Exercice 1 *Généralités sur l'opérateur parité*

1. Nous avons
$$\Pi^2|\mathbf{r}\rangle = \Pi|-\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle$$
donc Π^2 agit comme l'opérateur identité sur les vecteurs $|\mathbf{r}\rangle$ et comme ceux ci forment une base de l'espace de Hilbert, nous avons $\Pi^2 = \mathbf{1}$.

2. Nous voulons montrer que pour tout couple $(|\mathbf{r}\rangle, |\mathbf{r}'\rangle)$ de vecteurs de base, nous avons $\langle\mathbf{r}'|\Pi^\dagger\Pi|\mathbf{r}\rangle = \langle\mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$.
$$\langle\mathbf{r}'|\Pi^\dagger\Pi|\mathbf{r}\rangle = \langle\mathbf{r}'|\Pi^\dagger|-\mathbf{r}\rangle = (\langle-\mathbf{r}|\Pi|\mathbf{r}'\rangle)^* = (\langle-\mathbf{r}|-\mathbf{r}'\rangle)^* = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$
Π est donc unitaire. Par conséquent, pour tout élément de la base $|\mathbf{r}\rangle$,
$$\Pi^\dagger\Pi|\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle,$$
mais
$$\Pi^\dagger\Pi|\mathbf{r}\rangle = \Pi^\dagger|-\mathbf{r}\rangle,$$
d'où
$$\Pi^\dagger|-\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle = \Pi|-\mathbf{r}\rangle$$
Ainsi $\Pi^\dagger = \Pi$ et Π est hermitien. Comme les valeurs propres d'un opérateur unitaire sont de norme 1 et comme les valeurs propres d'un opérateur hermitien sont réelles, les seules valeurs propres possibles pour Π sont $\lambda = \pm 1$. D'une autre manière, l'identité $\Pi^2 = \mathbb{1}$ montre que les valeurs propres de l'opérateur Π^2, égales à λ^2, sont toutes égales à 1, ce qui permet de retrouver $\lambda = \pm 1$.

3. Pour tout $|\mathbf{r}\rangle$,
$$\Pi^\dagger\mathbf{R}\Pi|\mathbf{r}\rangle = \Pi\mathbf{R}\Pi|\mathbf{r}\rangle = \Pi\mathbf{R}|-\mathbf{r}\rangle = \Pi(-\mathbf{r})|-\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{r}\,\Pi|-\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle = -\mathbf{R}|\mathbf{r}\rangle$$
Autrement dit
$$\Pi\mathbf{R}\Pi = -\mathbf{R}, \quad \mathbf{R}\Pi = -\Pi\mathbf{R}$$
donc Π anticommute avec $\mathbf{R}$. Pour $[R_\alpha, \Pi P_\beta \Pi]$, l'idée est de faire apparaître le commutateur de R_α et P_β. Pour cela, on utilise l'identité $\Pi^2 = \mathbb{1}$.
$$\begin{aligned}
[R_\alpha, \Pi P_\beta \Pi] &= R_\alpha \Pi P_\beta \Pi - \Pi P_\beta \Pi R_\alpha \\
&= -\Pi R_\alpha P_\beta \Pi + \Pi P_\beta R_\alpha \Pi \\
&= -\Pi[R_\alpha, P_\beta]\Pi = -\Pi(i\hbar\delta_{\alpha\beta})\Pi = -i\hbar\delta_{\alpha\beta}\Pi^2 \\
&= -i\hbar\delta_{\alpha\beta}
\end{aligned}$$
Comme $[R_\alpha, P_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$, la relation ci-dessus montre que l'opérateur $\mathbf{P} + \Pi\mathbf{P}\Pi$ commute avec $\mathbf{R}$. On en déduit que
$$\Pi\mathbf{P}\Pi = -\mathbf{P}$$

4. Pour la composante L^z (le calcul est le même pour les autres composantes du moment cinétique)
$$\begin{array}{rcl}\Pi L^z \Pi & = & \Pi(XP_y - YP_x)\Pi \\ & = & \Pi X \Pi^2 P_y \Pi - \Pi P_x \Pi^2 Y \Pi \\ & = & (-X)(-P_y) - (-P_x)(-Y) = L^z\end{array}$$
Par conséquent, nous avons $\Pi \mathbf{L} \Pi = \mathbf{L}$, et donc $[\Pi, \mathbf{L}] = 0$.

5. Puisque Π commute avec $\mathbf{L}$, il commute avec les trois opérateurs L^x, L^y et L^z et par conséquent, $[\Pi, L^+] = [\Pi, L^-] = 0$. Ainsi
$$\Pi\ L^-\ |\ell, m\rangle = L^-\ \Pi\ |\ell, m\rangle$$
$$\Rightarrow\quad \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}\ \Pi\ |\ell, m-1\rangle = \pi_{\ell,m}\ L^-\ |\ell, m\rangle$$
$$\Rightarrow\quad \pi_{\ell,m-1}\ \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}\ |\ell, m-1\rangle = \pi_{\ell,m}\ \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m-1)}\ |\ell, m-1\rangle$$
Par conséquent, $\pi_{\ell,m-1} = \pi_{\ell,m}$ pour tout m avec $-\ell < m \leq \ell$. Par récurrence, on en déduit qu'à ℓ fixé, $\pi_{\ell,m}$ est le même pour tout m. On peut donc noter cette valeur propre π_ℓ.

6. Nous avons
$$\begin{array}{rcl}\Pi\ Z\ |\ell, m\rangle & = & \Pi\ \sum_{\ell',m'}\ |\ell', m'\rangle\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle \\ & = & \sum_{\ell',m'} \Pi\ |\ell', m'\rangle\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle \\ & = & \sum_{\ell',m'} \pi_{\ell'}|\ell', m'\rangle\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle\end{array}$$
D'un autre côté, nous avons $\Pi\ Z = -Z\ \Pi$ (parce que $\Pi\mathbf{R} = -\mathbf{R}\Pi$), et par conséquent
$$\begin{array}{rcl}\Pi\ Z\ |\ell, m\rangle & = & -Z\ \Pi\ |\ell, m\rangle = -\pi_\ell\ Z\ |\ell, m\rangle \\ & = & -\pi_\ell \displaystyle\sum_{\ell',m'} |\ell', m'\rangle\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle \\ & = & -\displaystyle\sum_{\ell',m'} |\ell', m'\rangle\pi_\ell\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle\ .\end{array}$$
La décomposition d'un vecteur dans une base étant unique, nous avons pour tout couple (ℓ', m')
$$\pi_{\ell'}\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle = -\pi_\ell\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle$$
En particulier, si nous prenons $\ell' = \ell$, nous avons
$$\pi_\ell\ \langle\ell, m'|Z|\ell, m\rangle = -\pi_\ell\ \langle\ell, m'|Z|\ell, m\rangle,$$
et comme d'après la question 2, π_ℓ est non nul, nous devons avoir $\langle\ell, m'|Z|\ell, m\rangle = 0$.

7. Si $\langle\ell \pm 1, m'|Z|\ell, m\rangle \neq 0$ nous pouvons simplifier dans l'expression ci-dessus. Il vient
$$\pi_{\ell\pm1} = -\pi_\ell$$
Par récurrence, on trouve alors que $\pi_\ell = (-1)^\ell \pi_{\ell=0}$.

8. Si ℓ' et ℓ sont tous les deux pairs ou tous les deux impairs, nous avons $\pi_{\ell'} = (-1)^{\ell'}\pi_0 = (-1)^\ell\pi_0 = \pi_\ell$. Comme $\pi_{\ell'}\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle = -\pi_\ell\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle$, il vient que $\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle = -\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle$, donc $\langle\ell', m'|Z|\ell, m\rangle = 0$.

Exercice 2 *Le tour de* Π

1. L'hamiltonien d'une particule dans un potentiel central s'écrit

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(R)$$

Comme d'après l'exercice précédent $\mathbf{P}$ anticommute avec Π, alors P^2 commute avec Π. En effet, pour $\alpha \in \{x, y, z\}$, nous avons

$$\begin{array}{rcl} [P_\alpha^2, \Pi] & = & P_\alpha^2 \Pi - \Pi P_\alpha^2 \\ & = & P_\alpha(-\Pi P_\alpha) - \Pi P_\alpha^2 \\ & = & \Pi(-P_\alpha)(-P_\alpha) - \Pi P_\alpha^2 \\ & = & \Pi P_\alpha^2 - \Pi P_\alpha^2 \\ & = & 0 \end{array}$$

Par conséquent, $[P^2, \Pi] = 0$. De la même façon, on obtient $[X^2, \Pi] = [Y^2, \Pi] = [Z^2, \Pi] = 0$. Ainsi toutes les puissances paires de X, Y et Z commutent avec Π. On a donc $[V(R), \Pi] = 0$. En effet, le développement en série de $R = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}$ ne fait intervenir que des puissances paires de X, Y et Z. Au final, on a bien

$$[H, \Pi] = [\frac{P^2}{2m}, \Pi] + [V(R), \Pi] = 0$$

Ainsi, la parité est une quantité conservée et il est possible de classer les vecteurs propres de H par parité.

2. L'hamiltonien de l'atome d'hydrogène avec couplage spin-orbite s'écrit:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) + f(r)\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \tag{1}$$

On a vu au point précédent que le début de l'hamiltonien commute avec Π. On a vu dans l'exercice 1 que chaque composante de $\mathbf{L}$ commutait également. Cette année, $\mathbf{S}$ est considéré comme un moment cinétique standard, et donc satisfait aux mêmes propriétés. Cet Hamiltonien commute donc avec l'opérateur parité.

3. Puisque $\mathbf{L}$ commute et $\mathbf{p}$ anticommute avec Π, le produit anti-commute. Donc cet hamiltonien ne commute pas avec Π.

4. On se place dans le cas d'un hamiltonien H qui commute avec l'opérateur parité. On considère un état propre $|\psi\rangle$ de H non-dégénéré.

   Puisque H commute avec Π, alors $|\psi\rangle$ est aussi un état-propre de Π avec parité ± 1.

   On se place maintenant dans le cas d'un sous-espace propre de H, de dimension $n > 1$, avec états-propres dégénérés $|\varphi_1\rangle, \cdots, |\varphi_n\rangle$ de même énergie E.

   Puisque H commute avec Π, il existe une base dans laquelle Π est diagonale, *i.e.* dans laquelle chaque état a une parité de ± 1. Notons $|\varphi_+\rangle$ et $|\varphi_-\rangle$ deux états propres de Π tels que

$$\Pi|\varphi_+\rangle = |\varphi_+\rangle, \quad \Pi|\varphi_-\rangle = -|\varphi_-\rangle.$$

La combinaison linéaire de ces deux états n'est plus un état propre de Π, mais reste, bien sûr un état propre de H. On voit donc bien la nécéssité de la non-dégénérescence d'un état pour être sûr de sa parité.

Exercice 3 *Gammes d'anti-unitarité*

Rappelons les notions suivantes:

- Un opérateur unitaire U vérifie $UU^\dagger = \mathbb{1}$.
- Un opérateur unitaire et linéaire U satisfait $\langle U\chi|U\psi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle^*$
- Un opérateur unitaire et anti-linéaire (donc anti-unitaire) Θ satisfait $\langle\Theta\chi|\Theta\psi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle$
- Finalement, l'adjoint d'un opérateur anti-unitaire est défini par $\langle\Theta^\dagger\psi|\chi\rangle = \langle\Theta\chi|\psi\rangle$

On peut aussi dire, comme dans les notes de cours et dans l'énoncé de cet exercice, que la définition de anti-unitarité correspond à : $\{$anti-linéarité + $\langle\Theta\chi|\Theta\psi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle\}$. Dans ce cas, on en déduit que un opérateur anti-unitaire satisfait $\Theta\Theta^\dagger = \mathbb{1}$.

En effet, on a

$$\begin{aligned}\langle\psi|\chi\rangle &= \langle\Theta\chi|\Theta\psi\rangle \\ \langle\psi|\chi\rangle &= \langle\Theta^\dagger\Theta\psi|\chi\rangle\end{aligned}$$

où l'on a utilisé la définition de l'adjoint d'un opérateur anti-linéaire. On en déduit donc que $\Theta\Theta^\dagger = \mathbb{1}$.