arXiv:2305.05125v1 [hep-ph] 9 May 2023

氙、氪和氩中用于暗物质直接探测的精确电子反冲电离因子

A. R. Caddell, [1], * V. V. Flambaum, [2] 和 B. M. Roberts[1], †

[1] School of Mathematics and Physics, The University of Queensland, QLD 4072, Australia
[2] School of Physics, University of New South Wales, Sydney NSW 2052, Australia（日期：2023年5月10日）

尽管大多数闪烁型暗物质实验都在搜寻弱相互作用大质量粒子（WIMPs），但亚吉电子伏特质量尺度的类 WIMP 粒子也可能在这些实验中被探测到。这类、处于这一质量尺度的暗物质不会产生明显的核反冲信号，但可能诱导原子电子发生电离。对原子波函数进行精确建模，是研究这一可能性的关键；不恰当的处理会导致原子激发因子大幅受到抑制。我们计算了氙、氪和氩的这些原子因子，并给出了表格化结果，以供一系列暗物质模型使用。这得益于原子形状因子与暗物质形状因子可以分离，从而能够针对一般耦合计算原子因子；我们给出了矢量、标量、赝矢量和赝标量电子耦合的表格。此外，我们利用表格化结果计算了氙的电子碰撞总电离截面，以此检验计算精度。最后，我们给出了一个在 XENON1T 中计算暗物质与电子散射事件率的示例，并表明这些计算在很大程度上取决于如何对探测器的低能响应进行建模。

I. 引言

随着关于暗物质（DM）存在的天体物理证据不断增强，对其本质的研究已逐渐渗透到物理学的诸多领域。然而，尽管经过多年的专门实验研究，暗物质的本质仍然是一个谜，迄今为止尚未有任何得到确认的探测结果 [1]。一种被广泛接受的解释认为，暗物质是一种尚未被发现的粒子，它主要通过引力与其他物质相互作用，同时与普通物质之间存在极其微弱的耦合，而这种耦合可能被用作探测途径 [2]。在各种候选粒子中，弱相互作用大质量粒子（WIMPs）最受关注，众多实验旨在搜寻质量尺度达到吉电子伏特（GeV）及以上的弱相互作用大质量粒子（例如，参见文献 [3–6]）。

一种研究较少的选择是亚GeV质量尺度、类似弱相互作用大质量粒子的粒子。近年来的许多暗物质实验基于闪烁，并依靠核反冲来宣称探测到暗物质。由于这些较轻粒子的质量与核子相当或更小，核反冲率可以忽略不计。然而，它们与闪烁体中原子电子的相互作用可能产生可观测的电离信号，参见例如文献 [7–14]。低质量弱相互作用大质量粒子也可能通过米格达尔效应，在核散射过程中产生可观测信号，参见例如文献 [15–20]。

使用双相时间投影室（时间投影室）的实验尤其值得关注。在这类探测器中，大部分闪烁材料处于液相，并施加了电场（有时称为“漂移”电场）；其余材料则处于上方的气相中，那里有更强的电场 [21]。由于这种装置，这类探测器的结果可以表现为 S1 和 S2信号。

即时闪烁信号 S1 发生在液相中，当入射粒子与闪烁体原子发生碰撞并导致光子释放时，便会产生该信号。由于该区域存在电场，如果碰撞导致原子电子发生电离，这些电子便会向上漂移，朝气相移动（更多细节请参见文献 [5, 6, 21, 22]）。对于亚GeV暗物质与闪烁体相互作用的情况，大多数研究都集中于寻找 S2信号（例如，参见文献 [23, 24]）。然而，由于事件率的增强，暗物质-电子相互作用产生可探测 S1信号的可能性可能高于以往研究所表明的水平 [10]。

为探讨原子电离的可能性，我们需要计算原子电离因子，详情见第III节。然而，这些计算面临诸多困难。根据实验的具体情况，通常需要在跨越多个数量级的能量沉积（∼电子伏至千电子伏）和动量转移（∼千电子伏至兆电子伏）范围内，准确计算原子电离因子。此外，若对原子波函数的描述不准确，计算结果可能会产生高达数个数量级的误差。正如参考文献 [10]中所述，这使得许多常用且方便的近似方法无法使用。

当能量和动量转移较大时，相对论效应对计算至关重要 [9, 25]。这些效应甚至可能主导计算结果，因为最靠近原子核的电子波函数部分对散射的贡献最大，因此我们需要使用完全相对论波函数，才能准确描述短距离处的行为。

在中等动量转移值下，原子波函数在小距离处的标度关系再次变得非常重要。这可能会在计算中导致极其严重的误差，尤其是在将波函数近似为类氢波函数并按相关因子进行缩放时（有时

* a.caddell@uq.edu.au
† b.roberts@uq.edu.au

被称为“有效-Z”方法）。

在低动量转移下，以及在一定程度上出现在所有尺度上，连续态波函数的形式对于计算至关重要。将这些连续态波函数近似为平面波，会遗漏文献中所述的显著的类 Sommerfeld 增强效应。[8, 10]原子核的吸引势意味着，平面波在该区域的短距离标度行为并不恰当。为了使连续态成为非束缚能量本征态，必须在自洽原子势中求解它们，以确保其与束缚电子的正交性 [17, 26]。

对精确性的需求同样延伸至连续态能量，因为在该区域求解狄拉克方程可能会在数值上不稳定。最后，在能量沉积和动量转移都相对较低时，原子电离因子可能显著依赖原子势本身。

我们的方法采用相对论性哈特里-福克近似，并计及最重要的多体效应。该方法解决了上述所有问题，从而能够在与暗物质-电子散射相关的能量沉积和动量转移取值下进行精确计算。此外，我们还可以通过计算电子碰撞电离截面来检验该方法；对于低质量类 WIMP 粒子而言，这是一个与暗物质碰撞电离相似的过程。在相关碰撞能区，实验上已经测得了氩的高精度反应率，因此可以对我们方法的准确性进行严格检验。在重要的 ∼千电子伏入射能量下，我们的计算结果与实验符合得明显好于那些仅专注于电子碰撞率的专门计算。

我们以补充材料 [27]和 GitHub [28]的形式提供氩、氪和氙的原子激发因子表。这些表可与暗物质形状因子结合使用，以计算截面和事件率，避免因原子物理描述不准确而导致的低估。表格旁边的 GitHub 上还提供了一个代码示例，展示这一计算过程[28]。最后需要指出，尽管我们的代码和方法是为散射开发的，但也适用于吸收（例如参见文献 [26, 29, 30]），在这种情况下也可能有所助益。

II. 理论

我们考虑非相对论性暗物质粒子与原子之间的非弹性散射。我们可以用有效的 Yukawa 耦合来描述暗物质与电子之间的相互作用：

$$V = \hbar c \alpha_\chi \frac{e^{-\mu r}}{r}\,, \tag{1}$$

其中， α_χ 是暗物质—电子耦合强度， μ 是相互作用长度尺度的倒数。这种势能形式将由矢量或电子与暗物质粒子之间的标量耦合的非相对论极限产生，此时 μ 可识别为 $\mu = m_v c/\hbar$，其中m_v 是媒介粒子的质量。当媒介粒子无质量时，这种势能将化为类库仑势；当其质量很大时，则会化为接触相互作用。

初态为 $n\kappa m$ 的原子电子被电离至末态 $\varepsilon\kappa' m'$的微分截面可写为

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{n\kappa}}{\mathrm{d}E} = 8\pi\alpha_\chi^2 \left(\frac{c}{v}\right)^2 \int_{q_-}^{q_+} \frac{q\mathrm{d}q}{\left(q^2+\mu^2\right)^2} \frac{K_{n\kappa}\left(E,q\right)}{E_H}\,. \tag{2}$$

其中， E 是能量沉积， v 是固定的暗物质速度， q 是动量转移， $E_H \equiv m_e c^2\alpha^2 \approx 27.2\,\mathrm{eV}$ 是哈特里能量单位，我们引入它是为了使 K 无量纲； K 是无量纲的原子激发因子 [10]， n 是束缚电子的主量子数，而 ε 是电离电子的能量，可写为 $\varepsilon = E - I_{n\kappa}$，其中 $I_{n\kappa}$ 表示状态 $n\kappa$的电离能。积分上下限 $q_\pm$是动量转移[1]的允许范围。

$$\hbar q_\pm = m_\chi v \pm \sqrt{m_\chi v - 2m_\chi E}\,. \tag{3}$$

最后， κ 是狄拉克量子数，其定义基于轨道角动量量子数l和总角动量量子数 j： $\kappa = \left(l-j\right)\ \left(2j+1\right)$。

原子激发因子与暗物质粒子相互作用导致状态 $n\kappa m$ 跃迁至 $\varepsilon\kappa' m'$ 的概率成正比；对于矢量电子耦合，其定义见参考文献 [10]：

$$K_{n\kappa} \equiv E_H \sum_m \sum_{\kappa' m'} \left|\left\langle \varepsilon\kappa' m' \middle| e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \middle| n\kappa m\right\rangle\right|^2, \tag{4}$$

其中 m 是磁量子数。我们强调，末态是能量本征态，而非动量本征态。因此，自然应以能量为尺度进行归一化，使得

$$\int_{\varepsilon-\delta}^{\varepsilon+\delta} \left\langle \varepsilon'\kappa' m' \middle| \varepsilon\kappa m\right\rangle \,\mathrm{d}\varepsilon' = \delta_{\kappa,\kappa'}\delta_{m,m'}. \tag{5}$$

连续态波函数的量纲为：$[\phi_\varepsilon] = L^{-3/2}E^{-1/2}$。引入因子 E_H 是为了使K 无量纲。比较不同研究中计算的电离因子时应谨慎，因为它们可能采用不同的归一化方式。

接下来，我们对所有电子求和，得到总原子激发因子 K，并据此得到速度平均微分截面，表示为

$$\frac{\langle \mathrm{d}\sigma v\rangle}{\mathrm{d}E} = \frac{\bar{\sigma}_e\, c}{2m_e c^2} \int \mathrm{d}v \frac{f(v)}{v/c} \int_{q_-}^{q_+} a_0^2\, q\mathrm{d}q\, |F_\chi^\mu(q)|^2 K(E,q)\,, \tag{6}$$

[1] 严格来说， $\hbar q$ 才是 *momentum* 转移， q 的单位是长度的倒数。为简洁起见，我们将 q 称为动量转移。为便于比较不同研究，我们在方程中保留 c 和 $\hbar$ 因子。

其中 $\bar{\sigma}_e$ 是固定动量转移为 $q = a_0^{-1} \approx 3.6$千电子伏时的自由电子截面。为简化结果之间的比较，我们按照文献 [31, 32] 中的做法引入该截面（a_0 为玻尔半径；关于将 [10]与 $\bar{\sigma}_e$ 联系起来的完整表达式，参见文献 α_χ 中的方程（1））。暗物质速度分布记为 f，我们假设它服从麦克斯韦-玻尔兹曼分布，并采用标准晕模型的假设（例如，参见文献 [33, 34]）。值得注意的是，电子反冲能谱可能对速度分布的细节特别敏感，例如参见文献 [9, 10, 35]。最后，F_χ 是暗物质形状因子。

由于 F_χ 可以与原子激发因子分离，原子激发因子在很大程度上独立于暗物质模型，因此我们只需考虑电子耦合。对于第五节中的示例计算，我们采用一种适用于矢量耦合和标量耦合的暗物质形状因子，其定义见参考文献 [10]中

$$F_\chi(q) = \frac{(m_v/m_e)^2 + \alpha^2}{(m_v/m_e)^2 + (\alpha a_0 q)^2} \,. \tag{7}$$

尽管我们最初采用的有效势可用于矢量和标量相互作用，但式（4）仅适用于矢量情形。若在矩阵元中将 $e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$ 替换为 $\gamma^0 e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$、$\gamma^0\gamma_5 e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$或 $\gamma_5 e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$，则可得到标量、赝标量或赝矢量电子耦合。

III. 计算

A. 哈特里-福克近似

由于求取原子激发因子需要计算同时涉及束缚态和连续态波函数的矩阵元，因此我们需要准确构造电子轨道。我们采用相对论性哈特里-福克（HF）方法，该方法具有自洽性，并包含电子交换相互作用。随后，在一系列能量沉积值的每个取值下，我们使用最终的 HF 势求解狄拉克方程，以得到连续态波函数。我们将 HF 势写成直接势与交换势之和，

$$\hat{V}_{\rm HF}\psi_a(\boldsymbol{r}_1) = \sum_{i\neq a}^{N_c}\left(\int \frac{|\psi_i(\boldsymbol{r}_2)|^2}{r_{12}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\,\psi_a(\boldsymbol{r}_1) - \int \frac{\psi_i^\dagger(\boldsymbol{r}_2)\psi_a(\boldsymbol{r}_2)}{r_{12}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2\,\psi_i(\boldsymbol{r}_1)\right), \tag{8}$$

其中第一项对应直接势，第二项对应交换势，i 表示具有量子数 $\{n_i, \kappa_i, m_i\}$ 的束缚电子态，N_c 是电子总数，最后是 $r_{12} = |\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|$。

首先，对 N_c 束缚电子自洽地求解哈特里-福克方程。然后，the 连续电子的波函数是在冻结的哈特里-福克势中通过直接求解狄拉克方程得到的，其中包含交换项。（与冻结势的微小偏差，即空穴-粒子相互作用，将在下文讨论。）我们对连续态采用能量归一化条件（5）。在实际计算中，通过向外积分求解狄拉克方程，直至远离原子核的极远距离，此时波函数呈现出与类氢情形类似的球面波形式，并将其与解析解进行比较 [36]。

B. 原子电离因子的计算

在狄拉克基中，我们将束缚态轨道写为

$$\phi_{n\kappa m}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} f_{n\kappa}(r)\Omega_{\kappa m}(\hat{\boldsymbol{n}}) \\ i g_{n\kappa}(r)\tilde{\Omega}_{\kappa m}(\hat{\boldsymbol{n}})\end{pmatrix}, \tag{9}$$

连续态轨道也同样如此。

$$\phi_{\varepsilon\kappa m}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} f_{\varepsilon\kappa}(r)\Omega_{\kappa m}(\hat{\boldsymbol{n}}) \\ i g_{\varepsilon\kappa}(r)\tilde{\Omega}_{\kappa m}(\hat{\boldsymbol{n}})\end{pmatrix}, \tag{10}$$

其中，f 和 g 是狄拉克波函数的大分量和小分量，Ω 是二分量球旋量。我们可以将 Ω 表示为

$$\Omega_{\kappa m} = \sum_{s_z}\langle l, m-s_z, 1/2, s_z | j, m\rangle\, Y_{l,m-s_z}(\hat{\boldsymbol{n}})\chi_{s_z}\,, \tag{11}$$

其中，$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM\rangle$ 表示克莱布什-戈尔登系数，Y 是球谐函数，χ 是自旋本征态，s_z 是电子自旋，因此求和遍历 $s_z = \{-1/2, 1/2\}$。最后，Ω 与 Ω 相关，通过

$$\tilde{\Omega}_{\kappa m} = -\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}\right)\Omega_{\kappa m} = \Omega_{-\kappa,m}\,. \tag{12}$$

为计算式（4）中的矩阵元，我们使用不可约球张量展开指数项:

$$e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} = \sum_{L=0}^{\infty}\sum_{M=-L}^{L} T_{LM}\,, \tag{13}$$

其中

$$T_{LM} = 4\pi i^L j_L(qr) Y_{LM}(\theta_r, \phi_r) Y^*_{LM}(\theta_q, \phi_q)\,. \tag{14}$$

其中 j_L 是第一类球贝塞尔函数，L 是多极性。结合这些结果和角动量约化规则 [37], ，我们可以将原子激发因子写为

$$K_{n\kappa}(E, q) = E_H \sum_L \sum_{\kappa'} |R^{\kappa' L}_{n\kappa}|^2 C^L_{\kappa\kappa'}\,, \tag{15}$$

其中 R 是径向积分，C 是角系数。对于矢量电子耦合情形，R 可以

可表示为

$$R^{\kappa' L}_{n\kappa} = \int_0^\infty \left[f_{n\kappa}(r) f_{\varepsilon\kappa'}(r) + g_{n\kappa}(r) g_{\varepsilon\kappa'}(r) \right] j_L(qr) dr \,. \tag{16}$$

如果我们改为考虑标量情形，将 $e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$ 替换为 $\gamma^0 e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$，则会得到一个径向积分

$$R^{\kappa' L}_{n\kappa} = \int_0^\infty \left[f_{n\kappa}(r) f_{\varepsilon\kappa'}(r) - g_{n\kappa}(r) g_{\varepsilon\kappa'}(r) \right] j_L(qr) dr \,, \tag{17}$$

根据正交条件，它可以改写为在低 q 下数值上更稳定的形式：

$$\begin{aligned} R^{\kappa' L}_{n\kappa} = \int_0^\infty \Big[& f_{n\kappa}(r) f_{\varepsilon\kappa'}(r) (j_L(qr) - 1) \\ & - g_{n\kappa}(r) g_{\varepsilon\kappa'}(r) (j_L(qr) + 1) \Big] dr \,, \end{aligned} \tag{18}$$

如下面所述。对于赝标量情形，将 $e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$ 替换为 $\gamma^0\gamma_5 e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$ 可得

$$R^{\kappa' L}_{n\kappa} = \int_0^\infty \left[f_{n\kappa}(r) g_{\varepsilon\kappa'}(r) + g_{n\kappa}(r) f_{\varepsilon\kappa'}(r) \right] j_L(qr) dr \,, \tag{19}$$

最后，对于赝矢量情形，将 $e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$ 替换为 $\gamma_5 e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}$ 可得

$$R^{\kappa' L}_{n\kappa} = \int_0^\infty \left[f_{n\kappa}(r) g_{\varepsilon\kappa'}(r) - g_{n\kappa}(r) f_{\varepsilon\kappa'}(r) \right] j_L(qr) dr \,. \tag{20}$$

对于矢量和标量电子耦合这两种情形，C 可表示为

$$C^L_{\kappa\kappa'} = [j][j'][L] \begin{pmatrix} j & j' & L \\ -1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix}^2 \Pi^L_{ll'} \,, \tag{21}$$

其中，$[J] \equiv 2J+1$括号中的项是一个 Wigner 3-j 符号，$\Pi^L_{ll'}$ 是宇称选择定则（当 $l + l' + L$ 为偶数时取 1，否则取 0）。赝矢量和赝标量情形的角系数类似，但我们将 κ 替换为 $\tilde{\kappa} = -\kappa$，并将 l 替换为 $\lambda = |\tilde{\kappa} + 1/2| - 1/2$。

这些耦合对应的总原子因子的计算示例见图（1）和图（2），分别展示了它们随能量沉积和动量转移的变化。这些因子的表格收录于补充材料中。此外，也可在 GitHub 上找到这些表格 [28], 以及示例代码，这些代码利用表格计算截面，如第IV节和第V节所示。

作为计算稳定性的检验，我们还使用近似的局域势而非 Hartree-Fock 势计算了 K。所用的局域势由核势和参数化势构成，因此计算简单得多，也不易出现数值不稳定。局域势得到的原子激发因子非常相似，可作为比较基准，帮助发现计算中可能存在的数值问题或错误。

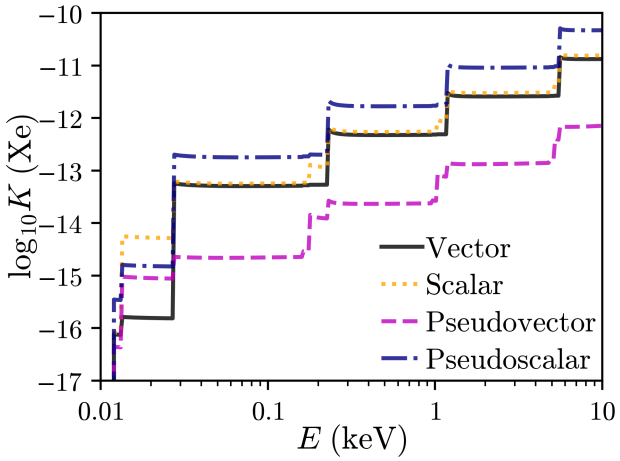


图 1. 氙中总原子激发因子随能量沉积变化的比较。电子耦合分别为矢量（实线）、标量（点线）、赝矢量（虚线）和赝标量（点划线），动量转移固定为 $q = 4$ MeV。

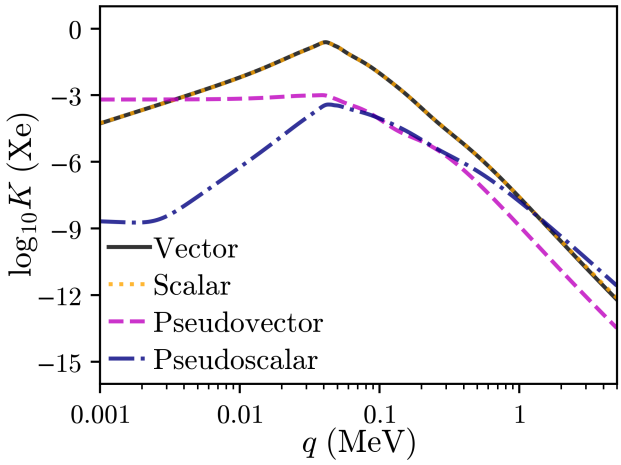


图 2. 在固定能量沉积为 $E = 2$ 千电子伏时，氙的总原子激发因子随动量转移的变化，电子耦合与图 1相同。

C. 多体效应

最重要的多体效应（即偏离冻结芯 Hartree-Fock 近似）是空穴-粒子相互作用。从物理上讲，这种效应源于电离电子的（直接）哈特里-福克势与芯态中的势不同，如图4所示。在实际的占据芯态 Hartree-Fock 计算中，自相互作用项包含在直接势中；随后由交换势中的相应项将其精确抵消，例如，在方程（$i = a$ 8）中令。然而，这种抵消并不适用于从

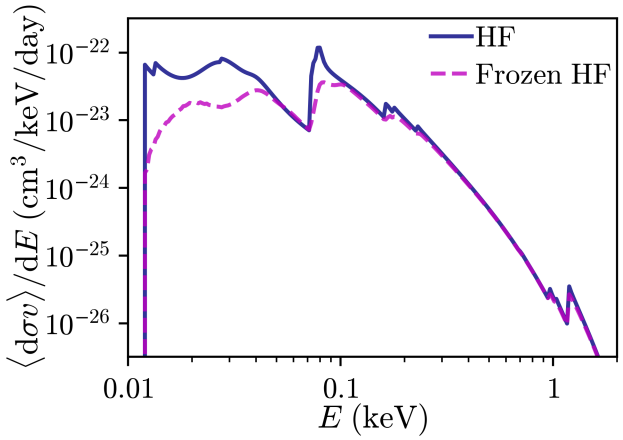


图 3. 考虑空穴-粒子相互作用（实线）和不考虑该相互作用（“冻结”的 Hartree-Fock，虚线）时，氩的速度平均微分截面。在此情况下，我们设定暗物质质量为 $m_\chi = 1$ 吉电子伏特。暗物质形状因子设为 $F_\chi = 1$，根据式 7，对应于重媒介子。我们采用矢量电子耦合，自由电子截面为 $\bar{\sigma}_e = 10^{-37}$ 厘米^2。

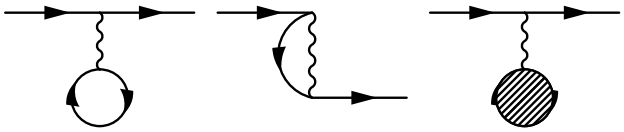


图 4. 原子势的直接贡献（左）、交换贡献（中）和空穴-粒子贡献（右）对应的戈德斯通图。波浪线表示库仑相互作用，外线表示束缚原子态或非束缚连续态，内线表示芯态（空穴）。空穴-粒子效应源于被射出的连续态电子所受直接势与束缚电子所受直接势不同。

原子核。因此，对于激发态，应去除自相互作用项。虽然在考察电离能较高（靠近原子核）的束缚电子电离时，这个空穴-粒子相互作用项造成的差异非常小，但对于离原子核较远的电子以及能量较低的散射，其影响会更加明显。从图 3 中可以看出，这一对原子因子的贡献会延续到截面计算中，随着能量降低，差异会变得更加显著。

除了哈特里-福克近似和空穴-粒子效应之外，外场矩阵元最重要的多体修正是芯极化，通常称为含交换的相对论随机相位近似（RPA） [38]。最低阶芯极化图示于图5中。从物理上看，这种效应源于外场与电子间库仑相互作用的共同作用。在本文的情形下，它表现为：暗物质粒子与某一状态的电子相互作用时，另一状态的电子可能因此被电离

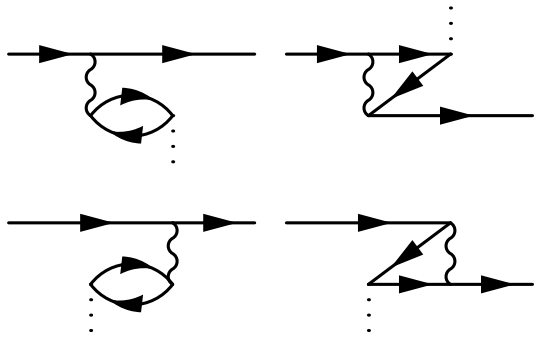


图 5. 矩阵元芯极化修正的戈德斯通图，显示直接贡献（左）和交换贡献（右）。图示符号与图 4 相同，其中点线表示与外场（暗物质粒子）的相互作用，内部向前线表示虚拟激发原子态。在全阶随机相位近似方法中，每个外场顶点都由这四个图替代；重复此过程，直至矩阵元收敛。

这是由于它与第一个电子之间的库仑相互作用所致。例如，在只有 s-态具有显著的 e^{iqr} 矩阵元（因为它们在原子核处的波函数非零），但这些态在能量上不可及的情况下，这种效应可能尤为重要。在这种情况下，能量上可及的 p，d-态可能通过与一个和暗物质发生相互作用的 s-电子之间的库仑相互作用而被击出。

在多体微扰理论图示中，隐含着对中间态求和；反向线表示原子芯态（束缚态、已占据态），正向线则表示激发态（未占据态）束缚态和连续态的完整谱。为近似这一谱，我们将一组 B 样条在原子哈密顿量上对角化，构造出一个近似完备但有限的基组（例如参见 [39, 40]）。我们采用了参考文献 [41]，中引入的双动能平衡基组，它具有很高的收敛性和稳定性。我们的技术经过充分检验，能够在一系列原子系统中获得高精度结果 [42]。

最低阶计算通常会高估芯极化贡献，而且往往高估得相当显著。要进行精确计算，必须考虑库仑相互作用的所有阶。在随机相位近似中，这通过迭代实现：将四个随机相位近似图中的每个外场顶点，替换为四个随机相位近似图（图 5）。不断重复这一过程，直至收敛。这等价于（在外场的一阶近似下）求解哈特里-福克方程时，将外场的作用纳入势中（称为含时哈特里-福克方法 [43]）。我们注意到，必须针对每个动量转移 q和每个多极性 L （见式（13））分别迭代随机相位近似方程。因此，我们纳入所有阶

仅针对部分参数范围考虑随机相位近似（RPA）效应，以检验其贡献；我们发现其贡献很小。

最低阶芯极化效应在能量沉积较小时影响最大，带来的修正最多为两倍。全阶随机相位近似修正则会显著减小这一影响。积分后，Hartree-Fock 计算因排除随机相位近似而产生的不确定性约为 $\simeq 20\%$，对于当前目的而言已绰绰有余。

最后，我们检查由正交性不完善导致的误差。由于存在数值不确定性，在实际计算中，芯态与连续态之间无法保证完全正交，尤其是在纳入空穴-粒子相互作用时。这可能导致显著误差，因此必须进行检查。我们可以采用标准程序，显式强制连续态与芯态正交，以此进行检查：$|a\rangle \to |a\rangle - |b\rangle\langle b|a\rangle$。在我们的计算中，这几乎没有影响，因为自洽 Hartree-Fock 程序已实现良好的正交性。然而，对于无法保证势自洽性的方法，这项检查至关重要。

确保芯态与连续态之间正交性的另一种方法，是对 $e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} \to e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}} - 1$ 在公式4 中的矩阵元进行替换（或者等价地，对公式 $j_L \to j_L - 1$ 中的矩阵元进行替换，见公式15）。虽然这种方法能够纠正低动量转移区域中由正交性引起的误差，但可能会将误差转移到高动量转移区域。由于在暗物质-电子散射中，我们需要在跨越多个数量级的动量转移范围内获得准确的原子因子，因此，仅采用这种替换方法无法确保本问题中的正交性。在考虑空穴-粒子相互作用时，这一点尤为明显。因此，我们选择采用前述确保正交性的方法，因为该方法能够解决所需动量转移范围内的相关问题。

D. 原子激发因子的近似方法

我们提出一种直观的近似方法来表示电离形状因子，该方法适用于$q \gg 1/a_0$。当能量沉积超过束缚电子的电离能时，该电子便变得“可接近”；在此阈值以下，该电子的原子激发因子也为零。随着能量沉积继续超过此阈值，在连续态能量仍较低时，只要 q 足够大，原子激发因子就相对恒定。这是因为当 q较大时，电子波函数中只有低-r 部分可能产生贡献。在这一范围内，束缚电子或连续态电子的能量相较于核势 $|\varepsilon| \ll |Z/r|$可忽略不计，而狄拉克方程与能量无关。在这种情况下，我们可以将 $K_{n\kappa}(E,\ q)$近似为能量的阶跃函数，从而将其表示为

$$K_{n\kappa}(E,q) \approx \tilde{K}_{n\kappa}(q)\Theta(E - I_{n\kappa})\,, \tag{22}$$

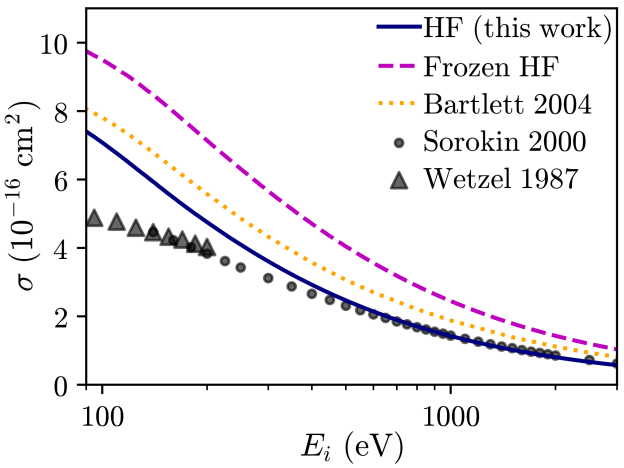


图 6. 考虑空穴-粒子相互作用（HF）和不考虑空穴-粒子相互作用（冻结 HF）时氩的电子碰撞电离总截面计算结果，并与 Bartlett *et al.* [44] 的计算结果以及 Sorokin *et al.* [45] 和 Wetzel *et al.* [46] 的实验结果进行比较。

˜其中，Θ 是 Heaviside 阶跃函数，而 $K_{n\kappa}$ 是在固定能量沉积下依赖于动量转移的原子激发因子。因此，高于˜电离能后，$K_{n\kappa}$ 等于 $K_{n\kappa}$.

这种近似方法在动量转移值非常小（$q \lesssim 0.1$ MeV）时会失去精度。对于暗物质-电子散射的典型动量转移值，在低q 区域发现的误差不会对截面计算产生显著影响，因为需要对 q进行积分，如式（6）所示，但如果需要在该区域获得高精度，则应谨慎处理。

IV. 电子碰撞电离

我们还计算了入射自由电子使原子电子发生电离时的总截面（文献中称为“电子碰撞”（EI）电离）。利用现有的实验数据，将这些计算应用于此类相互作用，可以检验代码的准确性。在 $m_\chi \to m_e$, $m_v \to 0$ 和 $\alpha_\chi \to \alpha$ 的情况下，可以看出，电子碰撞电离与暗物质诱导电离是非常相似的原子过程。

为了与实验数据进行比较，我们可以计算总截面，

$$\sigma(E_i) = \frac{4\pi}{E_i}\int_0^{E_i}\int_{q_-}^{q_+} \mathrm{d}q \frac{K(q,E)}{q^3}\mathrm{d}E\,, \tag{23}$$

其中，E_i 是弹射电子的入射能量，E 仍表示能量沉积。

正如以往文献所发现的，与实验值相比，这类散射的总截面计算结果平均而言被高估了——

（参见，例如，文献 [47]及其中的参考文献）。检验暗物质诱导电离时，相关的入射能量范围为 $m_\chi v^2 \sim$（吉电子伏特）$(10^{-3})^2 \sim$ 千电子伏。我们的计算结果见图6，并与实验数据及已有计算结果一并展示，以供比较。

当入射电子能量较低（$E_i \lesssim$ 100电子伏）时，可以看到我们的计算（以及其他研究组的计算）高估了总电离截面。这种与实验结果的偏差很大程度上源于我们采用了玻恩近似 [44],，而该近似仅在相互作用极弱时才成立。由于本文所考虑的暗物质-电子相互作用属于这一类 [25]，因此该近似是适用的；与研究电子碰撞电离时相比，它在这里并非同样关键。此外，电子碰撞电离的情况更为复杂，因为相互作用中存在交换项（我们未予考虑）：入射粒子是电子，可能与束缚原子电子发生交换。由于暗物质的情形不存在这样的项，预计暗物质散射情形下的计算会更加准确。

值得注意的是，在能量更接近暗物质-电子散射事件能量的区域（$E_i \gtrsim$ 1千电子伏），我们可以从图6 中看到，扣除了空穴-粒子相互作用的情形所得结果最接近实验值。这表明，在这一高能区域，现有结果的准确性有所提高，也凸显了扣除空穴-粒子相互作用项的重要性。这既验证了我们的原子波函数，也验证了用于推导散射公式的近似方法。

V. 事件率计算示例

对于暗物质-电子散射，微分事件率为，

$$\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}E} = \frac{n_T \rho_\chi}{m_\chi c^2} \frac{\langle \mathrm{d}\sigma v \rangle}{\mathrm{d}E}\,, \tag{24}$$

其中，n_T 是单位质量探测器中的靶原子数（原子质量的倒数），m_χ 是暗物质质量，ρ_χ 是暗物质的局域能量密度，我们取其为 ~ 0.4吉电子伏特 cm^{-3} [48]。然而，我们需要考虑并非所有事件都能被实际探测到，并将探测器本身的探测能力纳入考量。这样，我们就能得到特定能量区域内的可观测事件率，并将其与实验中观测到的事件率进行比较。

由于各探测器的探测能力取决于设备、探测器的装置配置和闪烁材料，因此模型也会因实验而异。作为此项计算的示例，我们参考文献 [49] ，首先将 XENON1T 的探测器分辨率建模为标准差为.....的高斯分布，

$$\sigma(E) = a \cdot \sqrt{E} + b \cdot E\,, \tag{25}$$

其中 $a = (0.310 \pm 0.004)\sqrt{\text{千电子伏}}$，且 $b = 0.0037 \pm 0.0003$。

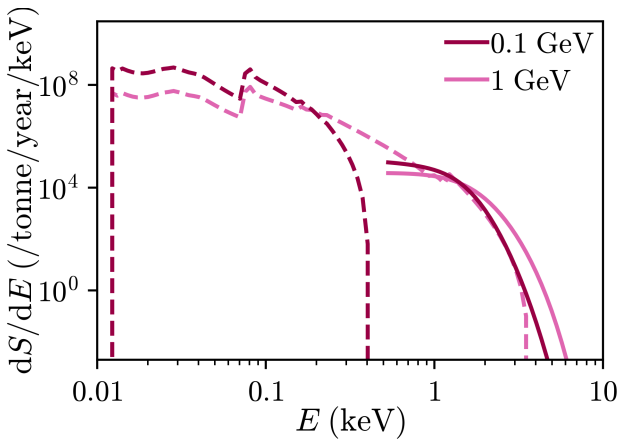


图 7. 采用高斯分布进行展宽并校正探测效率前（点线）和后（实线）的示例事件率计算 [49], 分别对应于方程（24）和（26），分别。在计算得到的事件率中看到的尖峰，是由于随着能量沉积增加，更深层电子壳层变得可访问所导致的；我们也可以在截面中看到这一点。在 0。5 千电子伏处对可观测事件率施加了截止，以表示最小能量阈值。再次，$\bar{\sigma}_e = 10^{-37}\ \mathrm{cm}^2$。

我们使用此高斯分布，g_σ对方程（24）中给出的理论事件率进行展宽。

还需要根据探测器的效率对事件率进行校正。我们通过拟合能量的函数 $\varepsilon(E)$ 得到总效率，并在文献 [49]的图 2 中给出了该结果。综合这些步骤，可将可观测微分事件率表示为

$$\frac{\mathrm{d}S}{\mathrm{d}E} = \varepsilon(E) \int_0^\infty g_\sigma(E' - E) \frac{\mathrm{d}R(E')}{\mathrm{d}E'} \mathrm{d}E'\,. \tag{26}$$

从图 7中可以看出，对特定探测器进行校正后，事件率如预期般降低。对于最低质量情形 0.1 吉电子伏特，计算得到的事件率会在低于可观测事件率峰值所对应能量处降为零。这是因为探测器响应被建模为高斯分布，使得极低能量信号能够“泄漏”到更高能量区域，并被视为可探测信号。尽管在较高能量下这是合理的 [50], 但在低能量下，这会给可观测事件率引入较大的不确定性；在该能量范围内，采用简单的高斯分布来建模响应并不恰当。

从图 7可以看出，对于所有暗物质质量情形，理论事件率的峰值都低于 1 千电子伏。尽管每个高斯分布在该区域的尾部幅度都很低，但事件率的大小仍使可观测事件率偏高。这意味着，在低能量沉积区域贡献较大的任何散射类型中，以这种方式对探测器建模都会高估可观测事件率。在这些情况下，应谨慎评估使用高斯分布对可观测事件率的影响程度，以及是否

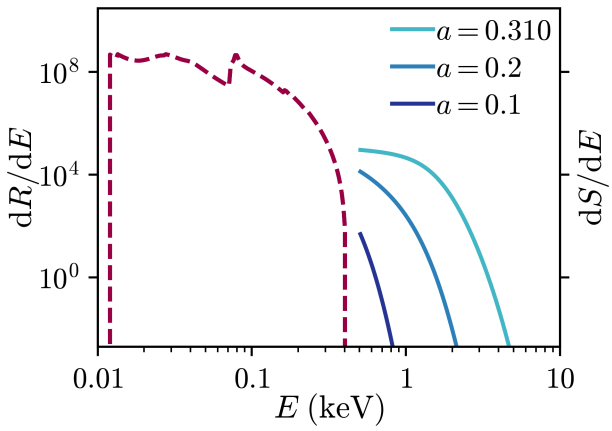


图 8. $m_\chi = 0.1$ 吉电子伏特、具有矢量电子耦合和重媒介子的示例速率计算。散射速率（虚线）对应于探测器完美的情况，与理论上的 $\mathrm{d}R/\mathrm{d}E$ 相符；而可观测事件率（实线）则表示采用不同能量分辨率模型的探测器所能观测到的速率。 $a = 0.310$ 对应于 XENON1T 的情况，而 $a = 0.2$ 和 $a = 0.1$ 用作对比，以突出高斯分布变化所带来的灵敏度。同样， $\bar{\sigma}_e = 10^{-37}$ 厘米^2。

因远低于阈值的事件而导致高估。如果影响较大，更准确的做法是直接模拟特定探测器，例如使用 NEST（惰性元素模拟技术） [51–54], 或 Obscura [55]。对于涉及暗物质的散射情形，这一点尤其重要，因为粒子的性质尚不明确；预测事件率若被高估，可能会导致暗物质模型被过早排除。

VI. 结论

我们给出了氩、氪和氙中暗物质-电子相互作用的原子激发因子表，这些因子是动量转移和能量沉积的函数，并涵盖矢量、标量、赝矢量和赝标量耦合 [27, 28]。这些因子考虑了相对论效应，能够准确描述其中涉及的原子物理。因此，它们可以与任意选定的暗物质模型结合，用于计算截面和事件率，同时避免因忽略原子物理而常见的低估。

我们通过使用近似势计算原子因子，检验了代码是否存在数值不稳定性和错误。我们还将计算应用于电子碰撞电离，以检验代码的准确性，结果发现与实验结果吻合良好。

鉴于这些原子因子可用于计算截面和事件率，我们给出了一个针对 XENON1T 实验的事件率计算示例。准确的原子物理对于获得可靠的事件率至关重要；此外，我们还强调了探测器建模的重要性，尤其是低能响应。

致谢

本研究获得澳大利亚研究理事会资助，资助方式包括 DECRA研究员奖（编号 DE210101026）以及编号为 DP230101058 和 DP200100150 的项目。我们感谢 Ben Carew 的讨论。

[1] M. Schumann, 《物理学杂志 G：核与粒子物理》**46**，103003（2019）。[2] G. Bertone、D. Hooper 和 J. Silk, 《物理报告》**405**，279（2005）。[3] E. Aprile *et al.*, 《物理评论快报》**129**，161805（2022）。[4] J. Aalbers *et al.*, arXiv:2207.03764（2022）。[5] D. Zhang、A. Abdukerim、Z. Bo、W. Chen、X. Chen、Y. Chen、C. Cheng、Z. Cheng、X. Cui、Y. Fan、D. Fang、C. Fu、M. Fu、L. Geng、K. Giboni、L. Gu、X. Guo、K. Han、C. He、J. He、D. Huang、Y. Huang、Z. Huang、R. Hou、X. Ji、Y. Ju、C. Li、J. Li、M. Li、S. Li、S. Li、Q. Lin、J. Liu、X. Lu、L. Luo、Y. Luo、W. Ma、Y. Ma、Y. Mao、N. Shaheed、Y. Meng、X. Ning、N. Qi、Z. Qian、X. Ren、C. Shang、X. Shang、G. Shen、L. Si、W. Sun、A. Tan、Y. Tao、A. Wang、M. Wang、Q. Wang、S. Wang、S. Wang、W. Wang、X. Wang、Z. Wang、Y. Wei、M. Wu、W. Wu、J. Xia、M. Xiao、X. Xiao、P. Xie、B. Yan、X. Yan、J. Yang、Y. Yang、C. Yu、J. Yuan、Y. Yuan、X. Zeng、M. Zhang、P. Zhang、S. Zhang、S. Zhang、T. Zhang、Y. Zhang、L. Zhao、Q. Zheng、J. Zhou、N. Zhou、X. Zhou、Y. Zhou、Y. Zhou、S.-F. Ge、X.-G. He、X.-D. Ma 和 J. Sheng, 《物理评论快报》129, 161804 (2022)。[6] P. Agnes *et al.*, 《物理评论快报》121, 081307 (2018)。[7] J. Kopp、V. Niro、T. Schwetz 和 J. Zupan, 《物理评论D》80, 083502 (2009)。[8] R. Essig、J. Mardon 和 T. Volansky, 《物理评论D》85, 076007 (2012)。[9] B. M. Roberts、V. A. Dzuba、V. V. Flambaum、M. Pospelov 和 Y. V. Stadnik, 《物理评论D》93, 115037 (2016)。[10] B. Roberts 和 V. Flambaum, 《物理评论D》100, 063017 2019( )。[11] T. Emken、J. Frerick、S. Heeba 和 F. Kahlhoefer, 《物理评论D》105, 055023 (2022)。[12] I. M. Bloch、A. Caputo、R. Essig、D. Redigolo、M. Sholapurkar 和 T. Volansky, 《高能物理学杂志》2021, 178 (2021)。[13] L. Hamaide 和 C. McCabe, 《物理评论D》107, 063002 2023( )。[14] J. Clarke 和 R. Foot, 《物理快报B》766, 29 (2017)。

[15] P. Cox、M. J. Dolan、C. McCabe 和 H. M. Quiney，《物理评论D》107，035032（2023）。[16] R. Essig、J. Pradler、M. Sholapurkar 和 T.-T. Yu，《物理评论快报》124，021801（2020）。[17] V. V. Flambaum、L. Su、L. Wu 和 B. Zhu，arXiv:2012.09751（2020）。[18] N. F. Bell、J. B. Dent、J. L. Newstead、S. Sabharwal 和 T. J. Weiler，《物理评论D》101，015012（2020）。[19] D. Baxter、Y. Kahn 和 G. Krnjaic，《物理评论D》101，076014（2020）。[20] M. J. Dolan 、 F. Kahlhoefer 和 C. McCabe，《物理评论快报》121，101801（2018）。[21] E. Aprile *et al.*，《欧洲物理学杂志C》77，881（2017）。[22] J. Liu、X. Chen 和 X. Ji，《自然物理》13，212（2017）。[23] E. Aprile *et al.*，《物理评论快报》123，251801（2019）。[24] C. Cheng、P. Xie、A. Abdukerim、W. Chen、X. Chen、Y. Chen、X. Cui、Y. Fan、D. Fang、C. Fu、M. Fu、L. Geng、K. Giboni、L. Gu、X. Guo、K. Han、C. He、S. He、D. Huang、Y. Huang、Y. Huang、Z. Huang、X. Ji、Y. Ju、S. Li、Q. Lin、H. Liu、J. Liu、L. Liu、X. Lu、W. Ma、Y. Ma、Y. Mao、Y. Meng、P. Namwongsa、K. Ni、J. Ning、X. Ning、X. Ren、N. Shaheed、C. Shang、G. Shen、L. Si、A. Tan、A. Wang、H. Wang、M. Wang、Q. Wang、S. Wang、W. Wang、X. Wang、Z. Wang、M. Wu、S. Wu、W. Wu、J. Xia、M. Xiao、X. Xiao、B. Yan、J. Yang、Y. Yang、C. Yu、J. Yuan、Y. Yuan、X. Zeng、D. Zhang、T. Zhang、L. Zhao、Q. Zheng、J. Zhou、N. Zhou 和 X. Zhou，《物理评论快报》126，211803（2021）。[25] B. M. Roberts、V. V. Flambaum 和 G. F. Gribakin，《物理评论快报》116，023201（2016）。[26] H. B. Tran Tan、A. Derevianko、V. A. Dzuba 和 V. V. Flambaum，《物理评论快报》127，081301（2021）。[27] 数值原子电离因子表见本文附带的补充材料。[28] B. M. Roberts 和 A. R. Caddell，https://github.com/benroberts999/AtomicIonisation（2023）。[29] A. Derevianko、V. A. Dzuba、V. V. Flambaum 和 M. Pospelov，《物理评论D》82，065006（2010）。[30] J. A. Dror、G. Elor、R. McGehee 和 T.-T. Yu，《物理评论D》103，035001（2021）；J. A. Dror、G. Elor 和 R. McGehee，《物理评论快报》124，181301（2020）。[31] R. Essig、A. Manalaysay、J. Mardon、P. Sorensen 和 T. Volansky，《物理评论快报》109，021301（2012）。[32] R. Essig、T. Volansky 和 T.-T. Yu，《物理评论D》96，043017（2017）。[33] F. Nesti 和 P. Salucci，《宇宙学与天体粒子物理学杂志》2013，016（2013）。[34] K. Freese、M. Lisanti 和 C. Savage，《现代物理学评论》85，1561（2013）。[35] A. Radick、A.-M. Taki 和 T.-T. Yu，《宇宙学与天体粒子物理学杂志》2021，004（2021）。[36] H. A. Bethe 和 E. E. Salpeter，*Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*（Springer Berlin Heidelberg，柏林，海德堡，1957）。[37] D. A. Varshalovich、A. N. Moskalev 和 V. K. Kherson- skii，*Quantum Theory of Angular Momentum*（WORLD SCIENTIFIC，1988）第528页。[38] W. R. Johnson、C. D. Lin、K. T. Cheng 和 C. M. Lee，《物理学学报》21，409（1980）。[39] W. R. Johnson、S. A. Blundell 和 J. Sapirstein，《物理评论A》37，307（1988）。[40] V. M. Shabaev、I. I. Tupitsyn、V. A. Yerokhin、G. Plu- nien 和 G. Soff，《物理评论快报》93，130405（2004）。[41] K. Beloy 和 A. Derevianko，《计算物理学通讯》179，310（2008）。[42] B. M. Roberts、C. J. Fairhall 和 J. S. M. Ginges，（2022）。[43] V. A. Dzuba、V. V. Flambaum 和 O. P. Sushkov，《物理学杂志B：原子与分子物理学》17，1953 1984( )。[44] P. L. Bartlett 和 A. T. Stelbovics，《原子数据与核数据表》86，235（2004）。[45] A. A. Sorokin、L. A. Shmaenok、S. V. Bobashev、B. M¨obus、M. Richter 和 G. Ulm，《物理评论A》61，022723（2000）。[46] R. C. Wetzel、F. A. Baiocchi、T. R. Hayes 和 R. S. Freund，《物理评论A》35，559（1987）。[47] P. L. Bartlett 和 A. T. Stelbovics，《物理评论A》66，012707（2002）。[48] J. Bovy 和 S. Tremaine，《天体物理学杂志》756，89 2012( )。[49] E. Aprile *et al.*，《物理评论D》102，072004（2020）。[50] E. Aprile *et al.*，《欧洲物理学杂志C》80，785 2020( )。[51] M. Szydagis、N. Barry、K. Kazkaz、J. Mock、D. Stolp、M. Sweany、M. Tripathi、S. Uvarov、N. Walsh 和 M. Woods，《仪器学杂志》6，P10002（2011）。[52] M. Szydagis、A. Fyhrie、D. Thorngren 和 M. Tripathi，《仪器学杂志》8，C10003（2013）。[53] J. Mock、N. Barry、K. Kazkaz、D. Stolp、M. Szydagis、M. Tripathi、S. Uvarov、M. Woods 和 N. Walsh，《仪器学杂志》9，T04002（2014）。[54] B. Lenardo、K. Kazkaz、A. Manalaysay、J. Mock、M. Szydagis 和 M. Tripathi，《IEEE核科学汇刊》62，3387（2015）。[55] T. Emken，《开放源代码软件杂志》6，3725（2021）。