NOTATIONS ET SYNTAXE DE DIRAC

UN EXEMPLE : L'OPERATEUR PARITE

I- L'OPERATEUR PARITE

1-/ Considérons un système physique S dont l'espace des états est E_r ; l'opérateur parité $\hat{\Pi}$ est défini par son action sur les vecteurs de base $|r\rangle$ de E_r :

$$\hat{\Pi}|r\rangle = |-r\rangle$$

(on prendra garde à ne pas confondre $|-r_0\rangle$ et $-|r_0\rangle$*; le premier est un vecteur propre de l'opérateur position* $\hat{R}$*, de valeur propre* $-r_0$ *et de fonction d'onde* $\xi_{-r_0}(r) = \delta(r + r_0)$*; le second est un vecteur propre de* $\hat{R}$ *de valeur propre* r_0 *et de fonction d'onde* $-\xi_{r_0}(r) = -\delta(r - r_0)$*.)*

- Calculer les éléments de matrice de $\hat{\Pi}$ en représentation $\{|r\rangle\}$.
- Montrer que l'action de $\hat{\Pi}$ en représentation $\{|r\rangle\}$ est de changer le vecteur r en $-r$.
- Soit $|\psi\rangle$ le vecteur d'état du système S. Que décrit le vecteur $\hat{\Pi}|\psi\rangle$?

2-/ Montrer que l'opérateur $\hat{\Pi}$ est **unitaire** $\left(\hat{\Pi}^{-1} = \hat{\Pi}^{\dagger}\right)$ et déterminer ses valeurs propres et leur degré de dégénérescence.

3-/ Considérons les opérateurs hermitiques (respectivement appelés **symétriseur** et **antisymétriseur**) $\hat{P}_+$ et $\hat{P}_-$, tels que : $\begin{cases} \hat{P}_+ = \frac{1}{2}\left(\hat{I} + \hat{\Pi}\right) \\ \hat{P}_- = \frac{1}{2}\left(\hat{I} - \hat{\Pi}\right) \end{cases}$ où $\hat{I}$ est l'opérateur identité.

- Montrer que ces opérateurs sont respectivement les projecteurs sur deux sous-espaces orthogonaux et supplémentaires E_+ et E_- de E_r.

4-/ Considérons les kets $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ tels que : $\begin{cases} |\psi_+\rangle = \hat{P}_+|\psi\rangle \\ |\psi_-\rangle = \hat{P}_-|\psi\rangle \end{cases}$

- Montrer que $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ sont respectivement **pair** et **impair.** En déduire que les fonctions d'onde $\psi_+(r)$ et $\psi_-(r)$ sont respectivement paire et impaire.

II- OPERATEURS PAIRS ET IMPAIRS

1-/ Montrer que l'opérateur $\hat{\hat{B}}$, transformé par l'opérateur unitaire $\hat{\Pi}$ d'un opérateur $\hat{B}$ quelconque, s'écrit : $\hat{\hat{B}} = \hat{\Pi}\hat{B}\hat{\Pi}$.

(*on rappelle que l'opérateur transformé a mêmes éléments de matrice dans la base transformée, que l'opérateur dans la base initiale).*

Par définition, si $\hat{\hat{B}} = +\hat{B}$, l'opérateur B est dit **pair**, si $\hat{\hat{B}} = -\hat{B}$, l'opérateur $\hat{B}$ est dit **impair**.

- Montrer qu'un opérateur pair commute avec $\hat{\Pi}$ et qu'un opérateur impair anticommute avec $\hat{\Pi}$.

2-/ Montrer que les éléments de matrice d'un opérateur pair sont nuls entre vecteurs de parité opposée. Montrer de même que les éléments de matrice d'un opérateur impair sont nuls entre vecteurs de même parité.

- En déduire en particulier que la valeur moyenne d'un opérateur impair est nulle si l'état dans lequel elle est prise a une parité déterminée.
- Montrer que les opérateurs position $\hat{R}$ et impulsion $\hat{P}$ sont impairs.

3-/ Considérons une observable quelconque $\hat{B}_+$ paire et un vecteur propre $|\phi_b\rangle$ de $\hat{B}_+$, de valeur propre b. Quelle est la parité de $|\phi_b\rangle$ dans les deux cas suivants :

- b est non dégénérée. Que vaut dans ce cas la valeur moyenne d'un opérateur B_- prise dans cet état ?
- b est dégénérée

4-/ Soit le Hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{R})$, tel que la fonction $V(r)$ soit paire.

- En déduire que les états propres de $\hat{H}$ sont à rechercher parmi les états pairs ou impairs.
- Citer des systèmes physiques où cette simplification se rencontre dans la recherche de leurs états propres.

Corrigé

I. L'OPERATEUR PARITE

1-/

- Les éléments de matrice de $\hat{\Pi}$, en représentation $\{|r\rangle\}$ s'écrivent

$\langle r|\Pi|r'\rangle = \langle r|\left(\Pi|r'\rangle\right) = \langle r|-r'\rangle = \delta(r+r')$

- $\forall|\psi\rangle \in E_r, \quad |\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \int d^3r|r\rangle\langle r|\psi\rangle = \int d^3r\psi(r)|r\rangle \quad (1)$

(où l'on a utilisé la relation de fermeture de la base $\{|r\rangle\}$: $\int d^3r|r\rangle\langle r| = \hat{I}$)

Effectuons dans (1) le changement de variable $r' = -r$

$|\psi\rangle = \int d^3r'\psi(-r')|-r'\rangle$

Soit, en appliquant l'opérateur $\hat{\Pi}$ au vecteur $|\Psi\rangle$:

$\hat{\Pi}|\psi\rangle = \int d^3r'\psi(-r')\hat{\Pi}|-r'\rangle = \int d^3r'\psi(-r')|r'\rangle = \int d^3r\psi(-r)|r\rangle \quad (2)$

(Rappelons qu'une variable d'intégration est muette)

La comparaison de (1) et (2) montre que l'action de $\hat{\Pi}$ en représentation $\{|r\rangle\}$ est de changer le vecteur r en $-r$: $\langle r|\hat{\Pi}|\psi\rangle = \psi(-r)$

- Considérons alors un système physique S dont le vecteur d'état est $|\psi\rangle$; $\hat{\Pi}|\psi\rangle$ décrit le système obtenu à partir de S par une symétrie par rapport à l'origine des axes.

2-/ L'opérateur $\hat{\Pi}^2$ est l'opérateur identité $\hat{I}$; en effet :

$\hat{\Pi}^2|r\rangle = \hat{\Pi}\left(\hat{\Pi}|r\rangle\right) = \hat{\Pi}|-r\rangle = |r\rangle$

c'est-à-dire, puisque les kets $|r\rangle$ forment une base de E_r : $\hat{\Pi}^2 = \hat{I}$ ou encore : $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^{-1}$

(on montre aisément par récurrence que $\hat{\Pi}^n = \begin{cases} \hat{I} \text{ lorsque } n \text{ est pair} \\ \hat{\Pi} \text{ lorsque } n \text{ est impair} \end{cases}$)

- $\forall|\psi\rangle \in E_r, \langle r|\hat{\Pi}|\psi\rangle = \psi(-r) = \langle -r|\Psi\rangle \Rightarrow \langle r|\hat{\Pi} = \langle -r|$

D'autre part $\left(\hat{\Pi}|r\rangle = |-r\rangle\right)^\dagger = \langle r|\hat{\Pi}^\dagger = \langle -r|$

Comme les kets $|r\rangle$ forment une base de E_r, il en découle que $\hat{\Pi}$ est hermitique : $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^\dagger$

Et comme $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^{-1}$, on obtient: $\hat{\Pi}^{-1} = \hat{\Pi}^\dagger$, $\hat{\Pi}$ est donc également unitaire.

Soit $|\phi_\Pi\rangle$ un vecteur propre de $\hat{\Pi}$, de valeur propre p_Π :

$|\phi_\Pi\rangle = \hat{I}|\phi_\Pi\rangle = \hat{\Pi}^2|\phi_\Pi\rangle = p_\Pi^2|\phi_\Pi\rangle \Rightarrow p_\Pi^2 = 1$

Les valeurs propres de $\hat{\Pi}$ ne peuvent donc être que ± 1. Comme l'espace E_r est de dimension infinie, on voit que ces valeurs propres sont dégénérées. Un vecteur propre de $\hat{\Pi}$ de valeur propre $+1$ sera dit "pair", un vecteur propre de valeur propre -1, "impair".

3-/
$$\begin{cases} \hat{P}_+ = \frac{1}{2}\left(\hat{I} + \hat{\Pi}\right) \\ \hat{P}_- = \frac{1}{2}\left(\hat{I} - \hat{\Pi}\right) \end{cases}$$
. Ces opérateurs sont hermitiques et puisque $\hat{\Pi}^2 = \hat{I}$ on voit que $\hat{P}_+^2 = \hat{P}_+$ et $\hat{P}_-^2 = \hat{P}_-$. $\hat{P}_+$ et $\hat{P}_-$ sont donc deux projecteurs sur deux sous-espaces E_+ et E_- de E_r.

De plus :
$$\begin{cases} \hat{P}_+\hat{P}_- = \frac{1}{4}\left(\hat{I} + \hat{\Pi} - \hat{\Pi} - \hat{\Pi}^2\right) = 0 \\ \hat{P}_-\hat{P}_+ = \frac{1}{4}\left(\hat{I} - \hat{\Pi} + \hat{\Pi} - \hat{\Pi}^2\right) = 0 \end{cases}$$
.Les deux sous-espaces E_+ et E_- sont donc orthogonaux. Montrons qu'ils sont également complémentaires ; en effet, on voit immédiatement d'après les définitions de $\hat{P}_+$ et $\hat{P}_-$ que $\hat{P}_+ + \hat{P}_- = \hat{I}$.

$\forall |\psi\rangle \in E_r, |\psi\rangle = \hat{I}|\psi\rangle = \left(\hat{P}_+ + \hat{P}_-\right)|\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle$ avec $|\psi_+\rangle = \hat{P}_+|\psi\rangle$ et $|\psi_-\rangle = \hat{P}_-|\psi\rangle$

Calculons les produits $\hat{\Pi}\hat{P}_+$ et $\hat{\Pi}\hat{P}_-$:
$$\begin{cases} \hat{\Pi}\hat{P}_+ = \frac{1}{2}\hat{\Pi}\left(\hat{I} + \hat{\Pi}\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{\Pi} + \hat{I}\right) = \hat{P}_+ \\ \hat{\Pi}\hat{P}_- = \frac{1}{2}\hat{\Pi}\left(\hat{I} - \hat{\Pi}\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{\Pi} - \hat{I}\right) = -\hat{P}_- \end{cases}$$

Ces égalités permettent de montrer que les vecteurs $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$ sont respectivement pair et impair ; en effet :
$$\hat{\Pi}|\psi_+\rangle = \hat{\Pi}\hat{P}_+|\psi\rangle = \hat{P}_+|\psi\rangle = |\psi_+\rangle$$
$$\hat{\Pi}|\psi_-\rangle = \hat{\Pi}\hat{P}_-|\psi\rangle = -\hat{P}_-|\psi\rangle = -|\psi_-\rangle$$

Les espaces E_+ et E_- sont donc les sous-espaces propres de $\hat{\Pi}$, de valeurs propres $+1$ et -1.

En représentation $\{|r\rangle\}$, les égalités précédentes s'écrivent :
$$\langle r|\psi_+\rangle = \psi_+(r) = \langle r|\hat{\Pi}|\psi_+\rangle = \psi_+(-r)$$
$$\langle r|\psi_-\rangle = \psi_-(r) = -\langle r|\hat{\Pi}|\psi_-\rangle = -\psi_-(-r)$$

Les fonctions d'onde $\psi_+(r)$ et $\psi_-(r)$ sont respectivement paire et impaire.

Finalement, la relation $|\psi\rangle = \left(\hat{P}_+ + \hat{P}_-\right)|\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle$ montre qu'un ket $|\psi\rangle$ quelconque de E_r peut être décomposé en une somme de deux vecteurs propres de $\hat{\Pi}$, $|\psi_+\rangle$ et $|\psi_-\rangle$, appartenant respectivement aux sous-espaces pair E_+ et impair E_-. Donc, $\hat{\Pi}$ est une observable.

II. OPERATEURS PAIRS ET IMPAIRS

1-/ L'opérateur transformé d'un opérateur $\hat{B}$ quelconque s'écrit : $\hat{\hat{B}} = \hat{\Pi}\hat{B}\hat{\Pi}^\dagger = \hat{\Pi}\hat{B}\hat{\Pi}$ et vérifie la relation $\langle r|\hat{\hat{B}}|r'\rangle = \langle r|\hat{\Pi}\hat{B}\hat{\Pi}|r'\rangle = \langle -r|\hat{B}|-r'\rangle$.

L'opérateur $\hat{\hat{B}}$ est dit transformé de $\hat{B}$ par parité.

En particulier si : $\begin{cases} \hat{\hat{B}} = +\hat{B} \text{ on dit que l'opérateur } B \text{ est pair} \\ \hat{\hat{B}} = -\hat{B} \text{ on dit que l'opérateur } B \text{ est impair} \end{cases}$

Un opérateur $\hat{B}_+$ pair sera donc tel que $\hat{B}_+ = \hat{\Pi}\hat{B}_+\hat{\Pi}$, soit encore, en multipliant cette égalité à gauche par Π : $\hat{\Pi}\hat{B}_+ = \hat{B}_+\hat{\Pi} \Leftrightarrow \left[\hat{\Pi}, \hat{B}_+\right] = 0$.

Un opérateur pair est donc un opérateur qui commute avec $\hat{\Pi}$. De même, un opérateur impair B_- est un opérateur qui anticommute ($*$) avec $\hat{\Pi}$.
($*$) $\left(\left\{\hat{B}_-, \hat{\Pi}\right\} = \hat{B}_-\hat{\Pi} + \hat{\Pi}\hat{B}_- = 0\right)$

2-/ Soit $\hat{B}_+$ un opérateur pair ; calculons l'élément de matrice $\langle\phi|\hat{B}_+|\psi\rangle$; par hypothèse, nous avons :

$$\langle\phi|\hat{B}_+|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{\Pi}\hat{B}_+\hat{\Pi}|\psi\rangle = \langle\phi'|\hat{B}_+|\psi'\rangle \text{ avec } \begin{cases} |\phi'\rangle = \hat{\Pi}|\phi\rangle \\ |\psi'\rangle = \hat{\Pi}|\psi\rangle \end{cases}$$

Si l'un des deux kets $|\phi\rangle, |\psi\rangle$ est pair, et l'autre impair $\left(|\phi'\rangle = \pm|\phi\rangle, |\psi'\rangle = \mp|\psi\rangle\right)$, la relation précédente donne : $\langle\phi|\hat{B}_+|\psi\rangle = -\langle\phi|\hat{B}_+|\psi\rangle = 0$

D'où la règle :

les éléments de matrice d'un opérateur pair sont nuls entre vecteurs de parité opposée.

Si maintenant $\hat{B}_-$ est impair : $\langle\phi|\hat{B}_-|\psi\rangle = -\langle\phi'|\hat{B}_-|\psi'\rangle$ qui est nul lorsque $|\phi\rangle$ et $|\psi\rangle$ sont tous deux soit pairs, soit impairs.

D'où la règle :

Les éléments de matrice d'un opérateur impair sont nuls entre vecteurs de même parité.

En particulier, l'élément de matrice diagonal $\langle\psi|\hat{B}_-|\psi\rangle$ (valeur moyenne de $\hat{B}_-$ dans l'état $|\psi\rangle$) est nul si $|\psi\rangle$ a une parité déterminée.

Exemples des opérateurs $\hat{\vec{R}}$ et $\hat{\vec{P}}$ (position et impulsion)

• *Opérateurs* $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}$

Nous avons dans ce cas : $\hat{\Pi}\hat{X}|r\rangle = \hat{\Pi}\hat{X}|x,y,z\rangle = x\hat{\Pi}|x,y,z\rangle = x|-x,-y,-z\rangle = x|-r\rangle$

Et $\hat{X}\hat{\Pi}|r\rangle = \hat{X}|-r\rangle = \hat{X}|-x,-y,-z\rangle = -x|-x,-y,-z\rangle = -x|-r\rangle$

En faisant la somme de ces deux égalités, nous obtenons : $\left(\hat{\Pi}\hat{X} + \hat{X}\hat{\Pi}\right)|r\rangle = 0$

Soit, puisque les vecteurs $|r\rangle$ forment une base : $\hat{\Pi}X + \hat{X}\hat{\Pi} = 0 \Rightarrow \hat{X}$ est donc impair.

De même pour $\hat{Y}$ et $\hat{Z}$. $\hat{\vec{R}}$ **est donc un opérateur impair**.

• *Opérateurs* $\hat{P}_x, \hat{P}_y, \hat{P}_z$

Calculons le ket $\hat{\Pi}|p\rangle$; nous obtenons : $\hat{\Pi}\hat{I}|p\rangle = \int d^3r\hat{\Pi}|r\rangle\langle r|p\rangle$

$$\hat{\Pi}|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int d^3r\, e^{\frac{i}{\hbar}p.r}\hat{\Pi}|r\rangle$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int d^3r\, e^{\frac{i}{\hbar}p.r}|-r\rangle == \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int d^3r'\, e^{-\frac{i}{\hbar}p.r'}|r'\rangle = \int d^3r|r\rangle\langle r|-p\rangle = |-p\rangle$$

Par un raisonnement analogue à celui fait précédemment pour $\hat{X}$:

$\hat{\Pi}\hat{P}_x|p\rangle = p_x|-p\rangle$ et $P_x\hat{\Pi}|p\rangle = -p_x|-p\rangle$

$\hat{\Pi}\hat{P}_x + \hat{P}_x\hat{\Pi} = 0 \Rightarrow$ **l'opérateur $\hat{\vec{P}}$ est donc impair**.

• *Opérateur parité*

Il commute évidemment avec lui-même ; c'est donc un opérateur pair.

Remarque : Fonctions d'opérateurs

Soit $\hat{B}_+$ un opérateur pair : $\hat{\Pi}\hat{B}_+^n\hat{\Pi} = \underbrace{\left(\hat{\Pi}\hat{B}_+\hat{\Pi}\right)\left(\hat{\Pi}\hat{B}_+\hat{\Pi}\right)\cdots\left(\hat{\Pi}\hat{B}_+\hat{\Pi}\right)}_{n \text{ facteurs}} = \hat{B}_+$

Une puissance quelconque d'un opérateur pair est donc un opérateur pair. De manière plus générale, un opérateur $F\left(\hat{B}_+\right)$ est pair.

Soit $\hat{B}_-$ un opérateur pair : $\hat{\Pi}\hat{B}_-^n\hat{\Pi} = \underbrace{\left(\hat{\Pi}\hat{B}_-\hat{\Pi}\right)\left(\hat{\Pi}\hat{B}_-\hat{\Pi}\right)\cdots\left(\hat{\Pi}\hat{B}_-\hat{\Pi}\right)}_{n \text{ facteurs}} = (-1)^n\left(\hat{B}_-\right)^n$

La puissance $n$ème d'un opérateur impair est pair si n est pair, impaire si n est impair. Considérons un opérateur $F\left(\hat{B}_-\right)$; cet opérateur est donc pair si la fonction $F(z)$ correspondante est paire, impair si elle est impaire. Dans le cas général, $F\left(\hat{B}_-\right)$ n'a pas de parité définie.

3-/ Considérons une observable quelconque $\hat{B}_+$ paire et un vecteur propre $|\phi_b\rangle$ de $\hat{B}_+$, de valeur propre b. $\hat{B}_+$ étant paire, commute avec $\hat{\Pi}$:

• Si b est une valeur propre non-dégénérée, $|\phi_b\rangle$ est nécessairement vecteur propre de $\hat{\Pi}$; c'est donc un vecteur soit pair, soit impair. La valeur moyenne $\langle\phi_b|\hat{B}_-|\phi_b\rangle$ de toute observable impaire $\hat{B}_-$ (telle que $\hat{R}, \hat{P}$, etc$\cdots$) est alors nulle.

• Si b est une valeur propre dégénérée correspondant au sous-espace propre E_b, les vecteurs de E_b n'ont pas nécessairement une parité définie : il peut se faire que $\hat{\Pi}|\phi_b\rangle$ soit un vecteur non-colinéaire à $|\phi_b\rangle$; toutefois, c'est alors un vecteur de même valeur propre b. Il est de plus possible de trouver dans chaque sous-espace E_b une base de vecteurs propres communs à $\hat{\Pi}$ et à $\hat{B}_+$

4-/ Soit le Hamiltonien $\hat{H} = \dfrac{\hat{P}^2}{2m} + V\left(\hat{R}\right)$, tel que la fonction $V\left(r\right)$ soit paire $\left(V\left(\vec{r}\right) = V\left(-\vec{r}\right)\right)$.

- L'opérateur $\hat{\vec{P}}$ étant impair, l'opérateur $\hat{P}^2$ est pair ; l'opérateur $\hat{H}$ est donc pair. D'après ce que nous venons de voir, il est alors possible de chercher les états propres de $\hat{H}$ parmi les états pairs ou impairs, ce qui simplifie souvent considérablement les calculs.

$\hat{H}$ étant pair, si l'on a trouvé un de ses état propres $\left|\phi_k\right\rangle$ qui n'ait pas de parité définie ($\hat{\Pi}\left|\phi_k\right\rangle$ non colinéaire à $\left|\phi_k\right\rangle$), on peut affirmer que la valeur propre correspondante est dégénérée : en effet, comme $\hat{\Pi}$ commute avec $\hat{H}$, $\hat{\Pi}\left|\phi_k\right\rangle$ est vecteur propre de $\hat{H}$ avec la même valeur propre que $\left|\phi_k\right\rangle$.

- Systèmes physiques où cette situation se présente : puits carré, puits infini, oscillateur harmonique, atome d'hydrogène etc $\cdots$