

目 录

序	I
前言	VI

、 第一篇 绪 论

第一章 概况	1
1.1 非线性光学与光电子学	1
1.2 分子非线性光学材料研究的简单回顾	1
第二章 非线性光学的基本概念	4
2.1 凝聚态物质的线性光学	4
2.1.1 基本方程	4
2.1.2 晶体中的线性光学效应	4
2.2 非线性电极化现象	6
2.2.1 非线性电极化率	6
2.2.2 非线性电极化率的本征对称性	8
2.2.3 非线性电极化率的几何对称性	9
2.3 二阶非线性光学效应	10
2.3.1 非线性介质中的耦合波方程	11
2.3.2 一组振荡偶极的发射	15
2.3.3 实验技术	16
2.3.4 非线性光学中对界面的一些考虑	17

第二篇 分子工程的理论与实践

第三章 偶极体系和分子内电荷转移与有机分子的非线性光学效应	20
3.1 有机分子电子和光学结构的基本知识	20
3.1.1 原子和分子轨道	20
3.1.2 共轭碳化合物	21
3.1.3 碳氢化合物的取代效应	22
3.2 偶极体系和分子内电荷转移与分子电极化率	24
3.2.1 分子电极化率的表达式	25
3.2.2 简单系统	28
3.3 有机分子的非线性效应	29
3.3.1 饱和分子	29
3.3.2 共轭分子	30
3.4 分子电极化率的有限场理论	33
3.4.1 有限场微扰法	34

3.4.2 取代效应与 σ 和 π 电子对分子电极化率的贡献	36
3.4.3 氢键与分子环境对电极化率的影响	38
3.5 分子工程的一些实例	40
3.5.1 尿素及其衍生物	40
3.5.2 对硝基苯胺衍生物——NPP 与 NPAN 的比较研究	41
3.5.2.1 有限场微扰 INDO 模型	42
3.5.2.2 全态加和 CNDOVSB 程序计算	43
3.5.3 共轭长度及端基的影响:推-拉多烯类	44
3.5.4 一维大 π 共轭体系与 γ	46
3.5.4.1 三阶非线性系数的量子力学公式	46
3.5.4.2 共轭长度对 γ 的影响	48
第四章 八极体系的理论与实践	49
4.1 非线性电极化率的旋转不变性的含义和八极非线性分子的定义	49
4.2 八极非线性分子的张量性质	52
4.3 非线性分子的一般矢量分类——八极非线性分子的分子工程	55
4.4 从双能级到三能级模型的量子力学考虑	58
4.5 八极的溶液谐振光散射的测定	62
4.5.1 问题的提出	62
4.5.2 八极分子的结构与电子光谱	63
4.5.2.1 结晶紫	63
4.5.2.2 钕络合物	63
4.5.2.3 共振	64
4.5.3 实验装置	65
4.5.4 谐振光散射(HLS)实验中的对称考虑	66
4.5.5 实验结果	68
4.5.5.1 溶剂校准	68
4.5.5.2 结晶紫分子的测定	68
4.5.5.3 钕络合物的测定	69
4.5.6 HLS 与 EFISH 方法的比较与展望	70
4.6 宏观有序与光学相互作用	70
4.7 一些张量和群论概念的补充说明	74
4.7.1 张量的不可约表象的概述	74
4.7.2 L 阶多极群的定义和标准	75
4.7.3 笛卡儿表示中三阶张量的不可约分量	76
4.7.4 三阶对称张量不可约分量的二维和三维图象	78
4.7.5 点群 C_{2v} 和 D_{3h} 的各向同性平均 $\beta \otimes \beta$ 张量系数的决定	79
第五章 分子工程的一些其他考虑	82
5.1 透明性-光学非线性的性能比	82
5.1.1 透明性的调节	82
5.1.2 sp^3 杂化的硅原子	84

5.1.2.1 三甲基硅基 $\text{Si}(\text{CH}_3)_3$ 作为电子给体或受体	84
5.1.2.2 硅作为共轭体系的一部分	85
5.1.2.3 含 2 个二甲基硅基单元的化合物中的不同给体和受体对分子内电荷转移的影响	86
5.1.3 sp^2 杂化碳原子	86
5.1.3.1 多杂环体系	86
5.1.3.2 烯酮类“交叉共轭”体系——查尔酮及有关化合物	86
5.1.3.3 西夫碱类	87
5.1.3.4 腈类	88
5.1.4 sp 杂化碳原子——二苯乙炔(Tolane)和 1,2-二芳基乙炔	88
5.2 二阶光学非线性的优化	88
5.3 形状因素的影响	89
5.3.1 非平面多生色团体系	89
5.3.1.1 多硅酸盐类化合物	89
5.3.1.2 Δ 型分子	90
5.3.1.3 屋顶形分子	90
5.3.2 介晶材料	91
5.4 分子间的堆砌结构	91
5.4.1 共晶与氢键网络	91
5.4.2 有机矿物结构	91
5.4.3 包络络合物	92
5.5 “多性能”(multi-property)材料	92

第三篇 晶体工程与非线性光学分子晶体

第六章 宏观与微观光学非线性之间的关系	94
6.1 凝聚分子物质	94
6.1.1 局域场效应	96
6.1.2 有机晶体中的宏观与微观非线性	97
6.1.3 流体的宏观与微观非线性	99
6.2 分子内电荷转移晶体 MAP 的取向气体描述	101
6.3 从非中心对称到优化晶格	105
6.4 具有有效结构的一些有机晶体示例	112
6.4.1 手性与电荷转移:氨基丙酸甲基-(2,4-二硝基苯基)酯(MAP)	112
6.4.2 消除基态偶极矩:3-甲基-4-硝基氧化吡啶(POM)	113
6.4.3 手性与氢键: N -(4-硝基苯基)-(L)-脯氨酸(NPP)	118
第七章 有机非线性光学分子晶体的生长	120
7.1 原料的纯化与杂质的检测	120
7.2 气相生长	120
7.3 熔体生长	121
7.3.1 坩埚下降法	121

7.3.2 提拉法	122
7.3.3 Kyropoulos 法	122
7.4 溶液法生长晶体	122
7.4.1 基本原理	123
7.4.2 溶液降温法	123
7.4.3 溶剂蒸发生长法	124
7.4.4 几个实例	124
7.5 有机非线性光波导的制备	124
7.5.1 有机非线性光波导的优点与形式	124
7.5.2 有机晶核纤维(OCCF)和有机通道波导(OCWG)	125
7.5.3 有机薄膜晶体的生长	127
第八章 分子晶体中的三波参量非线性现象	128
8.1 光学参量放大效应和光学参量振荡器	128
8.2 尿素的参量振荡	129
8.3 POM 的光学参量相互作用	131
8.4 NPP 的参量过程	133
8.4.1 亚皮秒参量放大和取样光谱(PASS)	133
8.4.2 NPP 的参量振荡	134

第四篇 薄膜

第九章 朗格缪-勃洛杰特(LB)膜	137
9.1 LB 膜与非线性光学	137
9.2 二阶非线性光学 LB 膜	138
9.2.1 生色团分子超极化率 β 与膜宏观非线性的关系	138
9.2.2 用于二阶非线性 LB 膜的生色团	139
9.2.3 单层膜	140
9.2.4 多层膜	141
9.2.5 LB 膜的线性电光效应	143
9.2.6 其他	143
9.3 三阶非线性光学效应与 LB 膜	145
9.3.1 三阶非线性光学效应	145
9.3.2 聚二乙炔类	145
9.3.3 其他共轭化合物	146
9.3.4 大环化合物	146
第十章 极化聚合物	147
10.1 极化聚合物的基本原理	147
10.1.1 极化聚合物的概念	147
10.1.2 电场极化方法	148
10.1.3 电场极化动力学	149
10.2 实验技术	152

10.2.1 Maker 条纹二次谐波产生技术	152
10.2.2 电光效应	153
10.2.3 其他	155
10.3 极化取向的弛豫	155
10.3.1 转动扩散	155
10.3.2 取向弛豫的测定	156
10.4 极化聚合物的应用	158
10.4.1 倍频	158
10.4.2 电光器件	160
10.5 极化聚合物的种类	161
10.5.1 主客体掺杂体系	161
10.5.2 侧链型极化聚合物	162
10.5.3 主链型极化聚合物	162
10.5.4 交联型极化聚合物	163
10.5.4.1 热交联型	163
10.5.4.2 光交联型	163
10.5.5 其他	163
10.5.5.1 溶-凝胶玻璃	163
10.5.5.2 有机分子玻璃	165
10.6 未来的一些研究方向	165
参考文献	166
缩略语表	169