

2. Postulates on quantum mechanics

Vaughan Sohn

October 5, 2024

State

Dynamics

Measurement

Composite system

Density matrix

Schmidt decomposition

- 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

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, t 에 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) $X = |+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| (= |0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|)$
 - (phase flip) $Z = |0\rangle\langle 0| - |1\rangle\langle 1|$
 - $Y = |i\rangle\langle i| - |-i\rangle\langle -i|$
- 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

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 outcome들의 확률의 합은 1이다. (*)
- Example: $|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle$ 일 때, $p(0), p(1)$ 은?

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

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

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

- 일반적인 관측에서는 operator M_m 이 completeness relation을 만족하기만 하면되지만, projective measurement에서는 M_m 이 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*)

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

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

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

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.

$$\sum_m E_m = I$$

- 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.

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 m 의 확률은 다음과 같다.
 \Rightarrow

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

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. ($a \neq 0, b \neq 1$)

$$|\psi'\rangle = a|\psi\rangle + b|\psi^\perp\rangle \quad (1)$$

- (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.

$$\langle\psi|E_1|\psi\rangle = 1, \quad \langle\psi'|E_2|\psi'\rangle = 1 \quad (2)$$

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

Distinguishing quantum 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.)

Global phase:

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

Relative phase:

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

Composite system

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 state**라고 한다.

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

- $Q \otimes M$ 복합계에 작용하는 unitary U 를 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.

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

$$\begin{aligned} (\langle\varphi| \langle 0| U^\dagger)(U |\psi| 0\rangle) &= \sum_{mm'} \langle\varphi| \langle m| M_m^\dagger M_{m'} |\psi\rangle |m'\rangle \\ &= \sum_{mm'} \langle\varphi| M_m^\dagger M_{m'} |\psi\rangle \underbrace{\langle m|m'\rangle}_{\delta_{mm'}} \\ &= \langle\varphi| \Sigma_m M_m^\dagger M_m |\psi\rangle \\ &= \langle\varphi|\psi\rangle = \underbrace{\langle\varphi| \langle 0| 0\rangle}_1 |\psi\rangle \end{aligned}$$

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 m 의 확률은 다음과 같고

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

- 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 I 와 component system에만 작용하는 measurement operator $|m\rangle \langle m|$ 의 tensor product는 composite system에 작용하지만, component system에 작용하는 연산과 동일하다.

Density matrix

Rewrite postulates via density matrix

Schmidt decomposition

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