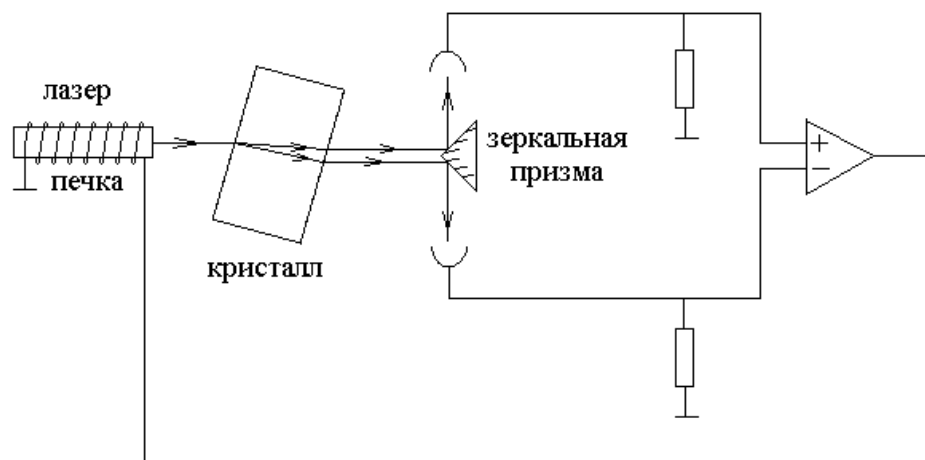


Активная стабилизация частоты генерации лазера (продолжение).

Стабилизация частоты генерации лазера в двухмодовом режиме.

В продаже представлен He-Ne лазер, стабилизированный по этой схеме:



Используемый в этой схеме лазер не имеет брюстеровских окон. Зеркала лазера приклеены к разрядной трубке. В таком случае управлять длиной резонатора и частотой генерации лазера с помощью пьезокерамики не удастся. Для управления частотой генерации вокруг разрядной трубки лазера намотана нихромовая спираль — электрическая печка. Печка при нагревании изменяет температуру разрядной трубки и через температурный коэффициент расширения стекла разрядной трубки изменяет ее длину.

На длине резонатора укладывается целое число полувольт $L = m \frac{\lambda}{2}$. Только в этом случае волна, проходя резонатор в обоих направлениях, наступает себе на хвост в той же фазе, то есть оказывается в фазе сама с собой. Изменение длины резонатора изменяет длину волны излучения. С изменением длины волны изменяется частота излучения лазера.

Напряжение питания на эту печку подается с выхода дифференциального усилителя. На два входа усилителя подаются напряжения с двух приемников излучения.

Излучение лазера без брюстеровских окон содержит две линейные поляризации ортогональные друг другу. Излучение этих двух поляризаций разносится пространственно в результате двулучепреломления при прохождении лазерного луча через плоскопараллельную кристаллическую пластинку. Разнесенные пространственно лучи отражаются зеркальной призмой на два приемника излучения.

Длина резонатора лазера подобрана таким образом, что в пределах контура линии усиления среды возможна генерация на двух продольных модах,

$\frac{c}{2L}$ — разность частот соседних продольных мод лазера.

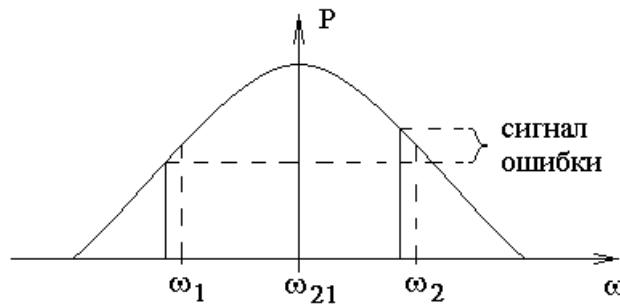
При симметричной настройке частот этих мод относительно центра линии усиления лазерной среды две моды усиливаются одними и теми же

молекулами с лучевыми скоростями $\omega \mp kV_z = \omega_{21}$, откуда $V_z = \pm \frac{\Delta\omega}{k}$, где $\Delta\omega$ — отстройка каждой из мод относительно центра линии усиления. Волны двух мод, бегущие по резонатору лазера слева направо, усиливаются разными молекулами. Мода с большей частотой усиливается молекулами $V_z = +\frac{\Delta\omega}{k}$, а мода с меньшей частотой усиливается молекулами $V_z = -\frac{\Delta\omega}{k}$. Для двух волн во встречном направлении, наоборот, $V_z = -\frac{\Delta\omega}{k}$ и $V_z = +\frac{\Delta\omega}{k}$. В результате две моды усиливаются одними и теми же молекулами, то есть отнимают усиление друг от друга или, как говорят, конкурируют.

Конкуренция оказывается слабее, если поляризации двух мод ортогональны друг другу. В этом случае одну моду усиливают молекулы, например, с вертикальным колебанием диполей молекул, а другую моду — с горизонтальным колебанием диполей. Чем меньше конкуренция, тем больше суммарная мощность генерации двух мод. При этом поляризации двух продольных мод лазера автоматически подстраиваются так, чтобы быть ортогональными друг другу.

В таком случае два приемника регистрируют не просто свет двух разных поляризаций, но и двух разных продольных мод с разными частотами.

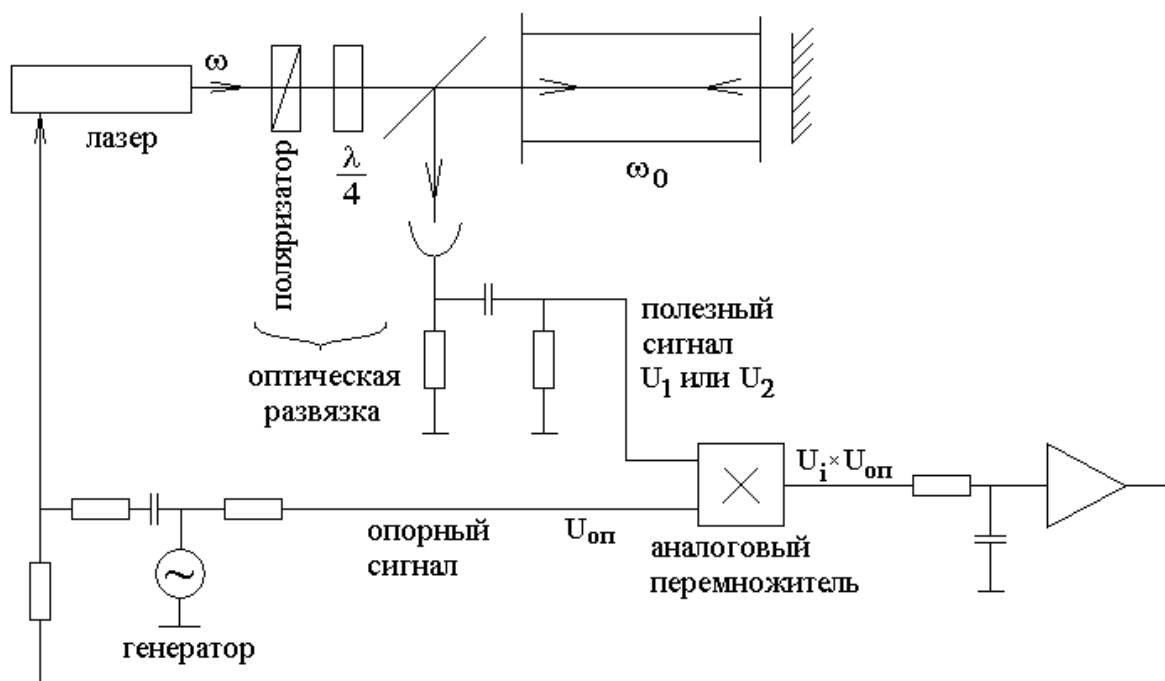
Предположим, что длина резонатора лазера случайно так изменилась, что две продольные моды сместились по частоте относительно симметричной настройки с частотами ω_1 и ω_2 , которые изображены на рисунке вертикальными пунктирными линиями.



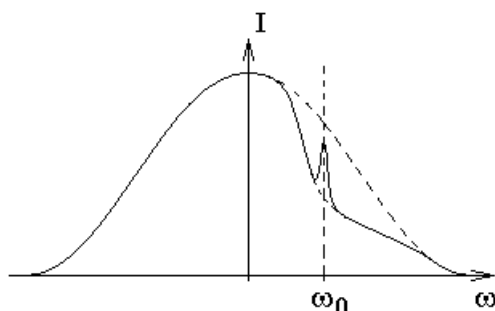
Сплошными вертикальными линиями изображены две продольные моды лазера при некотором изменении длины резонатора. Частотный интервал между продольными модами при этом практически не изменяется. Продольные моды смещаются так, что мощность генерации одной из них уменьшается, а другой — увеличивается. Разность мощностей двух мод и пропорциональная ей разность напряжений с двух приемников $U_+ - U_-$ является сигналом ошибки для рассматриваемой системы стабилизации. Система стабилизации старается изменить длину резонатора лазера так, чтобы мощности двух продольных мод были одинаковыми. При этом система стабилизации удерживает

симметричную настройку частот двух продольных мод относительно центра линии усиления лазерной среды. То есть система стабилизации стабилизирует частоты этих двух мод.

Стабилизация лазера по резонансу насыщения поглощения.



В этой схеме зависимость мощности сигнала на приемнике от частоты генерации лазера имеет следующий вид:



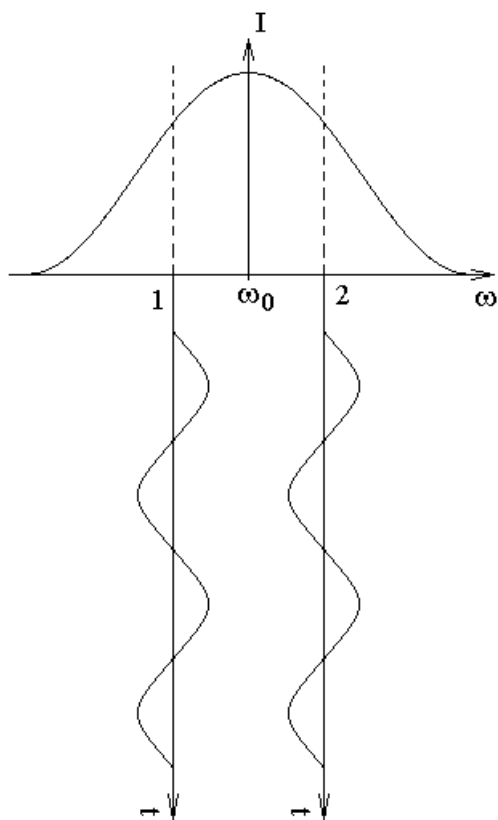
Здесь ω_0 — центр линии поглощения газа в кювете, пунктирная часть зависимости — мощность генерации лазера. Вокруг частоты ω_0 в мощности света на приемнике появляется широкий доплеровский провал линии поглощения газа, находящегося в кювете. В центре линии поглощения на частоте ω_0 наблюдается узкий пик резонанса насыщения поглощения.

Для формирования сигнала ошибки в данном случае используется синхронное детектирование сигнала на частоте генератора, которое производится на аналоговом перемножителе сигналов.

Опорное напряжение U_{on} синхронного детектирования подается на нижний вход аналогового перемножителя. На верхний вход перемножителя поступает переменная часть напряжения с приемника лазерного излучения.

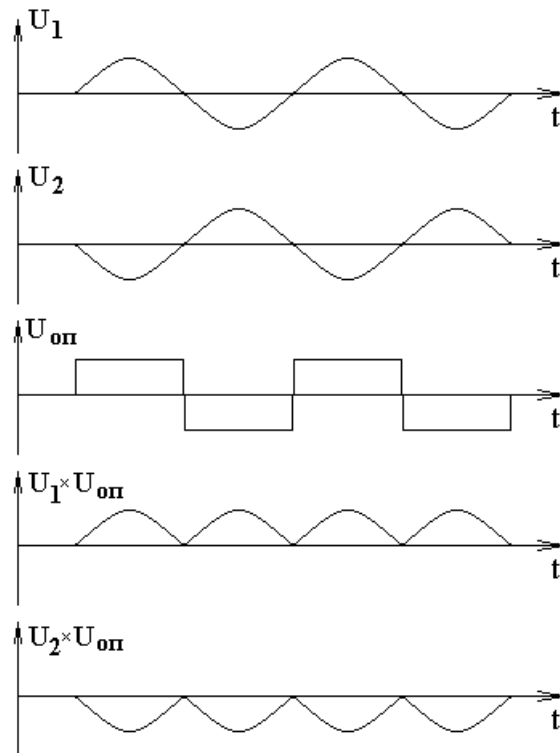
Синусоидальное напряжение с генератора подается на пьезокерамику лазера и покачивает частоту лазера с частотой генератора. Этой же синусоидой оказывается промодулирована мощность излучения на приемнике света. Фаза синусоиды модуляции зависит от того, на каком склоне резонанса насыщения поглощения находится среднее значение частоты лазера.

Для большей наглядности на нижеследующем рисунке резонанс насыщения поглощения растянут по оси частот.



Из рисунка видно следующее. Если средняя частота генерации находится на левом склоне резонанса и качнулась чуть вправо, то мощность на приемнике возросла. Если же средняя частота находится на правом склоне и качнулась чуть вправо, то мощность уменьшилась. То есть на двух склонах резонанса фаза колебаний напряжения с приемника будет противоположной.

На нижеследующем рисунке приведены напряжения на входах и выходах аналогового перемножителя для средней частоты генерации на левом склоне резонанса и на правом склоне. Для простоты рассуждений будем считать, что опорное напряжение на нижнем входе перемножителя имеет форму прямоугольников, а не синусоиды.



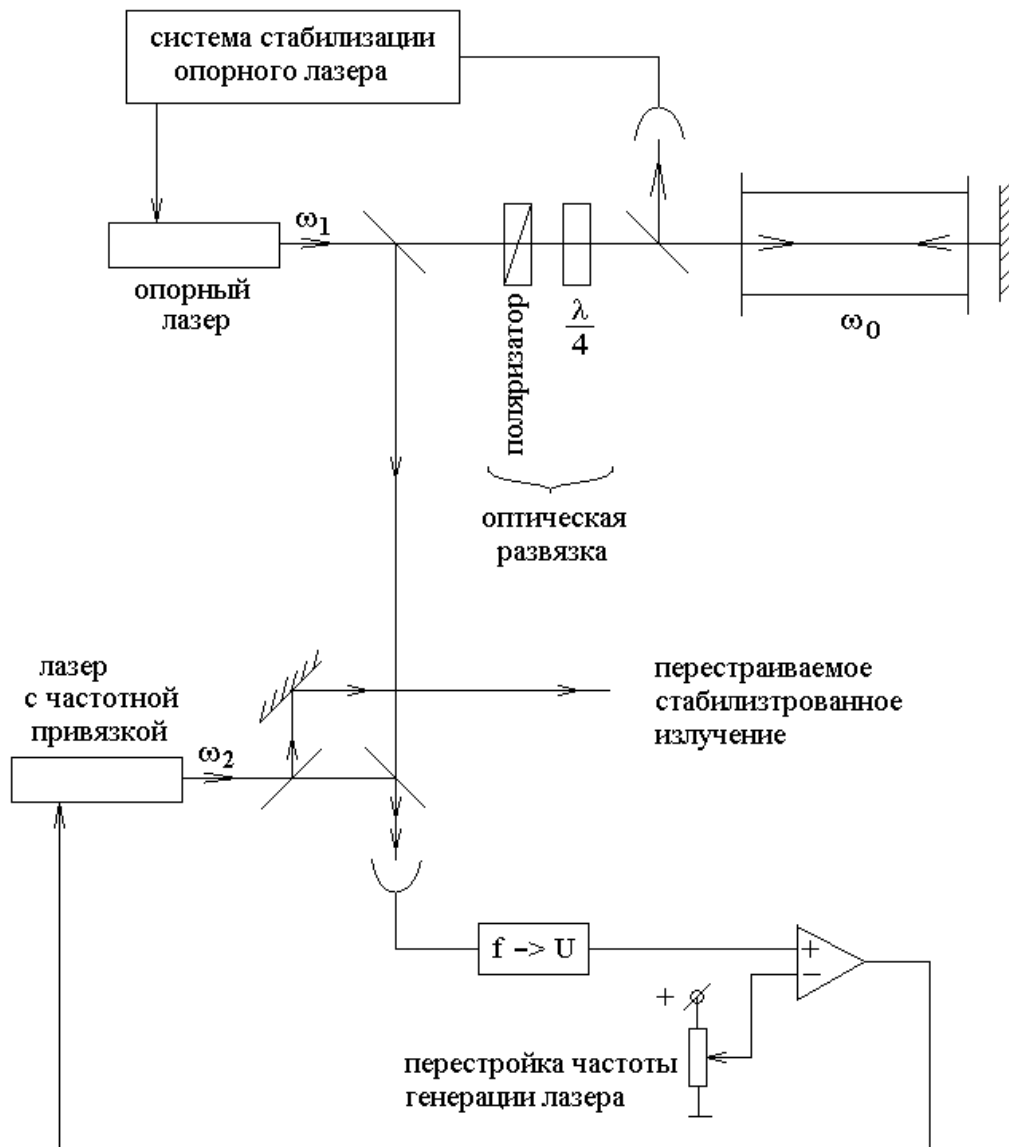
Здесь U_1 и U_2 — напряжения на верхнем входе перемножителя в двух случаях: когда частота генерации лазера находится на левом склоне резонанса насыщения поглощения и когда частота находится на правом склоне; $U_{оп}$ — опорное напряжение синхронного детектора, подаваемое на нижний вход перемножителя; $U_1 \cdot U_{оп}$ — напряжение на выходе перемножителя, если частота генерации лазера находится на левом склоне резонанса насыщения поглощения; $U_2 \cdot U_{оп}$ — напряжение на выходе, если частота на правом склоне.

Сглаженное RC -цепочкой напряжение с выхода перемножителя является сигналом ошибки системы стабилизации. После усиления это напряжение подается на пьезокерамику лазера для управления частотой его генерации. Усилитель может быть инвертирующим или не инвертирующим в зависимости от того, в какую сторону изменяется частота генерации лазера при увеличении напряжения на пьезокерамике. Если частота возрастает, то для получения отрицательной обратной связи усилитель должен быть не инвертирующим.

Система стабилизации стремится удерживать нулевое значение сигнала ошибки, что соответствует стабилизации частоты генерации по нулю первой производной зависимости мощности на приемнике от частоты. Ноль первой производной с хорошей точностью соответствует центру резонанса.

Система частотной привязки одного лазера к другому.

Ниже приведена принципиальная схема экспериментальной установки, позволяющая получить частотно стабилизированное излучение лазера с возможностью медленной перестройки стабилизированного излучения по частоте (сканирования по частоте).



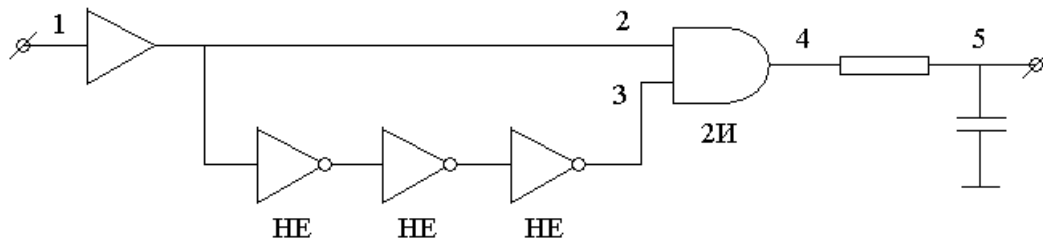
Здесь верхний так называемый опорный лазер стабилизирован по резонансу насыщения поглощения. Вся электронная часть системы стабилизации опорного лазера изображена одним прямоугольником.

Излучение опорного лазера служит частотным репером для стабилизации частоты генерации (частотной привязки) нижнего лазера медленно перестраиваемого по частоте.

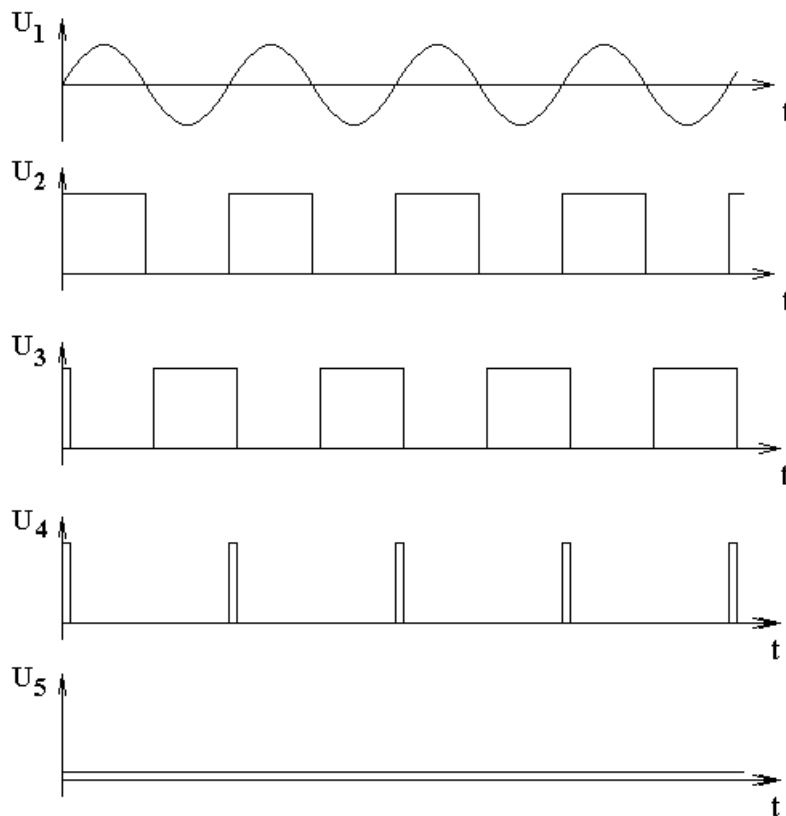
Излучение двух лазеров интерферирует на приемнике, электрическое напряжение с которого представляет собой синусоиду на частоте равной разности частот двух лазеров.

С приемника электрический сигнал поступает на преобразователь частота-напряжение $f \rightarrow U$. Напряжение с выхода преобразователя сравнивается с постоянным напряжением, которое с потенциометра подается на минус-вход дифференциального усилителя. Разность этих напряжений на двух входах дифференциального усилителя является сигналом ошибки системы частотной привязки перестраиваемого лазера. Усиленное напряжение с выхода дифференциального усилителя поступает на пьезокерамику для управления частотой генерации лазера.

Принципиальная схема преобразователя частота-напряжение изображена на нижеследующем рисунке.



На следующем рисунке приведены напряжения в контрольных точках 1, 2, 3, 4, 5.

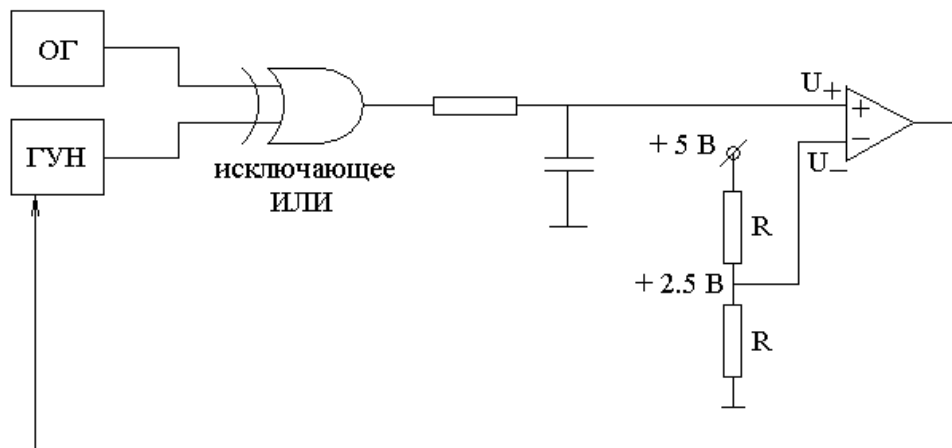


Чем больше частота синусоиды в точке 1, тем чаще импульсы в точке 4 и тем больше постоянное напряжение в точке 5.

Фазовая автоподстройка частоты (ФАПЧ) (PLL — Phase-Locked Loop) генератора управляемого напряжением (ГУН) (VCO — Voltage-Controlled Oscillator).

В современных схемах частотной привязки используется фазовая подстройка частоты биения двух лазеров под частоту некоторого опорного генератора (ОГ). Такая система привязки требует большего быстродействия логических схем, но обеспечивает более высокую степень стабилизации частоты перестраиваемого лазера.

Принципиальная схема фазовой автоподстройки частоты приведена на следующем рисунке, где роль сигнала с приемника биений двух лазеров выполняет сигнал с генератора управляемого напряжением (ГУН):



Здесь подразумевается, что оба генератора генерируют прямоугольное напряжение с логическими уровнями. Для получения такого сигнала частоту биений двух лазеров пропускают через компаратор, который положительное входное напряжение преобразует в логическую единицу, а отрицательную — в логический ноль. Таблица истинности для логических уровней микросхемы исключающее ИЛИ:

0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Пусть разность фаз генераторов ОГ и ГУН равна $\delta\varphi$.

Если $\delta\varphi = 0$, то $U_+ = 0V$.

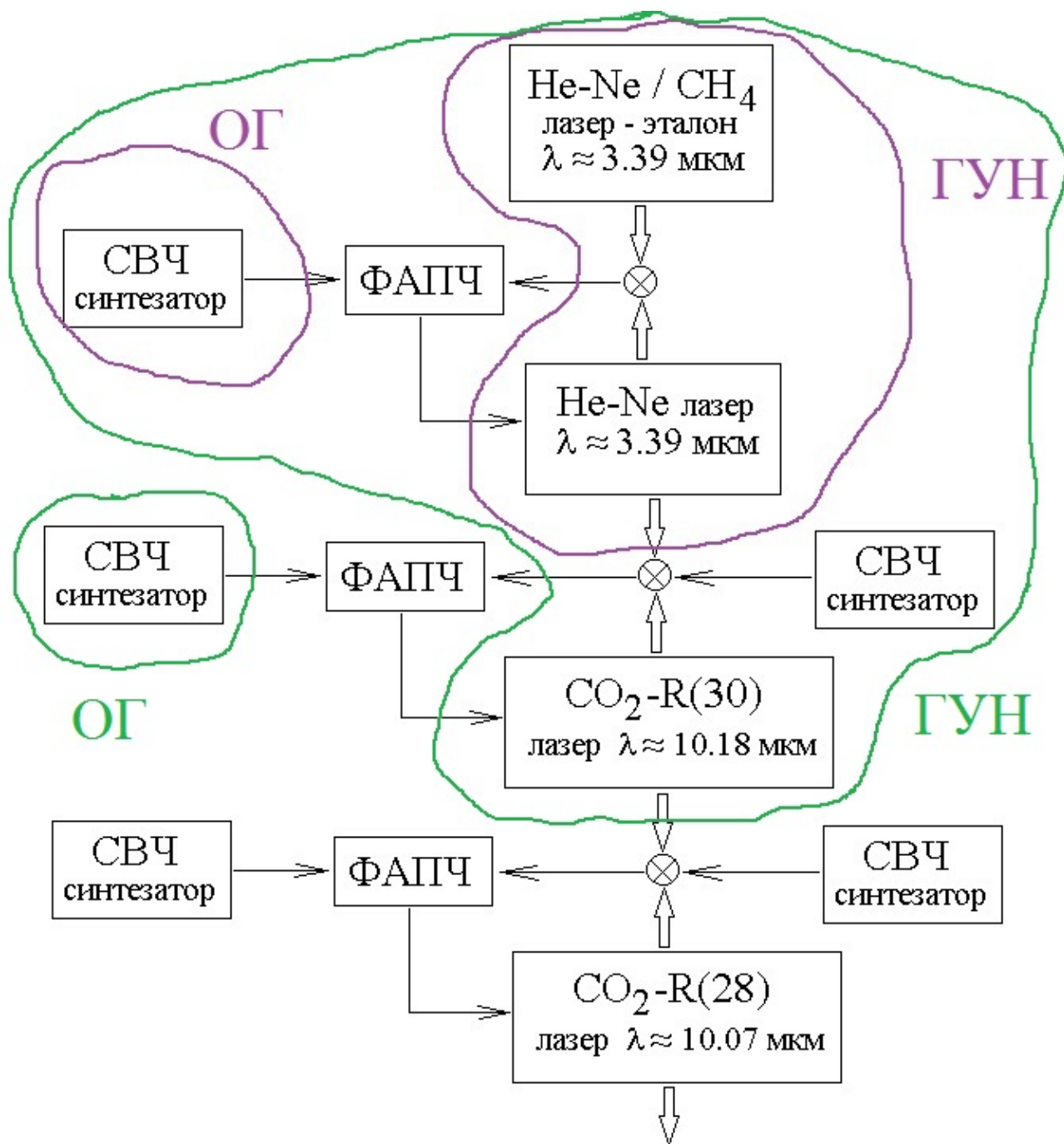
Если $\delta\varphi = \pi$, то $U_+ = 5V$.

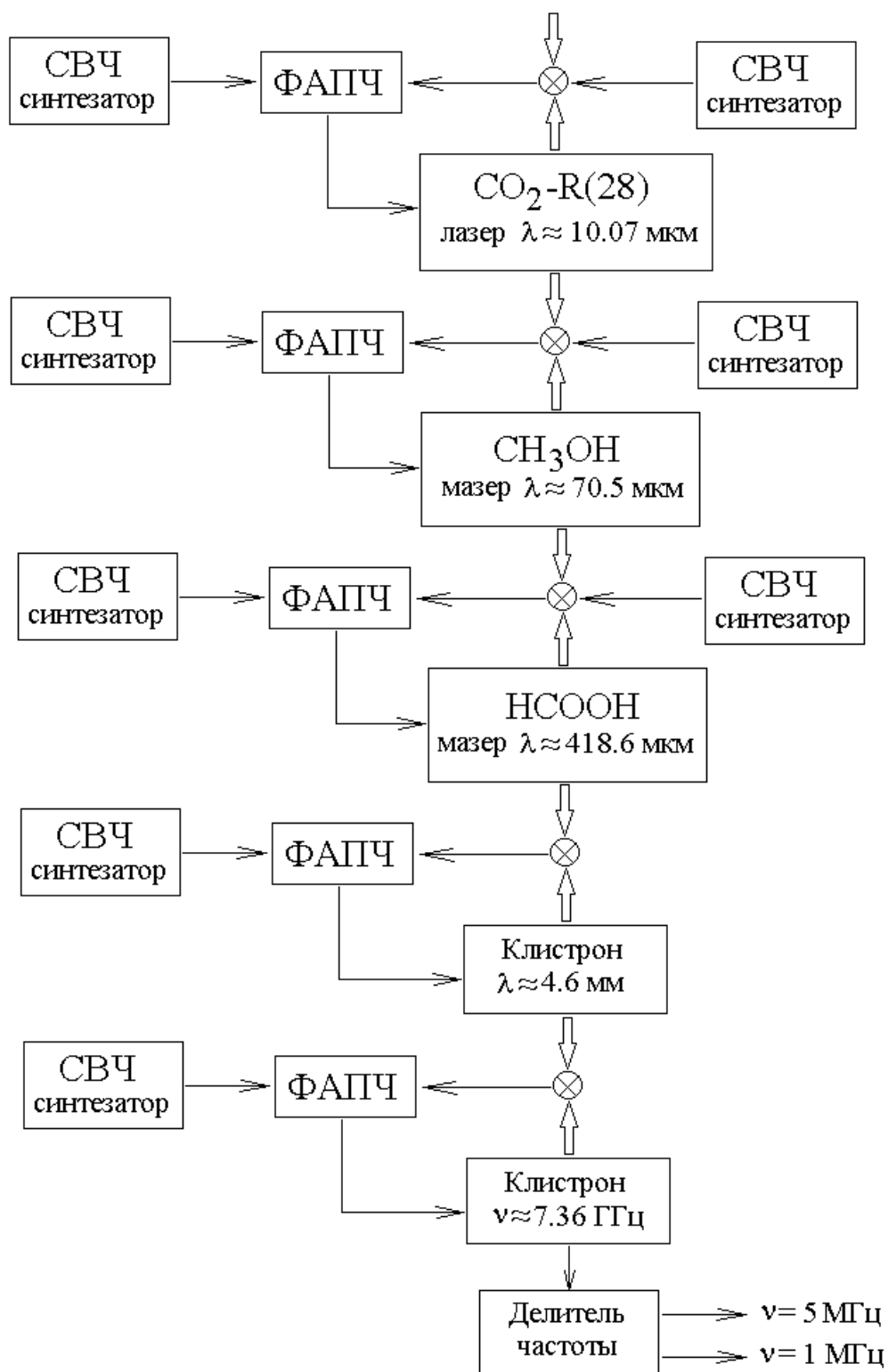
Если $\delta\varphi = \frac{\pi}{2}$ или $\delta\varphi = \frac{3\pi}{2}$, то $U_+ = 2.5V$.

Одно из этих двух значений — положение устойчивого равновесия системы стабилизации частоты ГУН по частоте ОГ.

Радиооптический мост.

Для сравнения оптической частоты и частоты в радиочастотном диапазоне служит так называемый радиооптический мост. Принципиальная схема радиооптического моста приведена на нижеследующем рисунке.





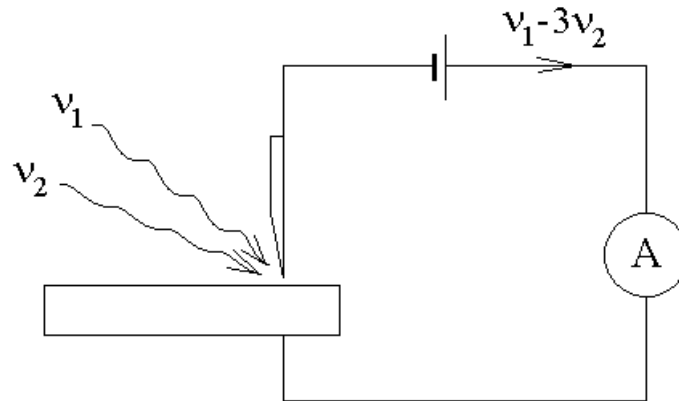
Laser — Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation.
 Maser — Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation.

88,376,182,599,985 (8) Гц \approx 88 ТГц

P. V. POKASOV, R. HOLZWARH, TH. UDEM, M. ZIMMERMANN, J. REICHERT, M. NIERING, T. W. HDNSCH, A. K. DMITRIYEV, S. N.

BAGAYEV, P. LEMONDE, G. SANTARELLI, P. LAURENT, M. ABGRALL, A. CLAIRON, and C. SALOMON (2002) ABSOLUTE FREQUENCY MEASUREMENTS OF A METHANE-STABILIZED TRANSPORTABLE HE-NE LASER AT 3.39 μm . *Frequency Standards and Metrology*: pp. 510-512.

Для сравнения почти кратных частот лазеров используется приемник излучения типа "кошачий ус".



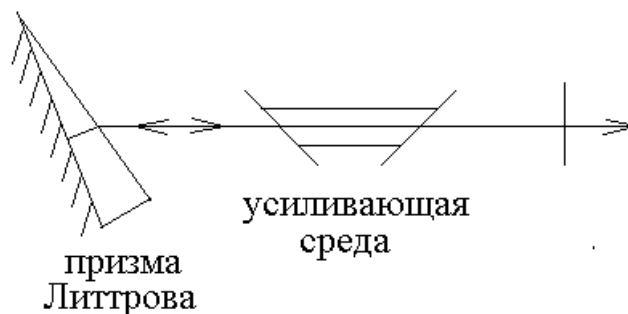
Это приемник, который реагирует на напряженность электрического поля световой волны, а не на интенсивность, как остальные приемники оптического диапазона. Например, в фототоке приемника можно получить сигнал на частоте $v_1 - 3v_2$, если эта частота достаточно низкая.

Селекция лазерных мод.

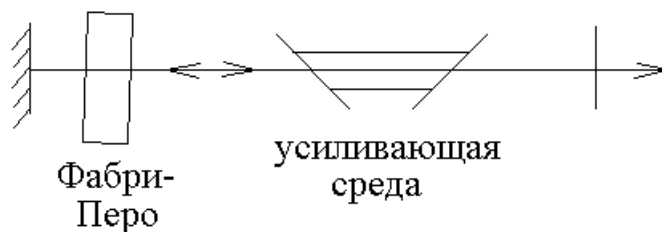
Каждый из лазеров радиооптического моста должен работать в одночастотном режиме генерации. Для получения одночастотного режима используются различные методы селекции лазерных мод.

Поперечные моды устраняются с помощью внутриврезонаторной ирисовой диафрагмы.

Для грубой селекции продольных мод вместо одного из зеркал, например, лазера на красителях часто используют призму Литтрова (призма с зеркальной гранью) или отражательную дифракционную решетку в автоколлимационном режиме для CO_2 -лазера.



Для выделения генерации на одной продольной моде используются внутрирезонаторный интерферометр Фабри — Перо или пара таких интерферометров.



Фемтосекундный лазер.

Режим синхронизации лазерных мод. Гелий-неоновый лазер с кристаллом KDP (эффект Погкельса) с синхронизацией мод.



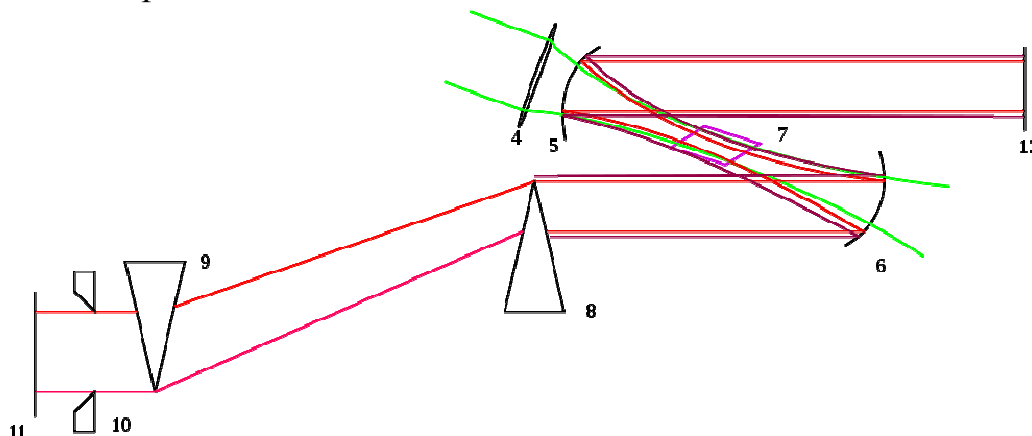
Окна Брюстера — линейная поляризация света. Модулятор — фазовая пластинка управляемая электрическим напряжением. На модулятор подается синусоида с частотой биений продольных мод (межмодовых биений) и постоянное напряжение. Пусть экстремальное напряжение на модуляторе соответствует нулевой разности показателей преломления модулятора. В эти моменты времени модулятор оставляет линейную поляризацию света и не вносит потерь. При остальных напряжениях модулятор пропускает эллиптически поляризованный свет, а в усилении участвует только линейно поляризованный свет, который брестеровские окна пропускают без потерь. То есть при остальных напряжениях модулятор вносит потери. Потери синусоидально модулированы на частоте межмодовых биений.

Представим себе, что в резонаторе лазера бежит один световой импульс, отражаясь между зеркалами лазера. Этот световой импульс может проходить через внутрирезонаторный модулятор в те моменты, когда модулятор имеет максимальное пропускание. В таком случае модулятор не будет ослаблять световой импульс в резонаторе лазера. Излучение лазера будет представлять собой световые импульсы с частотой межмодовых биений лазера.

Фазы продольных мод лазера автоматически подстраиваются друг под друга таким образом, чтобы сформировать из синусоид мод короткий импульс, который проходит через модулятор как раз в момент его максимального пропускания света.

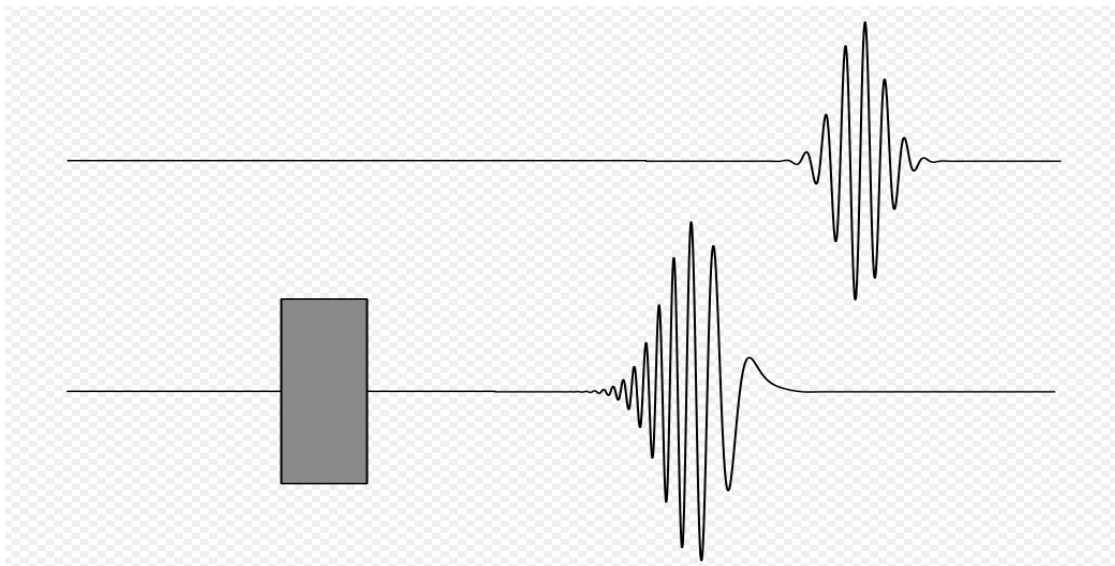
Это и есть синхронизация мод. Чем шире частотная полоса усиления лазера, тем более узкий во времени световой импульс можно получить.

Титан-сапфировый лазер $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Ti}^{3+}$, полоса усиления $\lambda = (700 - 1100) \text{ нм}$ ширина спектра излучения $\Delta\lambda = 20 \text{ нм}$, длительность импульса $\tau = 60 \text{ фс}$.



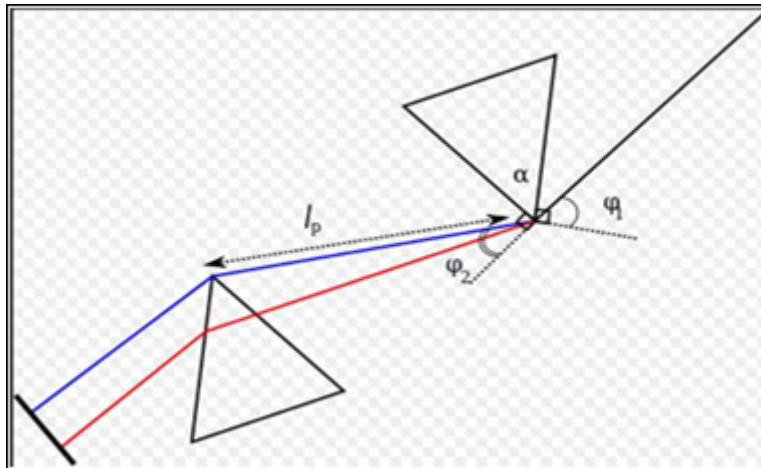
Накачка аргоновым лазером. Призмы для компенсации дисперсии групповых скоростей (ДГС). Диаметр диафрагмы 10 для настройки длительности импульса. Положение диафрагмы 10 по вертикали — перестройка средней длины волны по контуру линии усиления.

Призмы 8, 9 для компенсации дисперсии групповых скоростей (ДГС) — control of group velocity dispersion.



Если световой импульс пропустить через прозрачную среду, то низкие частоты импульса с меньшим показателем преломления проходят среду быстрее и оказываются в голове прошедшего светового импульса. Внутри линии поглощения — аномальная дисперсия света, и будет обратный эффект. Но внутри линии усиления дисперсия окажется нормальной, и эффект снова будет таким, как для прозрачной среды.

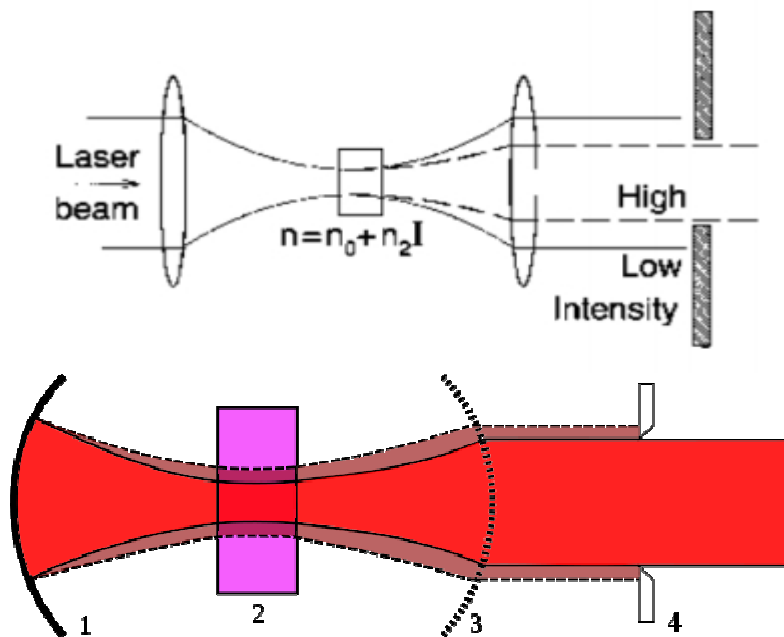
Чтобы устранить расползание импульса (для компенсации дисперсии групповых скоростей) применяют пару призм.



Здесь красный свет долго проходит внутри призмы. Для красного луча получается большая длина оптического пути. Красный свет задерживается относительно синего света и компенсирует дисперсию групповых скоростей.

Синхронизация мод.

Мощный свет наводит в усиливающей среде оптическую линзу. Кривизна зеркал подобрана так, чтобы условия генерации (условия прохождения света через диафрагму 10) были оптимальны с учетом наведенной светом линзы. На следующем рисунке свет проходит диафрагму без потерь только в случае большой интенсивности света.



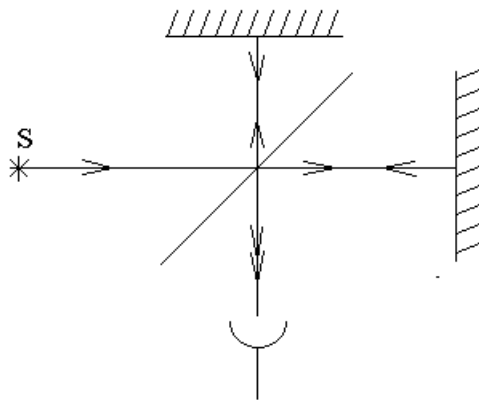
Этот принцип работает для диафрагмы 10 титан-сапфирового лазера. В результате происходит синхронизация мод лазера для формирования короткого импульса с большой интенсивностью света, так как именно такой импульс пройдет диафрагму с минимальными потерями.

Сначала диафрагму делают широкой, чтобы генерация началась. Затем диафрагму сжимают, так чтобы генерация была возможна только при большой интенсивности излучения. В результате продольные моды лазера

синхронизируются так, чтобы сформировать короткий световой импульс с большой интенсивностью.

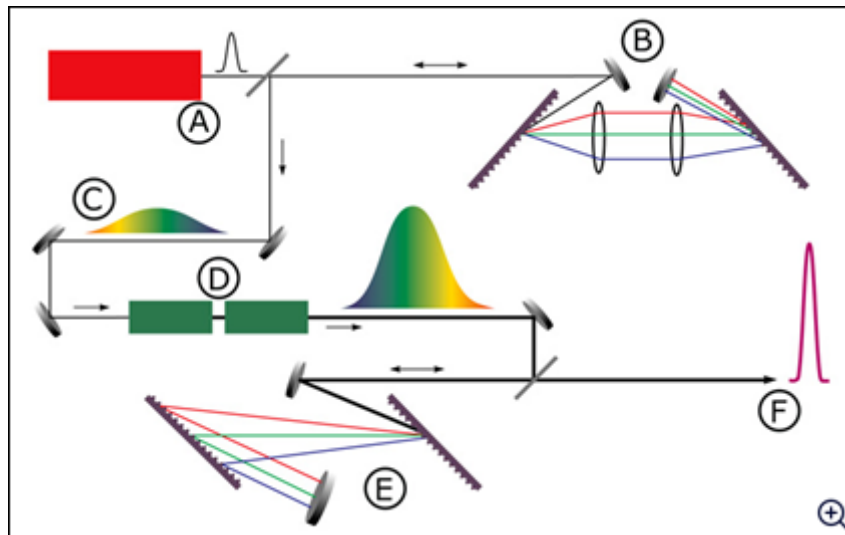
Измерение длительности импульса.

Световой импульс пропускают через интерферометр Майкельсона. При нулевой разности хода наблюдается максимум интерференции двух лучей. При перемещении одного из зеркал на четверть длины волны разность хода меняется на половину длины волны и наблюдается минимум мощности на приемнике света. Перемещая одно из зеркал, смотрят, когда пропадают колебания мощности на приемнике. Колебания пропадают из-за того, что два импульса приходят последовательно во времени, а не одновременно. Это позволяет оценить длительность импульса.



Усиление импульса.

Чирпирование импульса на дифракционной решетке (растяжение во времени) перед усилением вне резонатора и обратное чирпирование после усиления.



Свет проходит пару решеток **В** туда и обратно. При этом для красного света длина пути меньше, чем для синего света. В результате импульс растягивается во времени. В голове импульса бегут низкие частоты (красный свет). Это процесс чирпирования импульса.

Далее чирпированный импульс проходит среду оптического усилителя **Д**.

После этого усиленный импульс проходит систему **Е** обратного чирпирования из других двух решеток. На этих решетках красный свет проходит более длинный путь, и импульс укорачивается.

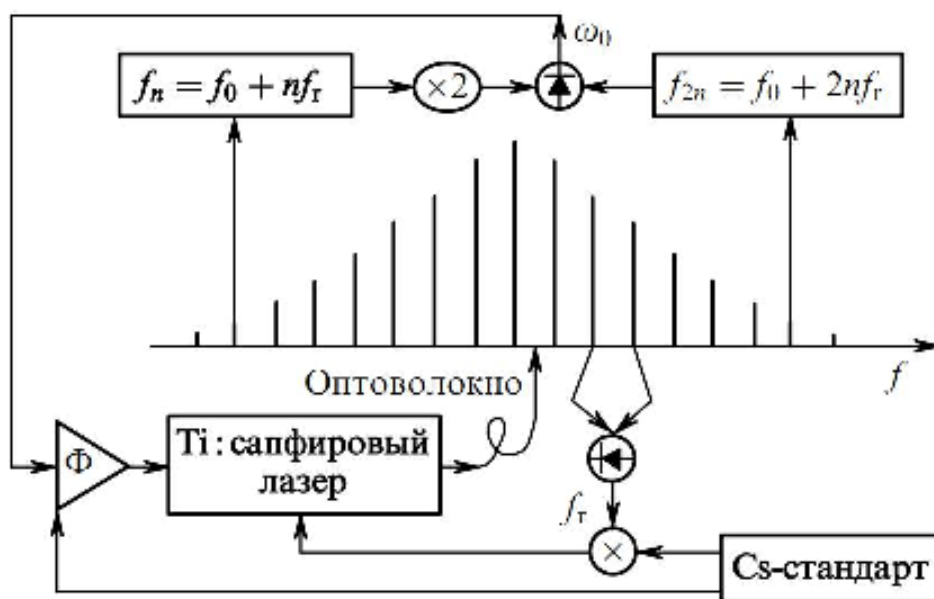
Стабилизация частоты генерации фемтосекундного лазера.

$$f_n = f_0 + nf_r$$

Здесь f_0 — дробная часть от деления несущей частоты генерации лазера f_n на частоту следования импульсов генерации f_r , n — целое число. Тогда

$$2f_n - f_{2n} = f_0.$$

Стабилизация лазера по нулю f_0 (frequency comb — гребень частот).



На верхнем приемнике света регистрируют частоту биений $f_0 = 2f_n - f_{2n}$. На нижнем приемнике света регистрируют частоту биений соседних продольных мод f_r . Титан-сапфировый лазер одновременно стабилизируется (привязывается к цезиевому стандарту частоты) по частоте биений продольных мод f_r и по условию $f_0 = 0$. Для выполнения обоих условий нужны две разные регулировки частоты генерации лазера. Одна регулировка — перемещение зеркала лазера установленного на пьезокерамике. Другая вероятная регулировка — перемещение пары призм компенсации дисперсии групповых скоростей.

Световая пуля.

Поперек луча свет сжимается в результате явления самофокусировки, если световое поле увеличивает показатель преломления среды. Причина сокращения длительности импульса состоит в том, что при распространении импульса через насыщаемый поглотитель (специальное стекловолокно) края импульса поглощаются существенно сильнее, чем центр (амплитуда которого намного больше). Это эквивалентно уменьшению длительности импульса. В экспериментах в плавленном кварце фемтосекундного лазерного импульса (волоконный тулиевый Tm лазер) на длине волны 1800 нм минимальная

длительность световой пули достигла 13.5 фс, что составляет около двух осцилляций светового поля. Диаметр световой пули порядка 10 мкм, длина — 5 мкм, энергия — 0.1 Дж. Световая пуля сопровождается излучением суперконтинуума.

Optics Letters, **38** (1), 16, (2013).

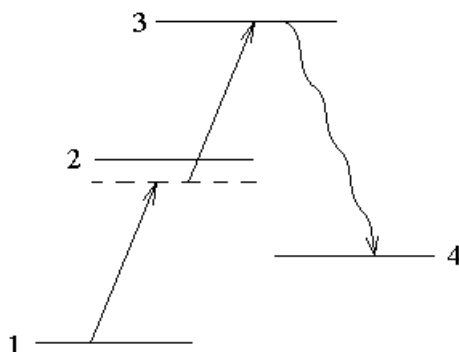
Laser Physics Letters **10**, 105401 (2013).

Квантовая электроника **43**, 326, (2013).

Резонансы двухфотонного поглощения без доплеровского уширения.

Рассмотрим неоднородно уширенные линии спектральных переходов $\Gamma \ll kU$.

Рассмотрим следующую схему уровней энергии.



Пусть переходы $1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$ разрешены в дипольном приближении. Как показывает теория, в таком случае переход $1 \rightarrow 3$ обязательно запрещен. То есть

$$\begin{cases} p_{12} \neq 0 \\ p_{23} \neq 0. \\ p_{13} = 0 \end{cases}$$

Пусть лазерное излучение имеет такую частоту ω , что энергия двух фотонов $2\hbar\omega$ примерно равна энергии перехода с 1-го уровня на 3-й:

$$|2\omega - \omega_{31}| \approx kU, \text{ где } k = \frac{2\pi}{\lambda} \text{ — волновое число, } U = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}} \text{ — наиболее}$$

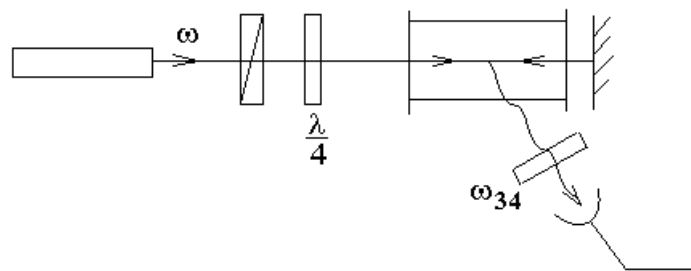
вероятная скорость молекул газа.

Пусть уровень энергии 2 находится близко к середине между уровнями 1 и 3, но различие гораздо больше доплеровской ширины линий:

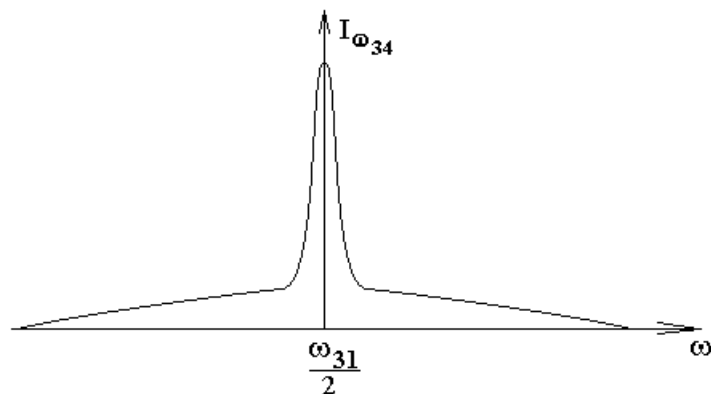
$$\left| \frac{\omega_{31}}{2} - \omega_{21} \right| \gg kU.$$

В эксперименте регистрируется мощность спонтанного излучения на переходе $3 \rightarrow 4$.

Оптическая схема эксперимента.



В эксперименте получают следующую зависимость интенсивности на приемнике света от частоты генерации лазера.



Качественное объяснение вида зависимости.

Сигнал состоит из двух контуров: узкого высокого и широкого низкого.

Если два фотона поглощаются по одному из встречных световых волн, то в системе отсчета молекулы частоты фотонов будут иметь значения $(\omega - kV_z)$ и $(\omega + kV_z)$. Тогда из баланса энергии получим:

$$\hbar(\omega - kV_z) + \hbar(\omega + kV_z) = \hbar\omega_{31} \quad \Rightarrow$$

$$\omega = \frac{\omega_{31}}{2} \quad \text{— узкий по частоте лазера } \omega \text{ сигнал; } V_z \text{ — любое, то есть в}$$

формировании сигнала участвуют молекулы со всеми возможными скоростями, поэтому сигнал имеет большую амплитуду.

Если два фотона поглощаются из одной световой волны, то из баланса энергии в системе отсчета молекулы получим:

$$2\hbar(\omega - kV_z) = \hbar\omega_{31} \quad \Rightarrow$$

$$\omega \text{ — любое, следовательно, сигнал — широкий контур; } V_z = \frac{2\omega - \omega_{31}}{2k}, \text{ то}$$

есть в формировании сигнала на каждой частоте ω участвует небольшой набор молекул с фиксированной лучевой скоростью, следовательно, сигнал имеет малую амплитуду.

Количественное описание.

Рассмотрим уравнение Неймана для матрицы плотности ρ :

$$i\hbar \dot{\hat{\rho}} = [\hat{H}, \hat{\rho}],$$

где $\hat{H} = \hat{H}_0 - (\hat{p}, \vec{E}(t)) = \hat{H}_0 - \hat{p}E(t)$ — оператор Гамильтона, \hat{H}_0 — невозмущенный световым полем оператор Гамильтона, \hat{p} — оператор дипольного момента молекулы, $\vec{E}(t)$ — напряженность светового поля, \hat{p} — оператор проекции дипольного момента молекулы на единичный вектор поляризации световой волны.

Пусть для простоты встречные световые волны имеют одинаковую вещественную амплитуду ε_0 , тогда

$$E(t) = \varepsilon_0 \cdot \cos(\omega_1 t + \varphi_{10}) + \varepsilon_0 \cdot \cos(\omega_2 t + \varphi_{20})$$

$$\text{Здесь } \begin{cases} \omega_1 = \omega - kV_z \\ \omega_2 = \omega + kV_z \end{cases}$$

Возьмем уравнение Неймана

$$i\hbar \dot{\hat{\rho}} = [\hat{H}_0 - \hat{p}E(t), \hat{\rho}]$$

и раскроем коммутатор

$$i\hbar \dot{\hat{\rho}} = \hat{H}_0 \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H}_0 - E(t) \cdot (\hat{p} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{p}).$$

Подставим в это уравнение матрицы операторов в представлении собственных функций невозмущенного оператора Гамильтона \hat{H}_0 .

Матрица плотности будет иметь вид произвольной эрмитовой матрицы:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} \end{pmatrix}, \text{ где } \rho_{ik} = \rho_{ki}^*.$$

Невозмущенный оператор Гамильтона примет в этом представлении диагональный вид:

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 \end{pmatrix}.$$

Оператор проекции дипольного момента перехода на единичный вектор поляризации световой волны, наоборот, имеет нулевые диагональные элементы:

$$\hat{p} = \begin{pmatrix} 0 & p_{12} & 0 \\ p_{21} & 0 & p_{23} \\ 0 & p_{32} & 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь учтено, что $p_{13} = p_{31} = 0$.

Напомним, что матричные элементы оператора проекции дипольного момента могут быть вычислены по следующим формулам:

$$p_{nk} = \int \psi_n^* \cdot (\vec{p}, \vec{e}) \cdot \psi_k \cdot dV,$$

где $\vec{p} = \sum_i q_i \vec{r}_i$ — дипольный момент молекулы, \vec{e} — единичный вектор

поляризации световой волны.

Выберем фазы собственных функций ψ_1 и ψ_3 невозмущенного оператора Гамильтона так, чтобы все матричные элементы проекции дипольного момента

были вещественными $\begin{cases} p_{12} = p_{21} \\ p_{23} = p_{32} \end{cases}$, тогда

$\hat{p} = \begin{pmatrix} 0 & p_{12} & 0 \\ p_{12} & 0 & p_{23} \\ 0 & p_{23} & 0 \end{pmatrix}$ — оператор проекции дипольного момента на

единичный вектор поляризации световой волны.