

Cette relation généralise au domaine non linéaire en $F(t)$ et pour le moment d'ordre 1 de la distribution spectrale

$$\bar{E} \sim \int_{-\infty}^{+\infty} \omega I(\omega) d\omega$$

le théorème de spectroscopie théorique linéaire suivant lequel ce moment est égal à la dérivée première prise pour $\tau = 0$ de la fonction d'autocorrélation de $F(t)$.

3° Diverses formes de la relation (II,10).

Nous allons voir maintenant que la relation (II,10) peut être transformée et apparaître sous des formes plus directement liées à la notion de bilan énergétique.

Pour cela, calculons la dérivée par rapport à τ . On a immédiatement

$$\frac{\partial f}{\partial \tau} = \left\langle \text{Trace} \left\{ \rho(T) i\hbar^{-1} (\mathcal{H}(T) - \tilde{\mathcal{H}}(T)) e^{i\hbar^{-1} (\mathcal{H}(T) - \tilde{\mathcal{H}}(T)) \tau} \right\} \right\rangle$$

D'où en portant dans (II,10)

$$\bar{E}(T) = \left\langle \text{Trace} \left\{ \rho(T) (\mathcal{H}(T) - \tilde{\mathcal{H}}(T)) \right\} \right\rangle \quad (\text{II,11})$$

Mais d'après la relation (I,5)

$$\begin{aligned} \rho(T) &= u(T) \rho(0) u^{-1}(T) \\ \text{avec } u(T) &= \mathcal{L} \exp(-i\hbar^{-1} \int_0^T (H(t') + F(t')) dt') \end{aligned}$$

(où $H(t') = H_a + V(t')$)

Puisque $\tilde{\mathcal{H}}(T)$ commute avec $F(t')$ quel que soit t' , donc avec $u(T)$, on peut alors écrire :