2. Postulates on quantum mechanics

Vaughan Sohn

October 5, 2024

Contents

Introduction

- 양자역학은 미시세계의 물리학을 다루는 학문이다.
- 양자역학을 다루기 위해서는 물리학적 개념을 우리에게 익숙한 언어인 "수학"으로 표기할 필요가 있다.
- 양자역학의 공준(postulate)은 다음 4가지 개념을 수학적으로 어떻게 정의할 것인지를 언급한다.
  - state
  - dynamics
  - measurement
  - composite system

State

Postulate 1

Associated to any closed physical system is a complex vector space with inner product (i.e., *Hilbert space*) known as the state space of the system. The system is completely described by its state vector, which is a unit vector in the system's state space.

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

- 계의 상태를 기술하기 위하여 state vector를 사용한다. (unit vector)
- 가능한 모든 상태들의 집합; 상태공간은 Hilbert space이다.
- 상태 벡터를 사용하면 계를 **완전히** 기술할 수 있다.
- (qubit) $\mathcal{H}_2$의 basis가 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$일 때, state vector는 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$$

where $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

Dynamics

Dynamics: unitary operator

Postulate 2

The evolution of a closed quantum system is described by a **unitary transformation**. That is, the state $|\psi\rangle$ of the system at time t is related to the state $|\psi'\rangle$ of the system at time t_0 by a unitary operator U which depends *only* on the times t_0 and t,

$$|\psi'\rangle = U\,|\psi\rangle\,.$$

Postulate 2'

The time evolution of the state of a closed quantum system is described by the *Schrödinger equation*, $(*)$

$$i\hbar \frac{d\,|\psi(t)\rangle}{dt} = \mathbf{H}\,|\psi(t)\rangle\,.$$

where $\mathbf{H}$ is Hamiltonian operator.

- Unitary operator는 특정한 discrete time t_0, t에 대한 dynamics를 나타내지만, Schrödinger equation은 continuous time에 대한 변화를 표현한다.
- Hamiltonian은 계의 "에너지"에 대한 operator이다. 즉, quantum state의 에너지를 Hamiltonian operator로 변환하여 state의 evolution을 이끌어낼 수 있다.

- Pauli operator:
  Pauli operator를 spectral decomposition해서 표현하면 다음과 같다.
  - (bit flip) $X = |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| \, (= |0\rangle\langle1| + |1\rangle\langle0|)$
  - (phase flip) $Z = |0\rangle\langle0| - |1\rangle\langle1|$
  - $Y = |i\rangle\langle i| - |-i\rangle\langle -i|$

- Hadamard gate:
  basis state $|0\rangle, |1\rangle$와 superposition state $|+\rangle, |-\rangle$를 서로 변환한다.

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Measurement

Measurement: linear operator

Postulate 3

Quantum measurement is described by set of measurement operators $\{M_m\}$ where $\sum_m M_m^\dagger M_m = I$ (completeness relation).
The *probability* of getting outcome m is given by

$$p(m) = \langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle\,,$$

and the *post-measurement state* is given by

$$\frac{M_m\,|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle}} = \frac{M_m\,|\psi\rangle}{\sqrt{p(m)}}.$$

- 계에서 어떤 일이 일어났는지를 확인하기 위해서는 "관측"을 해야하며, 관측을 하게되는 순간 외부와 상호작용을 하게되므로 그 계는 더 이상 닫힌계가 아니다.
- measurement operator가 *completeness equation*을 만족시키기 때문에 각 outcome 들의 확률의 합은 1이다. $(*)$
- Example: $|\psi\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle$ 일 때, $p(0), p(1)$은?

Projective measurements

Definition 1 (projective measurement)

Projective measurement is described by set of projector $\{P_m\}$. We first define *observable* M, a Hermitian operator on the state space of the system being observed. M has a spectral decomposition

$$M = \sum_m m P_m = \sum_m m \left| m \right\rangle \left\langle m \right| ,$$

where P_m is the projector onto the eigenspace of M with eigenvalue m.

- 일반적인 관측에서는 operator M_m이 completeness relation을 만족하기만 하면되지만, projective measurement에서는 M_m이 Hermitian이고 $M_m M_{m'} = \delta_{m,m'} M_m$라는 조건을 만족해야하는 특수한 경우를 다룬다.
- The *probability* of getting outcome m is given by (ast)

$$p(m) = \left\langle \psi | P_m | \psi \right\rangle ,$$

- and the *post-measurement state* is given by

$$\frac{P_m \left| \psi \right\rangle}{\sqrt{\left\langle \psi | P_m | \psi \right\rangle}} = \frac{P_m \left| \psi \right\rangle}{\sqrt{p(m)}} .$$

POVM measurements

Definition 2 (POVM measurement)

Suppose a measurement described by measurement operators M_m is performed upon a quantum system in the state $|\psi\rangle$. Then the probability of outcome m is given by $p(m) = \langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle$. Suppose we define

$$E_m \triangleq M_m^\dagger M_m$$

as positive operator. then probability can be simply described by $p(m) = \langle\psi|E_m|\psi\rangle$. The operators E_m are known as the **POVM elements** associated with the measurement. The complete set $\{E_m\}$ is known as a **POVM**.

- POVM formalism을 사용하면, 계를 측정할 때의 확률을 분석하기 적합하다.
- POVM은 completeness relation을 만족한다.

$$\sum_m E_m = I$$

Examples

- Example 1: 다음의 measurement operator $\{M_i\}$를 사용하여 $|0\rangle$을 측정할 때, 각 outcome의 확률을 계산하라.

$$M_1 = \frac{|0\rangle\langle 0|}{\sqrt{2}}, \quad M_2 = \frac{|1\rangle\langle 1|}{\sqrt{2}}, \quad M_3 = \frac{|+\rangle\langle +|}{\sqrt{2}}, \quad M_4 = \frac{|-\rangle\langle -|}{\sqrt{2}}$$

- Example 2: $\{|0\rangle\langle 0|, |1\rangle\langle 1|\}$을 사용하여 $|+\rangle$을 측정할 때, 확률을 계산하라.

- Example 3: $\{|+\rangle\langle +|, |-\rangle\langle -|\}$을 사용하여 $|+\rangle$을 측정할 때, 확률을 계산하라.

Distinguishing qunatum states: orthogonal states

Theorem 3

If the states $|\psi_i\rangle$ are orthonormal then we can prove that there always exists a quantum measurement capable of distinguishing the states.

∗ Proof:

- 서로 수직인 두 상태를 가정하자. $\langle\psi|\psi^\perp\rangle = 0$
- 두 상태를 구분하기 위해서 다음과 같이 POVM을 가정하자.

$$E_1 = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad E_2 = |\psi^\perp\rangle\langle\psi^\perp|, \quad E_3 = I - (E_1 + E_2)$$

- 그럼 각 상태에 대해, 가능한 모든 outcome m의 확률은 다음과 같다.
  $\Rightarrow$

따라서 서로 수직인 두 상태는 측정을 통해 두 상태를 완벽하게 구분할 수 있다.□

Distinguishing qunatum states: non-orthogonal states

Theorem 4

If the states $|\psi_i\rangle$ are not orthonormal then we can prove that there is no quantum measurement capable of distinguishing the states.

$*$ Proof:

- 서로 수직이 아닌 두 상태를 가정하자. $\langle\psi|\psi'\rangle \neq 0$
- 하나의 상태를 다음과 같이 linear combination으로 나타낼 수 있다. $(a \neq 0, b \neq 1)$

$$|\psi'\rangle = a\,|\psi\rangle + b\,|\psi^{\perp}\rangle \tag{1}$$

- (귀류법) 두 상태를 완벽하게 구분할 수 있는 POVM이 존재한다고 가정하자.

$$E_1 = M_1^{\dagger} M_1, \quad E_2 = M_2^{\dagger} M_2, \quad I = E_1 + E_2$$

- 두 상태를 완벽하게 구분할 수 있으려면 각 상태가 서로 다른 outcome에 대해 deterministic하게 동작해야한다.

$$\langle\psi|E_1|\psi\rangle = 1, \quad \langle\psi'|E_2|\psi'\rangle = 1 \tag{2}$$

- Eq 1, 2를 이용하여 식을 전개해나가면 모순을 찾을 수 있다.

Distinguishing qunatum states: non-orthogonal states

∗ Proof (contd.):

$$\langle\psi|I|\psi\rangle =$$

$$\sqrt{E_2}\,|\psi'\rangle =$$

$$\langle\psi^\perp|I|\psi^\perp\rangle =$$

$$\langle\psi'|E_2|\psi'\rangle =$$

$$1 \leq |b|^2 < 1$$

따라서 서로 수직이 아닌 두 상태를 측정을 통해 완벽하게 구분할 수는 없다.□ (단, partially distinguishing은 가능하다.)

Phase

Global phase:

- $\left|\psi\right\rangle, e^{i\theta}\left|\psi\right\rangle$라는 두 상태에 대해서는 어떤 measurement M_i에 대해서도 확률이 동일하다.
  * Proof:
    - $p(i)_{\left|\psi\right\rangle} = \langle\psi|M_i^\dagger M_i|\psi\rangle$
    - $p(i)_{\left|e^{i\theta}\psi\right\rangle} = \langle\psi|e^{i\theta}M_i^\dagger M_i e^{-i\theta}|\psi\rangle = \langle\psi|M_i^\dagger M_i|\psi\rangle$
- 즉, global phase가 곱해지더라도 두 상태는 physically 동일하다.

Relative phase:

- 반면 linear combination의 일부항에만 phase가 곱해지는 relative phase는 구분된다.
- example:
  - $\left|\psi_1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left|0\right\rangle + \left|1\right\rangle) = \left|+\right\rangle$
  - $\left|\psi_2\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left|0\right\rangle - \left|1\right\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\left|0\right\rangle + (e^{i\pi})\left|1\right\rangle) = \left|-\right\rangle$

Composite system

Composite system: tensor product

Postulate 4

The state space of a composite physical system is the tensor product of the state spaces of the component physical systems. Moreover, if we have systems numbered 1 through n, and system number i is prepared in the state $|\psi_i\rangle$, then the joint state of the total system is

$$|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle .$$

- 2개 이상의 더 많은 계를 한번에 표기할 때는, 복합계를 이루는 각각의 component system에 대한 tensor product를 사용한다.
- 각 component system의 state들의 tensor product로 나타낼 수 있는 상태를 product state라고 하며, product state로 표현할 수 없는 composite system만이 가지는 상태를 entangled state라고 한다.

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

Dynamics in Composite system

- $Q \otimes M$ 복합계에 작용하는 unitary U를 다음과 같이 가정하자.

$$U|\psi\rangle|0\rangle = \sum_m M_m|\psi\rangle|m\rangle$$

$\{M_h\}$, $\{M_m\}$은 각 component system의 measurement operator이다.

- U는 다음과 같이 임의의 state $|\psi\rangle|0\rangle, |\varphi\rangle|0\rangle$에 대한 내적을 보존한다.

$$\begin{aligned}
(\langle\varphi|\langle 0|U^\dagger)(U|\psi|0\rangle\rangle) &= \sum_{mm'} \langle\varphi|\langle m|M_m^\dagger M_{m'}|\psi\rangle|m'\rangle \\
&= \sum_{mm'} \langle\varphi|M_m^\dagger M_{m'}|\psi\rangle \underbrace{\langle m|m'\rangle}_{\delta_{mm'}} \\
&= \langle\varphi|\Sigma_m M_m^\dagger M_m|\psi\rangle \\
&= \langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\underbrace{\langle 0|0\rangle}_{1}|\psi\rangle
\end{aligned}$$

Measurement in Composite system

- 다음과 같은 projective measurement를 사용하면,

$$P_m = I_a \otimes |m\rangle \langle m| \, (= I_a \otimes P_{b,m})$$

- $U|\psi\rangle|0\rangle$ 상태에 대해 outcome m의 확률은 다음과 같고

$$\begin{aligned} p(m) &= \langle\psi|\langle 0|U^\dagger P_m U|\psi\rangle|0\rangle \\ &= \sum_{m'm''} \langle\psi|\langle m'|\, M_{m'}^\dagger |(I_a \otimes |m\rangle\langle m|) M_{m''} |m''\rangle |\psi\rangle\rangle \\ &= \sum_{m'm''} \langle\psi|I_a\rangle \langle m'|m\rangle\, M_{m'}^\dagger M_{m''} \langle m|m''\rangle \langle I_a|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle\,. \end{aligned}$$

- 측정 후 상태는 다음과 같이 변한다.

$$\frac{P_m U|\psi\rangle|0\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\langle 0|U^\dagger P_m U|\psi\rangle|0\rangle}} = \frac{M_m|\psi\rangle|m\rangle}{\sqrt{\langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle}} = \frac{M_m|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|M_m^\dagger M_m|\psi\rangle}}.$$

$\Rightarrow$ 즉, identity matrix I와 component system에만 작용하는 measurement operator $|m\rangle\langle m|$의 tensor product로 정의되는 operator는 composite system에 작용하지만, component system에 작용하는 측정과 동일하다.

Density matrix

Density matrix

Definition 5 (density matrix)

The density operator for the system is defined by the equation

$$\rho \triangleq \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| .$$

Theorem 6

An operator is the density matrix of $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$*iff, tr*$[\rho] = 1$ *and* $\rho \geq 0$*.*

- Density matrix는 system이 deterministic하게 알려지지 않았을 때, system을 표현하기에 좋은 방법을 제공한다.
- Density matrix를 이루는 각 $|\psi_i\rangle$는 system이 가질 수 있는 state vector들을 의미하며 system이 실제로 그 state vector일 확률이 계수 p_i로 주어진다.
- If tr$[\rho^2] = 1$, *pure state*.
- If tr$[\rho^2] < 1$, *mixed state*, and $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ called as ensemble of pure states.

Rewrite postulates via density matrix

Postulate 1

Associated to any closed physical system is a *Hilbert space* known as the state space of the system. The system is completely described by **density matrix.**

$$\rho = \sum_i p_i \left| p_i \right\rangle \left\langle p_i \right|, \quad \left| \psi \right\rangle \in \mathcal{H}$$

Postulate 2

The evolution of a closed quantum system is described by a **unitary transformation**

$$\rho' = U \rho U^\dagger$$

- Density matrix의 evolution은 density matrix를 이루고 있는 각각의 state vector를 unitary operator로 evolution한 결과로 정의할 수 있다.

$$\rho \quad \longrightarrow \quad \sum_i p_i U \left| \psi_i \right\rangle \left\langle \psi_i \right| U^\dagger = U(\Sigma_i \rho_i \left| \psi_i \right\rangle \left\langle \psi_i \right|) U^\dagger = \boxed{U \rho U^\dagger}$$

Rewrite postulates via density matrix

- mixed state를 이루는 여러 pure state중에서 만약 그 system이 $|\psi_i\rangle$ 상태라면, measurement outcome이 m일 조건부 확률은 다음과 같다.

$$p(m|i) = \langle\psi_i|M_m^\dagger M_m|\psi_i\rangle = \mathrm{tr}[M_m^\dagger M_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i|]$$

- 따라서 marginalization을 이용하면, outcome이 m일 확률은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} p(m) &= \sum_i p(m|i) \cdot p_i \\ &= \sum_i \mathrm{tr}[M_m^\dagger M_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i|] \cdot p_i \\ &= \boxed{\mathrm{tr}[M_m^\dagger M_m \cdot \rho]} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

Rewrite postulates via density matrix

- outcome이 m일 때, 계의 측정 전 상태가 mixed state를 이루는 state 중에서 $|\psi_i\rangle$였을 확률은 Bayes theorem에 의해 다음과 같다.

$$p(i|m) = \frac{p(m|i) \cdot p_i}{p(m)}$$

- 따라서 측정 후, 변화한 pure state들에 대한 density matrix는 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
\rho' &= \sum_i p(i|m) |\psi_i'\rangle \langle\psi_i'| \\
&= \sum_i \frac{p(m|i) \cdot p_i}{p(m|i)} \left(\frac{M_m |\psi_i\rangle}{\sqrt{p(m|i)}}\right) \left(\frac{M_m |\psi_i\rangle}{\sqrt{p(m)}}\right)^\dagger \\
&= \sum_i \frac{p(m|i) \cdot p_i}{p(m)} \frac{M_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| M_m^\dagger}{p(m|i)} \\
&= \sum_i \frac{p_i (M_m |\psi_i\rangle \langle\psi_i| M_m^\dagger)}{\mathrm{tr}[M_m^\dagger M_m \cdot \rho]} \\
&= \boxed{\frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\mathrm{tr}[M_m^\dagger M_m \cdot \rho]}}
\end{aligned}$$

Rewrite postulates via density matrix

Postulate 3

Quantum measurement is described by set of measurement operators $\{M_m\}$ where $\sum_m M_m^\dagger M_m = I$ (completeness relation).
The *probability* of getting outcome m is given by

$$p(m) = \mathrm{tr}[M_m^\dagger M_m \cdot \rho]$$

and the *post-measurement state* is given by

$$\frac{M_m \rho M_m^\dagger}{\mathrm{tr}[M_m^\dagger M_m \cdot \rho]}.$$

Postulate 4

The state space of a composite physical system is the tensor product of the state spaces of the component physical systems. The **joint density matrix** is

$$\rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \cdots \otimes \rho_n.$$

Property of density matrix

Theorem 7 (Unitary freedom in the ensemble for density matrices)

The sets $|\tilde{\psi}_i\rangle, |\tilde{\varphi}_j\rangle$ *generate the* **same** *density matrix if and only if*

$$|\tilde{\psi}_i\rangle = \sum_j u_{ij} |\tilde{\varphi}_j\rangle$$

where u_{ij} *is a unitary matrix of complex numbers, with indices* i *and* j*,*

✓meaning:

- 다음과 같은 density matrix가 있을 때,

$$\rho = \frac{3}{4}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{4}|1\rangle\langle 1|$$

- ensemble of pure states $\{|a\rangle, |b\rangle\}$로도 동일한 density matrix를 만들 수 있다.

$$\rho = \frac{1}{2}|a\rangle\langle a| + \frac{1}{2}|b\rangle\langle b|$$

  whrere
  - $|a\rangle = \sqrt{3/4}|0\rangle + \sqrt{1/4}|1\rangle$
  - $|b\rangle = \sqrt{3/4}|0\rangle + \sqrt{1/4}|1\rangle$

Reduced density matrix

Definition 8 (reduced density matrix)

Suppose, we have physical systems A and B, whose state is described by a density operator ρ^{AB}. The reduced density operator for system A is defined by

$$\rho^A \triangleq \mathrm{tr}_B[\rho^{AB}]$$

- tr_B는 partial trace를 의미한다. 아랫첨자 system에 대해서만 trace를 계산한다.

$$\begin{aligned} &\mathrm{tr}_B\left(|a_1\rangle\langle a_2| \otimes |b_1\rangle\langle b_2|\right) \\ &= |a_1\rangle\langle a_2|\,\mathrm{tr}_B[|b_1\rangle\langle b_2|] = |a_1\rangle\langle a_2|\,\langle b_2|b_1\rangle \end{aligned}$$

- Example: Bell state에 대해 partial density operator ρ^A를 계산하라.

$$|\psi^{AB}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|11\rangle$$

$\Rightarrow$

Schmidt decomposition

Schmidt decomposition

Theorem 9 (Schmidt decomposition)

Suppose $|\psi\rangle$ *is a pure state of a composite system,* AB*. Then there exist orthonormal states* $|i_A\rangle$ *for system* A*, and orthonormal states* $|i_B\rangle$ *of system* B *such that*

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |i_A\rangle |i_B\rangle ,$$

where λ_i *are non-negative real numbers satisfying* $\sum_i \lambda_i^2 = 1$*.*

- Schmidt decomposition을 이용하면 reduced density matrix를 다르게 쓸 수 있다.($*$)

$$\rho^A = \sum_i \lambda_i^2 |i_A\rangle \langle i_A| , \qquad \rho^B = \sum_i \lambda_i^2 |i_B\rangle \langle i_B|$$

- 이를 이용하면 $|\psi^{AB}\rangle$가 product state인지, entangled state인지에 따라서 reduced density matrix가 mixed state인지 pure state인지를 결정할 수 있다.
  - If composite system is product state, then each component system is pure state.
  - If composite system is entangled state, then each component system is mixed state.
- Example:

Purification

Theorem 10 (purification)

Suppose we are given a state ρ^A of a quantum system A. It is possible to introduce another system, which we denote R, and define a pure state $|AR\rangle$ for the joint system $A \otimes R$ such that

$$\rho^A = tr_R(|AR\rangle\langle AR|).$$

That is, the pure state $|AR\rangle$ reduces to ρ^A when we look at system A alone

✓meaning: Mixed state ρ^A를 pure state인 $|AR\rangle$으로 나타내는 방법을 소개한다.

∗ Proof:

- Pure state $|AR\rangle$을 다음과 같이 정의하자.

$$|AR\rangle = \sum_i \sqrt{p_i}\, |i_A\rangle\, |i_R\rangle$$

- 이를 대입하여 전개한 결과가 ρ^A와 동일함을 보이면 된다.

$$\mathrm{tr}_R(|AR\rangle\langle AR|) =$$

References

- M. A. Nielson and I. L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information
- Lecture notes for QU511: Quantum Computing (Fall 2024)