$$\mathcal{U}(\tau) = \exp(-i\hbar^{-1}(H_r+H_t+V(r) + \Delta V(r,\theta))\tau)$$

Il est facile de montrer(voir par exemple l'article de Tsao et Curnutte cité dans les références générales,ou encore la référence (12),que l'équation (III,13) peut s'écrire sous la forme bien connue :

$$\alpha(\omega) = k \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_0^T dt' \,\mathrm{Trace}\left\{ \rho(o)(\vec{\mu}(t')\vec{\mu}(t)-\vec{\mu}(t)\vec{\mu}(t')) \times e^{i\omega(t-t')}\right.$$

ou

$$\alpha(\omega) = k \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \mathrm{Trace}\left\{ \rho(0)\int_0^T e^{i\omega t}\vec{\mu}(t)dt \int_0^T e^{-i\omega t}\vec{\mu}^*(t)\,dt \right.$$
$$\left. -\rho(0)\int_0^T e^{-i\omega t}\vec{\mu}^*(t)dt \int_0^T e^{i\omega t}\vec{\mu}(t)dt \right\}$$

soit

$$\alpha(\alpha) = k \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \sum_{\alpha'\xi'} (\alpha\xi|\rho(0)|\alpha\xi)\left[\int_0^T dt\, e^{i\omega t}(\mathcal{U}(t)\alpha\xi|\vec{\mu}|\mathcal{U}(t)\alpha'\xi') \times\right.$$
$$\int_0^T dt\, e^{-i\omega t}(\mathcal{U}(t)\alpha'\xi'|\vec{\mu}|\mathcal{U}(t)\alpha\xi) - \int_0^T dt\, e^{-i\omega t}(\mathcal{U}(t)\alpha\xi|\mu|\mathcal{U}(t)\alpha'\xi') \times$$
$$\int_0^T e^{i\omega t}(\alpha'\xi'\mathcal{U}(t)|\mu|\mathcal{U}(t)\alpha\xi)$$

Pour écrire cette équation,on a choisi $\rho(0)$ diagonal dans la base$\{|\alpha\xi)\}$,ce qui revient à prendre un opérateur densité initial fonction de $H_r + H_t + V(r)$, par exemple la distribution canonique

$$\exp(-(H_r + H_t + V)/kT) \;/\; \mathrm{Trace}\left\{ \exp(-H_r + H_t + V)/kT)\right\}$$

Cette équation montre que l'absorption observée sur une onde électromagnétique de fréquence angulaire est attribuable aux composantes de Fourier de fréquence angulaire (ω) des diverses amplitudes de probabilité :

$$(\Psi_{\alpha\xi}(t)|\vec{\mu}|\Psi_{\alpha'\xi'}(t)) \qquad \text{(III,14)}$$

où $\Psi_{\alpha\xi}$ et $\Psi_{\alpha'\xi'}$ sont les états obtenus à partir de $|\alpha\xi)$ et $|\alpha'\xi')$ par action de l'opérateur d'évolution

$$\exp(-ih^{-1}(H_r + H_t + V + \Delta V)t)$$