

Contents

引言：从微观散射到宏观电阻	1
part1: S 矩阵 (scattering matrix)	1
1.1 模式 (Modes)	1
1.2 S 矩阵的结构(从通道到通道)(直接给出: S 矩阵为么正矩阵, 论证: 输入等于输出) .	2
1.2.1 基本定义与物理意义	2
1.2.2 结构与行列意义	2

引言：从微观散射到宏观电阻

整个理论体系的出发点是一个看似简单的问题：“当一个电子（波）遇到一个复杂的散射区域（如一个分子、一个纳米器件）时，会发生什么？” S 矩阵是回答这个问题的最底层、最精细的语言。然后，我们通过一系列巧妙的“粗粒化”或“平均化”处理，将这个微观图像（S 矩阵）与实验上可直接测量的宏观物理量——电导（G 矩阵）和电阻——完美地联系起来。最后，我们将看到，这个强大的理论框架如何揭示出拓扑物态这种奇异量子现象的独特“输运指纹”。

part1: S 矩阵 (scattering matrix)

$$S = \begin{pmatrix} S_{00} & S_{01} & S_{02} & S_{03} & S_{04} & S_{05} \\ S_{10} & S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} \\ S_{20} & S_{21} & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} \\ S_{30} & S_{31} & S_{32} & S_{33} & S_{34} & S_{35} \\ S_{40} & S_{41} & S_{42} & S_{43} & S_{44} & S_{45} \\ S_{50} & S_{51} & S_{52} & S_{53} & S_{54} & S_{55} \end{pmatrix}$$

- 元素 S_{ij} : 是一个复数。
- 总维度: S 矩阵的总维度是 $(\sum_{i=1}^6 N_i) \times (\sum_{i=1}^6 N_i)$

1.1 模式 (Modes)

每个端口（电极）在给定的能量 E 下，可以支持特定数量的传播模式（通道），我们记为 N_i （端口 i 的模式数）。

- N_i 是一个整数，由 Kwant 根据电极的能带结构在能量 E 处自动计算。=

```
syst1=make_syst(width=10,length=200,leads_model=model_MTI())
```

Listing 1: 代码示例

- 端口 0 和 3 (lead0) 的宽度为 $\text{width}=10$ 。
- 端口 1, 2, 4, 5 (lead1, lead2) 的宽度为 $\text{width_lead} = \text{length}/5 = 40$ 。
- 由于宽度不同，不同端口的模式数 N_i 很可能是不相等的。但根据对称性，我们有：
 - $N_0 = N_3$
 - $N_1 = N_5$
 - $N_2 = N_4$

1.2 S 矩阵的结构(从通道到通道)(直接给出: S 矩阵为幺正矩阵, 论证: 输入等于输出)

1.2.1 基本定义与物理意义

- S 矩阵是一个复数方阵, 它将所有入射 (incoming) 传播模式的波函数振幅矢量 ψ_{in} 线性映射到所有出射 (outgoing) 传播模式的波函数振幅矢量 ψ_{out} 上。

$$\psi_{\text{out}} = S \times \psi_{\text{in}}$$

1.2.2 结构与行列意义

- 方阵: S 矩阵的维度由系统中所有端口的传播模式总数决定, 输入维度 (总入射模式数) 与输出维度 (总出射模式数) 相等, 故为方阵。
- 列 (Columns) - “输入”: S 矩阵的第 j 列, 是当一个单位通量的电子只从第 j 个入射模式注入时, 其波函数被散射到所有可能出射模式的最终振幅分布。它描绘了入射模式 j 的完整“散射命运图”。
- 行 (Rows) - “输出”: S 矩阵的第 i 行, 汇集了所有入射模式对第 i 个出射模式的振幅贡献。它描绘了出射模式 i 的“来源构成分析”。

Handwritten mathematical derivation showing the unitarity of the S-matrix:

$$\sum_{i,j,k} \langle \phi_i | \psi_j \rangle = \sum_{i,j,k} \langle \psi_i^{\dagger} | \psi_j \rangle = \sum_{i,j,k} (S^{\dagger} S)_{ik} = \delta_{ik}$$
$$\langle \phi_i | \psi_j \rangle = \langle \psi_i^{\dagger} | \psi_j \rangle = (S^{\dagger} S)_{ik} = \delta_{ik}$$

物理意义:

- $i=k$, 从入射模式 $j=k$ 注入的电子, 最终从所有出射模式 i 出来的总概率必须为 1 (100%)
- $i \neq k$, S 矩阵的不同列是相互正交的, 保证了不同入射通道之间的独立性。