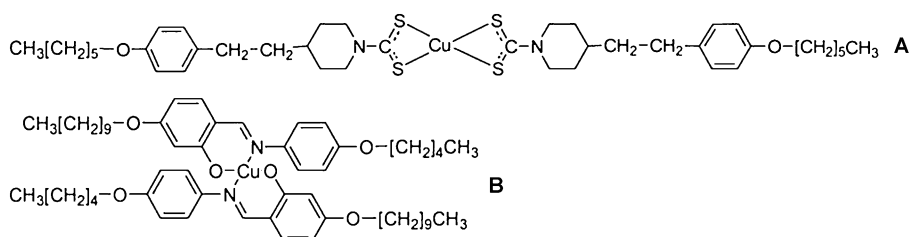
Eine Phase, die über einen bestimmten Bereich von Zusammensetzung, Temperatur und Druck innerhalb des mesomorphen Zustands auftritt.

*Anmerkung:* Angelehnt an die Definition in Lit. [6].

## 93 Metallomesogen

Ein Mesogen aus Molekülen, die eines oder mehrere Metallionen enthalten.

*Anmerkung:* Metallomesogene können entweder calamitische (**A**) oder discotische Mesogene (**B**) sein.<sup>[6]</sup>



## 94 Micellares Stäbchen

Ein stabförmiges Mesogen, das ein micellares Aggregat bilden kann.

## 95 Micelle

Ein Aggregat aus amphiphilen Molekülen oder Ionen mit kolloidaler Dimension, das eine Kern-Schale-Struktur aufweist, deren solvophile Teile nach außen und deren solvophobe Teile nach innen gerichtet sind. Unter bestimmten Bedingungen existiert eine Micelle im Gleichgewicht mit den Molekülen oder Ionen, aus denen sie gebildet ist.

*Anmerkung 1:* Micellen sind eine Untergruppe der Übermoleküle.

*Anmerkung 2:* Die „bestimmten Bedingungen“, unter denen Micellen gebildet werden, sind z.B. die Konzentration des gelösten Stoffes, die Art oder Zusammensetzung des Lösungsmittels, Temperatur und Druck.



*Anmerkung 3:* Beispiele für Moleküle, die Micellen bilden, sind Tenside und amphiphile Blockcopolymere.

*Anmerkung 4:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], aber allgemeingültiger.

#### 96 Mikrogel

##### Gelmikropartikel

Ein Gelpartikel beliebiger Form mit einem Durchmesser von ca. 0.1–100  $\mu\text{m}$ .<sup>[2]</sup>

#### 97 Mikrostruktur

Die Struktur eines Materials, in der sich mindestens eine der Eigenschaften über eine Distanz in der Größenordnung von Mikrometern wiederholt.

#### 98 Molekulare Erkennung

Eine spezifische nichtkovalente Wechselwirkung zwischen zwei oder mehr Molekülen.

*Anmerkung:* Wechselwirkungen, die eine molekulare Erkennung ermöglichen, sind z.B. Wasserstoffbrückenbindungen, Metallkoordination, Van-der-Waals-Kräfte,  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen und andere elektrostatische und/oder elektromagnetische Wechselwirkungen.

#### 99 Molekulare Selbstorganisation

Siehe Selbstorganisation.

#### 100 Molekulares Prägen

Eine Methode zur templatgestützten Erzeugung von Kavitäten in Polymermatrices, die für die molekulare Erkennung genutzt werden können.

#### 101 Monoschicht

Eine einzelne Atom- oder Molekülschicht.

*Anmerkung 1:* Als „schwimmende Monoschicht“ werden bestimmte ausgebreitete Monoschichten oder Filme an der Grenzfläche zwischen Luft und einer Flüssigkeit bezeichnet.

*Anmerkung 2:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], in der allerdings behauptet wurde, dass die Atome oder Moleküle innerhalb der Monoschicht dicht gepackt sein müssen. Dies ist nicht immer der Fall.

#### 102 Morphologie

Die Form oder das optische Erscheinungsbild einer Substanz oder die Form ihrer Phasendomänen.

*Anmerkung 1:* Sie spielt bei Polymeren, Polymergemischen, Kompositen und Kristallen eine Rolle.

*Anmerkung 2:* Bei einem Polymergemisch oder -komposit beschreibt die Morphologie die häufig mithilfe von Mikroskopie- oder Streuungsmethoden beobachteten Strukturen und Formen der einzelnen Phasendomänen.

*Anmerkung 3:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], in der allerdings unzulässigerweise das Detail von Anmerkung 1 Teil der Definition ist.

#### 103 Nanodomäne

Eine Region eines selbstorganisierten Ensembles mit einem Durchmesser von rund 1–100 nm.

#### 104 Nanogel

##### Gelnanopartikel

Ein Gelpartikel beliebiger Form und mit einem Durchmesser von rund 1–100 nm.

#### 105 Nanokomposit

Ein Komposit, in dem mindestens eine der Phasendomänen wenigstens eine Ausdehnung in der Größenordnung von Nanometern aufweist (Gold Book online).

#### 106 Nanoskopischer Polymerfilm

Ein Polymerfilm mit lateralen Ausdehnungen im Bereich von 1–100 nm.

#### 107 Nanostruktur

Die Struktur eines Materials, in der sich mindestens eine der Eigenschaften über eine Distanz in der Größenordnung von Nanometern wiederholt.

#### 108 Negative Adsorption

Verarmung an einem oder mehreren Bestandteilen in einer Grenzflächenschicht.<sup>[1]</sup>

*Anmerkung:* Von der Verwendung von „Verarmung“ als Synonym wird abgeraten, da dieser Begriff eine größere Bedeutungsweite hat.

#### 109 Nematogen

Siehe Mesogen.

#### 110 Nichtionisches Tensid

Siehe Tensid.

#### 111 Ordnungsparameter, $\langle P_2 \rangle$

Charakterisiert die weitreichende Orientierungsordnung in Bezug auf den Direktor, wobei gilt:  $\langle P_2 \rangle = (3\langle \cos^2 \beta \rangle - 1)/2$ , mit  $\beta$  als dem Winkel zwischen der Molekülsymmetrieachse und dem Direktor und  $\langle \rangle$  als Kennzeichen für den Ensemble-Mittelwert.<sup>[6]</sup>

#### 112 Organophil

Beschreibt die Tendenz eines Moleküls oder eines Substituenten, mit unpolaren organischen Lösungsmitteln anziehend zu wechselwirken.

*Anmerkung 1:* Der Begriff wird insbesondere für Kolloide verwendet, die in organischen Lösungsmitteln Solvate bilden und dabei quellen.

*Anmerkung 2:* Siehe auch lipophil.

### 113 Organophile Wechselwirkung

Die anziehende Wechselwirkung zwischen organophilen Molekülen oder Materialien und organischen Lösungsmitteln.

### 114 Orientierungsparameter

Ordnungsparameter, der auf makroskopische Assoziate von geordneten Materialien angewendet wird, z. B. auf Kristall-assoziate in Fasern.

### 115 Photonischer Kristall

Eine periodische optische Nanostruktur, die die Photonen-transmission beeinflusst.

### 116 Polyelektrolyt

Ein Polymer aus Makromolekülen, in dem ein wesentlicher Teil der Bausteine ionische oder ionisierbare Gruppen oder beides enthält.<sup>[7]</sup>

*Anmerkung 1:* Siehe die Definition 1.65 in Lit. [4].

*Anmerkung 2:* Die Begriffe polymerer Elektrolyt und Polymerelektrolyt werden manchmal für Polyelektrolyt verwendet. Sie sollten nicht mit dem Begriff fester Polymerelektrolyt verwechselt werden.

*Anmerkung 3:* Polyelektrolyte können künstlich oder natürlich sein. Nucleinsäuren, Proteine, Teichonsäuren, einige Polypeptide und einige Polysaccharide sind Beispiele für natürliche Polyelektrolyte.

### 117 Polyelektrolytkomplex

Ein Polymer-Polymer-Komplex aus Makromolekülen, die entgegengesetzte Ladungen tragen. Dies führt dazu, dass die Makromoleküle durch elektrostatische Wechselwirkungen aneinander gebunden sind.<sup>[7]</sup>

*Anmerkung:* Ein Polyelektrolytkomplex wird auch als Polysalz bezeichnet. Die Verwendung dieses Begriffs wird nicht empfohlen.

### 118 Polymerflüssigkristall

Siehe flüssigkristallines Polymer.

### 119 Polymerkristall

Eine Polymerdomäne, die auf atomarer Ebene dreidimensional kristallin geordnet ist.<sup>[10]</sup>

*Anmerkung 1:* Polymerkristalle sind normalerweise viel kleiner und zeigen häufig nicht die Perfektion, die für Substanzen mit niedriger Molmasse üblich ist. Die Größen reichen von 2–3 nm bis zu einigen  $\mu\text{m}$ , wobei die typischen Werte in eine oder mehrere Richtungen bei ca. 10 nm liegen.

*Anmerkung 2:* Polymerkristalle können verzwilligt (Polymerkristallzwillinge) oder unverzwilligt (Polymereinzelkristalle) sein.

### 120 Polymersom

Ein Vesikel mit einem Radius typischerweise zwischen 50 nm und 5  $\mu\text{m}$  oder mehr, das aus einem amphiphilen, synthetischen Blockcopolymer aufgebaut ist.<sup>[12]</sup>

*Anmerkung:* Die meisten beschriebenen Polymersome dienen bei In-vivo-Anwendungen in wässrigen Lösungen als Wirte für die Aufnahme oder das vorübergehende Einfangen von Molekülen wie Wirkstoffen, Enzymen sowie anderen Proteinen und Peptiden.

### 121 Polymolekular

Bedeutet „aus vielen Molekülen bestehend“.

### 122 Polyrotaxan

Ein Polymer, das aus mechanisch verzahnten Molekülgerüsten besteht. Typischerweise handelt es sich dabei um ein Makromolekül, das durch einen oder mehrere Makrocyclen gefädelt ist.

*Anmerkung 1:* Der/Die Makrocyclen kann/können auf das Polymerrückgrat oder auf Seitenketten aufgefädelt sein.

*Anmerkung 2:* Ein Polyrotaxan kann auch aus Makromolekülen aufgebaut sein, bei denen eine oder mehrere makrocyclische Haupt- oder Seitenketteneinheiten auf lineare Ketten aufgefädelt sind.

*Anmerkung 3:* Eine detaillierte Definition ist in Lit. [13] zu finden.

### 123 $\pi$ - $\pi$ -Stapelung

Inter- oder intramolekulare Ausrichtung aromatischer Gruppen in Molekülen, deren genaue Ursache noch diskutiert wird. Es handelt sich wohl im Wesentlichen um klassische Dispersionswechselwirkungen mit einer zusätzlichen Richtungskomponente, die durch die relative Anordnung der Arene bedingt wird.

*Anmerkung:*  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen nehmen mit der Zahl der  $\pi$ -Elektronen zu.

### 124 Primärstruktur

Die Reihenfolge der Bausteine eines Makromoleküls, z. B. eines Proteins, eines Oligomermoleküls oder eines Blocks.

*Anmerkung 1:* Bei Proteinen ist mit der Primärstruktur die sequenzielle Anordnung der Aminosäurereste einschließlich der Vernetzung von Ketten gemeint.

*Anmerkung 2:* Siehe auch Sekundärstruktur, Tertiärstruktur und Quartärstruktur.

*Anmerkung 3:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], in der allerdings Struktur mit Formel verwechselt worden ist.

### 125 Quartärstruktur

Die definierte Organisation von zwei oder mehr Makromolekülen mit Tertiärstruktur.

*Anmerkung 1:* Beispiele sind Proteinmoleküle, die durch Wasserstoffbrückenbindungen sowie Van-der-Waals- und Coulomb-Kräfte zusammengehalten werden.

*Anmerkung 2:* Siehe auch Primärstruktur, Sekundärstruktur und Tertiärstruktur.

#### 126 Rezeptor

Ein Strukturmerkmal in oder auf einem Wirtmolekül, das ein Strukturmerkmal einer Gastspezies spezifisch erkennt und daran bindet.

*Anmerkung:* Diese Definition wird empfohlen, weil sie allgemeiner ist als die im Gold Book,<sup>[1]</sup> die ausschließlich im Kontext der medizinischen Chemie gegeben wurde.

#### 127 Scatchard-Gleichung

Sie lautet  $[RL]/[L] = -K_a[RL] + K_a[R_T]$  und wird verwendet, um die Assoziationskonstante  $K_a$  eines supramolekularen Komplexes RL aus einem Liganden L und einem Rezeptor R zu berechnen.

*Anmerkung 1:*  $[RL]$  ist die Konzentration an Rezeptor-Ligand-Komplex,  $[L]$  die an an freiem Liganden und  $[R_T]$  die Gesamtkonzentration an Rezeptor.

*Anmerkung 2:* Die Einheit der Assoziationskonstanten  $K_a$  ist die reziproke Konzentration.

*Anmerkung 3:* Häufig findet man in der Literatur auch eine andere Schreibweise:  $r/c = -K_a r + K_a n$ , wobei  $r$  das Verhältnis der Konzentration des gebundenen Liganden zur Konzentration der verfügbaren Koordinationsstellen ist („bound“),  $c$  die Konzentration des freien Liganden („free“) und  $n$  die Zahl der Bindungsstellen pro Zentralkomplex.

#### 128 Scatchard-Plot

Lineare Auftragung von  $[RL]/[L]$  gegen  $[RL]$  (bzw.  $r/c$  gegen  $r$ ) entsprechend der Scatchard-Gleichung.

#### 129 Schalenvernetzte Micelle Knödel

Eine Kern-Schale-Struktur, die durch Selbstorganisation von Amphiphilen und anschließende kovalente Vernetzung über Funktionalitäten in der Schale entsteht.

*Anmerkung 1:* Bei den Amphiphilen handelt es sich oft um amphiphile Blockcopolymere.

*Anmerkung 2:* Solche Strukturen werden z.B. für den Wirkstofftransport und die Farbstoffverkapselung verwendet.

*Anmerkung 3:* Siehe auch kernvernetzte Micelle.

#### 130 Schichtweise Assoziation

Ein Prozess, bei dem mehrlagige Strukturen aus Molekülen oder Partikeln einer Substanz auf einem festen Substrat abgeschieden werden. Diese Abscheidung wird durch die fortlaufende Adsorption von Monoschichten erreicht, die durch

nichtkovalente Wechselwirkungen zusammengehalten werden.

*Anmerkung 1:* Das Material an der Flüssigkeitsoberfläche muss nicht notwendigerweise als feste Monoschicht vorliegen.

*Anmerkung 2:* Die schichtweise Assoziation wird häufig dazu genutzt, abwechselnd positiv und negativ geladene Polyelektrolyte abzuscheiden.

*Anmerkung 3:* Siehe auch Langmuir-Blodgett-Film.

#### 131 Seitenkette Zweig

In diesem Kontext ein oligomerer oder polymerer Seitenzweig einer makromolekularen Kette.

*Anmerkung 1:* Ein oligomerer Zweig kann als kurzketziger Zweig bezeichnet werden.

*Anmerkung 2:* Ein polymerer Zweig kann als langketziger Zweig bezeichnet werden.

#### 132 Sekundärstruktur

Die Konformation der Rückgratsegmente eines Makromoleküls ohne Berücksichtigung der Seitenkettenkonformationen oder des Verhältnisses zu anderen Segmenten (Gold Book online).

*Anmerkung 1:* Ein typisches Beispiel ist die Konformation der Polypeptidkette eines Proteins.

*Anmerkung 2:* Typische Sekundärstrukturen von Proteinen sind  $\alpha$ -Helices und  $\beta$ -Faltblätter.

*Anmerkung 3:* Siehe auch Primärstruktur, Tertiärstruktur und Quartärstruktur.

#### 133 Selbstkomplementär

Siehe ditoper Rezeptor.

#### 134 Selbstorganisation

##### Molekulare Selbstorganisation

##### Dynamische Selbstorganisation

Die spontane und reversible Bildung geordneter Molekül-assoziante durch nichtkovalente Wechselwirkungen.

*Anmerkung 1:* Typische nichtkovalente Wechselwirkungen sind Van-der-Waals-Wechselwirkungen,  $\pi$ - $\pi$ -Wechselwirkungen, elektrostatische Wechselwirkungen und Wasserstoffbrückenbindungen.

*Anmerkung 2:* Die Selbstorganisation ist ein Prozess, in dem ein System präexistenter Bestandteile unter bestimmten Bedingungen durch Wechselwirkung zwischen den Komponenten eine geordnetere Struktur annimmt.

#### a) Hauptkettenselbstorganisation

Inter- oder intramolekulare Selbstorganisation von Bausteinen im Rückgrat eines Polymermoleküls.

#### b) Seitenkettenselbstorganisation

Inter- oder intramolekulare Selbstorganisation von Seitenketten oder -Bausteinen von Polymermolekülen.

#### 135 Selbstorganisierte Monoschicht (SAM)

Eine geordnete Monoschicht, die sich bei Adsorption auf einer Oberfläche spontan bildet.

#### 136 Smektische Mesophase

Eine Mesophase, in der die Moleküle in Schichten mit wohldefiniertem Abstand oder wohldefinierter Periodizität angeordnet sind.<sup>[6]</sup>

*Anmerkung 1:* Es gibt mehrere Arten von smektischen Mesophasen, die durch eine Vielfalt an Molekülanordnungen in den Schichten charakterisiert sind.

*Anmerkung 2:* Die Gesamtzahl an smektischen Mesophasen kann nicht spezifiziert werden; bisher wurden folgende Arten definiert: SmA, SmB, SmC, SmF und SmI. Die Namensteile A–I geben lediglich die Reihenfolge der Entdeckung an.

*Anmerkung 3:* Die smektischen Mesophasen gehören zur Klasse der Flüssigkristallmesophasen.<sup>[6]</sup>

*Anmerkung 4:* Für weitere Details siehe Lit. [5].

#### 137 Solvophil

Bezeichnet die Affinität gegenüber Lösungsmitteln.

#### 138 Solvophob

Bezeichnet den Mangel an Affinität gegenüber Lösungsmitteln.

#### 139 Sphärand

Eine makrocyclische Verbindung, in der Donoratome (O, N, S) so angeordnet sind, dass sie ein Kation komplett umschließen können, wobei die Donoratome eine Solvathülle für das verkapselte Kation bieten.

#### 140 Stäbchen-Knäuel-Copolymer

Ein Copolymer aus starren und flexiblen Blöcken.

#### 141 Statische Selbstorganisation

Selbstorganisation unter Gleichgewichtsbedingungen, d. h., zur Erhaltung des selbstorganisierten Zustands ist kein weiterer Energieaufwand nötig (im Gegensatz zur dynamischen Selbstorganisation, die steten Energieaustausch benötigt).

#### 142 Statistisches Knäuel

Der vollständige Satz an räumlichen Anordnungen eines Kettenmoleküls mit einer großen Zahl an Segmenten, die ihre Orientierung zueinander mit der Zeit nach statistischen Regeln ändern. Gibt es keine äußeren Zwänge, wird das statistische Knäuel zum Zufallsknäuel.

*Anmerkung 1:* Die Begriffe statistisches Knäuel und Zufallsknäuel werden irrtümlich häufig als Synonyme angesehen.

*Anmerkung 2:* Siehe auch Zufallsknäuel.

#### 143 Stereoblockmakromolekül

Ein Blockmakromolekül aus Blöcken mit unterschiedlicher Stereoregularität.

*Anmerkung:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], doch wird der Verweis auf zwei andere verwandte Definitionen vermieden.

#### 144 Stimulus-gesteuertes Polymer

Ein Polymer, das reversibel auf einen externen Stimulus reagiert.

*Anmerkung:* Der externe Stimulus kann beispielsweise die Temperatur, Strahlung oder der pH-Wert sein, und als Antwort sind Änderungen physikalischer Eigenschaften wie Konformation, Assoziatform, flüssigkristalliner Zustand, Absorptionsspektrum und Emissionsspektrum möglich.

#### 145 Supramolekulares Assoziat

##### Supramolekulare Spezies

##### Supramolekulare Struktur

##### Übermolekül

Ein Molekülsystem, das aus zwei oder mehr selbstorganisierten molekularen oder molekularen und ionischen Einheiten besteht, die durch nichtkovalente intermolekulare bindende Wechselwirkungen zusammengehalten werden.

*Anmerkung 1:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], doch werden alle Synonyme, die seit der ersten Definition des Übermoleküls dazugekommen sind, besser erfasst.

*Anmerkung 2:* Während ein supramolekulares Assoziat auch aus nur zwei molekularen oder molekular/ionischen Einheiten bestehen kann, z.B. eine DNA-Doppelhelix oder ein Wirt-Gast-Komplex, wird der Begriff meist für größere Konstrukte verwendet, die typischerweise stäbchenförmige, blattförmige oder sphärische Strukturen haben.

*Anmerkung 3:* Die Größe von supramolekularen Assoziaten liegt im Bereich von Nano- bis Mikrometern.

#### 146 Templatpolymerisation

Eine Polymerisation von Monomermolekülen, die a) auf einer Oberfläche, b) in einem Polymergitter, c) auf Polymermolekülen in Lösung oder d) um ein Metallion herum adsorbiert und ausgerichtet sind, wodurch die Struktur der gebildeten Polymerketten durch die Orientierung der Monomermoleküle festgelegt wird.

#### 147 Tensid

##### Oberflächenaktives Agens

Eine Substanz, die beim Lösen in einem Medium an den Grenzflächen so adsorbiert, dass die Grenzflächenspannung zu anderen Phasen verringert wird.

*Anmerkung 1:* Tenside können ionische oder nichtionische Substanzen sein.

*Anmerkung 2:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], in der allerdings behauptet wird, dass die bevorzugte Adsorption des Tensids eine Folge der Änderung der Oberflächenspannung ist und nicht umgekehrt.

#### 148 Tertiärstruktur

Die räumliche Anordnung, einschließlich der Konformation, eines kompletten Makromoleküls.

*Anmerkung 1:* Siehe auch Primärstruktur, Sekundärstruktur und Quartärstruktur.

*Anmerkung 2:* Die Tertiärstruktur ist für die Funktion von Proteinmolekülen essenziell.

*Anmerkung 3:* Gegenüber der Definition in Lit. [1] korrigiert, die restriktiver ist.

#### 149 Thermotrope Mesophase

Eine Mesophase, die durch Erhitzen eines Feststoffs oder Abkühlen einer isotropen Flüssigkeit oder durch Erhitzen oder Abkühlen einer thermodynamisch stabilen Mesophase bei konstantem Druck gebildet wird (Gold Book online).

#### 150 T-Stapelung

##### Kante-Fläche-Wechselwirkung

Eine orthogonale Ausrichtung der Bausteine in Molekülen, die zu günstigen Wechselwirkungen führt.

*Anmerkung:* T-Stapelung wird oft in Proteinen beobachtet. Dabei ist das partiell positiv geladene Wasserstoffatom eines aromatischen Systems auf das Zentrum der aromatischen Ebene eines anderen aromatischen Systems ausgerichtet.

#### 151 Verarmung

Siehe negative Adsorption.

#### 152 Verkapselung

Das Einbinden oder Eingebundensein eines Gastmoleküls in einen/einem Wirt.

*Anmerkung 1:* Die Wirtmatrix ist häufig ein Polymer.

*Anmerkung 2:* Als Gäste kommen beispielsweise Katalysatoren, Enzyme, Reagentien, Wirkstoffe, Farbstoffe und Duftstoffe in Frage.

##### a) Mikroverkapselung

Das Einbinden oder Eingebundensein von mikroskopischen Partikeln in einen/einem Wirt.

##### b) Molekulare Verkapselung

Das Einbinden oder Eingebundensein von individuellen Molekülen in größere(n) Moleküle(n).

#### 153 Vesikel

Ein durch ein Tensid oder ein amphiphiles Polymer umschlossener Lösungsmittelbereich.

*Anmerkung:* Meistens handelt es sich beim Lösungsmittel um Wasser.

##### a) Lipidvesikel

##### Liposom

Ein Vesikel, dessen Membran aus einer Lipiddoppelschicht besteht.

*Anmerkung 1:* Liposome können für den Wirkstofftransport verwendet werden.

*Anmerkung 2:* Angelehnt an die Definition in Lit. [1], die sich allerdings nur auf die Phospholipid-Kompartimentierung eines Tröpfchens bezieht.

#### 154 Wasserstoffbrückenbindung

##### H-Brücke

Anziehende Wechselwirkung zwischen einem positiv polarisierten Wasserstoffatom eines Moleküls und einem negativ polarisierten Atom oder einer negativ polarisierten Atomgruppe desselben oder eines anderen Moleküls.<sup>[11]</sup>

*Anmerkung 1:* Eine typische Wasserstoffbrückenbindung wird als  $X-H \cdots Y-Z$  dargestellt, wobei die drei Punkte die Brücke kennzeichnen.  $X-H$  ist der Wasserstoffbrückendonator. Der Akzeptor kann ein Atom oder Anion  $Y$  oder eine Atomgruppe oder ein Molekül  $Y-Z$  sein, wobei  $Y$  an  $Z$  gebunden ist. In einigen Fällen sind  $X$  und  $Y$  gleich. In spezielleren Fällen sind  $X$  und  $Y$  gleich und die  $X-H$ - und  $Y-H$ -Abstände sind auch gleich, was symmetrische Wasserstoffbrückenbindungen zur Folge hat. In jedem Fall enthält der Akzeptor eine elektronenreiche Region wie (aber nicht ausschließlich) ein freies Elektronenpaar an  $Y$  oder ein  $\pi$ -Elektronenpaar in  $Y-Z$ .

*Anmerkung 2:* Eine Wasserstoffbrückenbindung wird am besten als eine elektrostatische Wechselwirkung betrachtet, die durch die geringe Größe des Wasserstoffatoms verstärkt wird, welche eine große räumliche Nähe der wechselwirkenden Dipole oder Ladungen erlaubt. Die beiden elektronegativen Atome stammen meist (aber nicht immer) aus der zweiten Reihe des Periodensystems, z. B. N, O oder F.

*Anmerkung 3:* Die zugehörigen Energien betragen bis auf einige Ausnahmen, die in der Regel Fluor betreffen, weniger als  $20\text{--}25 \text{ kJ mol}^{-1}$ .

*Anmerkung 4:* H-Brücken sind stark solvensabhängig und nur in unpolaren oder wenig polaren Lösungsmitteln von Bedeutung; in polaren und insbesondere protischen Lösungsmitteln spielen sie energetisch keine große Rolle.



## 155 Wirt

Eine molekulare oder supramolekulare Einheit, die einen Gast binden oder einschließen kann.

**Anmerkung 1:** Beispiele für Wirte, die mit Gästen Komplexe bilden, sind die Cryptanden und Kronenether, bei denen Ion-Dipol-Wechselwirkungen zwischen den Heteroatomen und positiven Ionen für die Bindung ursächlich sind. Beispiele für Polymere, die als Wirte fungieren, sind molekular geprägte Polymere (siehe molekulares Prägen).

**Anmerkung 2:** Sterische Faktoren beeinflussen die Bindung oft erheblich.

**Anmerkung 3:** Angelehnt an die Definition in Lit. [1], aber allgemeingültiger.

## 156 Zufallsknäuel

Der vollständige Satz an räumlichen Anordnungen eines Kettenmoleküls mit einer großen Zahl an Segmenten, die ihre Orientierung zueinander unter pseudoidealen (= Theta-)Bedingungen, d. h. frei von äußeren Zwängen, die ihre Konformationen beeinflussen könnten, mit der Zeit zufällig ändern.<sup>[9]</sup>

**Anmerkung 1:** Siehe auch statistisches Knäuel.

**Anmerkung 2:** Angelehnt an die Definition in Lit. [1], in der allerdings das statistische Knäuel definiert wird.

- [1] IUPAC, *Compendium of Chemical Terminology*, 2. Aufl. („Gold Book“; zusammengestellt von A. D. McNaught und A. Wilkinson), Blackwell Scientific Publications, Oxford, **1997**. Korrigierte Online-XML-Version: <http://dx.doi.org/10.1351/goldbook> (2006–), erstellt von M. Nic, J. Jirat, B. Kosata; aktualisiert durch A. D. Jenkins.
- [2] J. Alemán, A. V. Chadwick, J. He, M. Hess, K. Horie, R. G. Jones, P. Kratochvíl, I. Meisel, I. Mita, G. Moad, S. Penczek, R. F. T. Stepto, *Pure Appl. Chem.* **2007**, 79, 1801.
- [3] W. J. Work, K. Horie, M. Hess, R. F. T. Stepto, *Pure Appl. Chem.* **2004**, 76, 1985.
- [4] A. D. Jenkins, P. Kratochvíl, R. F. T. Stepto, U. W. Suter, *Pure Appl. Chem.* **1996**, 68, 2287.
- [5] A. D. Jenkins, *Pure Appl. Chem.* **1981**, 53, 733.
- [6] C. Noël, V. P. Shibaev, M. Barón, M. Hess, A. D. Jenkins, J.-I. Jin, A. Sirigu, R. F. T. Stepto, W. J. Work, *Pure Appl. Chem.* **2001**, 73, 845; siehe auch die deutsche Übersetzung: *Angew. Chem.* **2004**, 116, 6340–6368.
- [7] M. Hess, R. G. Jones, J. Kahovec, T. Kitayama, P. Kratochvíl, P. Kubisa, W. Mormann, R. F. T. Stepto, D. Tabak, J. Vohlídal, E. S. Wilks, *Pure Appl. Chem.* **2006**, 78, 2067; siehe auch die deutsche Übersetzung: *Angew. Chem.* **2007**, 119, 4480–4483.
- [8] IUPAC, *Nomenclature of Inorganic Chemistry, IUPAC Recommendations 2005* („Red Book“; für die Veröffentlichung vorbereitet von N. Connelly, T. Damhus, R. M. Harshorn), RSC Publishing, Cambridge, Großbritannien, **2005**.
- [9] IUPAC, *Compendium of Polymer Terminology and Nomenclature, IUPAC Recommendations 2008* („Purple Book“; Hrsg.: R. G. Jones, J. Kahovec, R. Stepto, E. S. Wilks, M. Hess, T. Kitayama, W. V. Metanomski), RSC Publishing, Cambridge, Großbritannien, **2008**.
- [10] G. Allegra, S. V. Meille, P. H. Geil, J. He, M. Hess, J.-I. Jin, P. Kratochvíl, W. Mormann, R. Stepto, *Pure Appl. Chem.* **2011**, 83, 1831.
- [11] E. Arunan, G. R. Desiraju, R. A. Klein, J. Sadlej, S. Scheiner, I. Alkorta, D. C. Clary, R. H. Crabtree, J. J. Dannenberg, P. Hobza, H. G. Kjaergaard, A. C. Legon, B. Mennucci, D. J. Nesbitt, *Pure Appl. Chem.* **2011**, 83, 163741.
- [12] B. M. Discher, H. Bermudez, D. A. Hammer, D. E. Discher, Y.-Y. Won, F. S. Bates, *J. Phys. Chem. B* **2002**, 106, 2848.
- [13] J. Vohlídal, E. S. Wilks, A. Yerin, A. Fradet, K.-H. Hellwich, P. Hodge, J. Kahovec, W. Mormann, R. F. T. Stepto, *Pure Appl. Chem.* **2012**, 84, 2135.
- [14] Die Mitglieder des Komitees der IUPAC Polymer Division im Zeitraum 2010–2011 waren: *Präsident:* C. K. Ober (USA); *Vizepräsident:* M. Buback (Deutschland); *Sekretär:* M. Hess (Deutschland); *Titularmitglieder:* D. Dijkstra (Deutschland), R. G. Jones (Großbritannien), P. Kubisa (Polen), G. T. Russell (Neuseeland), M. Sawamoto (Japan), R. F. T. Stepto (Großbritannien), J.-P. Vairon (Frankreich); *assoziierte Mitglieder:* D. Berek (Slowakische Republik), J. He (China), R. Hiorns (Frankreich), W. Mormann (Deutschland), D. Smith (USA), J. Stejskal (Tschechien); *Ländervertreter:* K.-N. Chen (Taiwan), G. Galli (Italien), J. S. Kim (Korea), G. Moad (Australien), M. Raza Shah (Pakistan), R. P. Singh (Indien), W. M. Z. B. Wan Yunus (Malaysia), Y. Yagci (Türkei), M. Žigon (Slowenien). Dem Subcommittee on Polymer Terminology (bis 2005 Subcommittee on Macromolecular Terminology) gehörten während der Vorbereitung dieses Berichts (2006–2011) folgende Personen an: *Vorsitzender:* R. G. Jones (Großbritannien); *Sekretäre:* M. Hess (Deutschland, 2006–2007), T. Kitayama (Japan, 2008–2009), R. C. Hiorns (Frankreich, seit 2010); *Mitglieder:* G. Allegra (Italien), M. Barón (Argentinien), T. Chang (Korea), J. Chen (USA), C. dos Santos (Brasilien), A. Fradet (Frankreich), K. Hatada (Japan), J. He (China), K.-H. Hellwich (Deutschland), R. C. Hiorns (Frankreich), P. Hodge (Großbritannien), K. Horie (Japan), A. D. Jenkins (Großbritannien), J.-I. Jin (Korea), J. Kahovec (Tschechien), P. Kratochvíl (Tschechien), P. Kubisa (Polen), I. Meisel (Deutschland), W. V. Metanomski (USA), V. Meille (Italien), I. Mita (Japan), G. Moad (Australien), W. Mormann (Deutschland), T. Nakano (Japan), C. Ober (USA), S. Penczek (Polen), L. P. Rebelo (Portugal), M. Rinaudo (Frankreich), F. Schué (Frankreich), V. P. Shibaev (Russland), S. Słomkowski (Polen), R. F. T. Stepto (Großbritannien), D. Tabak (Brasilien), J.-P. Vairon (Frankreich), M. Vert (Frankreich), J. Vohlídal (Tschechien), E. S. Wilks (USA), W. J. Work (USA).