

Ou, en utilisant la loi de dérivation d'un opérateur par rapport au temps en mécanique quantique :

$$\bar{E}(T) = -i\hbar^{-1} \int_0^T \text{Trace} \left\langle \mathcal{H}(T) [H(t) + F(t), \rho(t)] \right\rangle dt + \left\langle \left\{ \frac{1}{T} \int_0^T (V(t') - V(0)) dt' \rho(0) \right\} \right\rangle$$

On verra que le premier terme du membre de droite est proportionnel à T ; or on peut se rendre compte que le second terme reste fini lorsque $T \rightarrow \infty$; comme c'est dans cette limite que l'on considèrera finalement $\bar{E}(T)$ puisqu'on calculera

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \bar{E}(T)$$

on peut donc négliger ce second terme.

Pour la même raison, on peut également remplacer dans le premier terme $\mathcal{H}(t)$ par sa limite pour les très grandes valeurs de T , c'est à dire $H_a + \frac{1}{T} \int_0^T V(t') dt' \cong H_a$

car la perturbation $V(t)$ due au thermostat à une moyenne nulle lorsque celui est en équilibre thermodynamique comme c'est le cas ici.

On peut ainsi écrire :

$$\bar{E}(T) = -i\hbar^{-1} \int_0^T \left\langle \text{Trace} \left\{ H_a [H(t) + F(t), \rho(t)] \right\} \right\rangle dt \quad (\text{II}, 14)$$

soit, en utilisant la possibilité de permutation circulaire des opérateurs sous le symbole Trace :

$$\bar{E}(T) = -i\hbar^{-1} \int_0^T \left\langle \text{Trace} \left\{ [\rho(t), H_a] (V(t) + F(t)) \right\} \right\rangle dt$$

Or, puisque

$$\text{Trace} \left\{ [\rho(t), V(t) + F(t)] (V(t) + F(t)) \right\} \equiv 0$$