

Upphovsman: Tom Abel, Ralf Kaehler (KIPAC, SLAC), AMNH

# Detektormaterial för upptäckten av lätt mörk materia

## Detector materials for the discovery of light dark matter

Ett kvantmekaniskt optimeringsproblem

Kandidatarbete inom fysik

**Handledare:** Riccardo Catena  
ANTON FORSBERG  
JESPER KARLSSON FRANZÉN  
MATHIAS ARVIDSSON

GERDA JOHANSSON  
MARTA BARIAGABER  
ROBERT BAG

**INSTITUTIONEN FÖR FYSIK**

## Abstract

During recent years, the theories of dark matter have undergone a paradigm shift. Earlier studies focusing on direct detection of dark matter through nuclear recoils have so far been unsuccessful; indicating that dark matter particles might be lighter than previously hypothesized. The search for dark matter has consequently transitioned to detection through electron recoils. This change has created a demand for new sensitive detector materials, capable of measuring dark matter induced electronic transitions. The purpose of this report is to study electronic transitions in detector materials with the aim of exploring what materials would be best suited for the detection of dark matter. The work of this project is part theoretical derivation, and part numerical optimization. First the necessary theory is presented, culminating in an equation for the electron scattering rate of a general detector. Numerical analysis is then performed with material data to compare the modelled scattering rate of the four substances silicon, germanium, aluminum, and silicon dioxide, for different dark matter particle masses. Out of the materials mentioned, aluminum was found to be best suited for direct detection of light dark matter particles. For a deeper understanding of optimal detector materials, further research could attempt to maximize the scattering rate by analyzing the impact of individual factors and variables, rather than comparing materials in their entirety to one another. This could be achieved by utilizing a more general model of the energy loss function that does not depend on previously sampled material data.

## Sammandrag

Under de senaste åren har teorierna kring mörk materia gått igenom ett paradigmskifte. Tidigare studier som har fokuserat på direkt detektion genom spridning mot atomkärnor har hittills inte gett några resultat. Bristen på upptäckter pekar mot att mörk materia-partiklarna är lättare än tidigare hypotetiserat. Jakten efter de osynliga partiklarna har därmed skiftat till detektion via spridning mot elektroner. Denna förändring medför behovet av en ny typ av detektormaterial som kan mäta elektronövergångar inducerade av mörk materia. Syftet med denna rapport är att studera elektronövergångar i detektormaterial, med mål att undersöka vilka material som är bäst lämpade för mörk materia-detektion. Detta arbete är delvis teoretiskt och delvis numerisk optimering. Först presenteras den väsentliga teorin vilken leder upp till en ekvation som beskriver hur effektivt ett visst ämne är som detektormaterial. Därefter sker en numerisk analys som nyttjar befintlig materialdata för att jämföra de modellerade spridningshastigheterna för de fyra ämnena kisel, germanium, aluminium och kiseldioxid. Av de nämnda materialen fanns aluminium vara bäst lämpad för direkt detektion av lätta mörk-materia partiklar. För att få en djupare förståelse av optimala detektormaterial hade vidare studier kunnat göra ett försök att maximera spridningshastigheten via analys av enstaka faktorer och variabler, snarare än att jämföra olika material i deras helhet. Detta hade kunnat uppnås genom att använda en mer generell modell av energiförlustfunktionen som inte beror på befintlig materialdata.

# Innehållsförteckning

<b>1</b>	<b>Introduktion - Den osynliga partikeln</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Härledning av övergångshastighet <math>\Gamma</math></b>	<b>2</b>
2.1	Störningsteori och Fermis gyllene regel . . . . .	2
2.2	Korrelationsfunktionen och materials svar på störningar . . . . .	4
2.3	Övergångshastighet uttryckt i dielektrisk respons . . . . .	6
<b>3</b>	<b>Optimerad övergångshastighet vid begränsningar</b>	<b>8</b>
3.1	Modellering av den dielektriska responsfunktionen $\epsilon_L$ . . . . .	9
3.2	Hastighetsdistribution hos mörk materia enligt Maxwell-Boltzmannfördelningen . . . . .	10
<b>4</b>	<b>Numerisk beräkning av övergångshastigheten</b>	<b>11</b>
<b>5</b>	<b>Resultat av den numeriska analysen</b>	<b>13</b>
<b>6</b>	<b>Diskussion</b>	<b>16</b>
<b>7</b>	<b>Slutsats</b>	<b>18</b>
<b>A</b>	<b>Tidsoberoende Schrödingerekvationen</b>	<b>21</b>
<b>B</b>	<b>Bra-ket-notation</b>	<b>21</b>
<b>C</b>	<b>Python-kod för figurerna 3 och 4</b>	<b>22</b>

# Ordlista

<b>Notation</b>	<b>Betydelse</b>	<b>Förklaring</b>
DM	Dark Matter	Den teoretiskt påvisade materia som utgör 85% av universums massa.
ELF	Energiförlustfunktionen	En funktion, definierad som imaginärdelen av den negativa inversa dielektriska funktionen.
FDT	Fluctuation-dissipation theorem	En sats från statistisk mekanik som sammanlänkar störningar med jämviktssystem och respons-funktioner.
Mediator	Medlare, Förmedlare	En kvantifierad partikel eller kvasipartikel som agerar medlare ev en naturkraft i en interaktion mellan två växelverkande partiklar. Exempel på medlare är fotoner, gravitoner.
Scattering	Spridning	Partikelkollisioner som förändrar eller omfördelar systemets storheter
WIMPs	Weakly interacting massive particles	Svagt interagerande massiva partiklar var länge den typ av partikel som letades mest intensivt efter.

# 1 Introduktion - Den osynliga partikeln

Det senaste århundradet har kommit med en exponentiell ökning i människans förståelse av universum, men stora delar är fortfarande okända för oss. En av dessa delar som har väckt stort intresse i den moderna vetenskapsvärlden är mörk materia, även känt som "DM" efter engelskans "dark matter". Det första beviset för denna osynliga massa som verkligen accepterades i vetenskapsvärlden var det om galaktiska rotationskurvor [1]. Det var på 30-talet som Fritz Zwicky först skrev om en hypotetisk osynlig massa som han kallade mörk materia. Zwicky studerade en grupp av galaxer vid namn Comahopen, och upptäckte att de rörde sig snabbare än förväntat [2]. Förklaringen var att galaxer består av mer massa än den vi kan se. Vad denna massa består av har ännu inte förklarats, men i dagsläget är den mest accepterade teorin att den mörka materian består av hittills upptäckta fundamentalpartiklar som omsluter galaxer likt en halo [1]. Detta innebär att vår nuvarande modell av de grundläggande partiklarna är ofullständig. Upptäckten av radikalt nya partiklar vore otroligt spännande och hade ökat förståelsen för universums innehåll. Dessutom hade den möjliggjort en stor mängd ny vetenskap att bedrivas. Ett försök att göra just detta är SENSEI-projektet som leds av Fermilab i Illinois, USA [3].

Denna rapport syftar huvudsakligen till att introducera teorin för att möjliggöra letandet efter ett optimalt detektormaterial. Med hjälp av denna kunskap kommer sedan en numerisk analys att kunna utföras, där olika material kan jämföras med mål att finna bästa möjliga material för sökandet av lätt mörk materia. Fyra ämnen, kisel (Si), germanium (Ge), aluminium (Al) och kiseldioxid ( $\text{SiO}_2$ ) kommer att studeras. Deras övergångshastigheter, eller spridningshastigheter som det också kallas, kommer att tas fram och jämföras med ett optimalt maximumvärde och redovisas mot DM-massor mellan 10 keV - 1 GeV.

Faktumet att mörk materia inte interagerar med ljus försvårar detektionen. För att upptäcka partiklarna vill man utnyttja att de har en massa och således borde kunna kollidera med ett välkonstruerat detektormaterial med optimerade dielektriska egenskaper. En sådan kollision kan i teorin excitera eller till och med jonisera en elektron under rätt omständigheter [4]. För att utföra detta arbete har ett antal antaganden om den mörka materians karaktär gjorts. En av de mest avgörande av dessa är att enbart lätt mörk materia, sådan med en massa som motsvarar energi under 1 GeV, studeras. Tidigare forskning har fokuserat på DM av högre massa, ofta kallat WIMPs (svagt interagerande massiva partiklar), men de senaste åren har ett paradigmskifte ägt rum, då sökandet efter WIMPs inte gett några experimentella resultat [5]. Ett annat centralt antagande är att den mörka materian kan kollidera med material och via en mediator exciterar en elektron, och på så vis indirekt interagera via den elektromagnetiska kraften. Vidare förenklande antaganden inkluderar att temperaturen av detektormaterialet inte spelar roll, att vi har isotropisk spridning och att DM-partiklarna bara interagerar med elektroner.

För att modellera detektormaterial blir den ledande frågan att bestämma hur materialet växelverkar med mörk materia. Speciellt övergångshastigheten – hur elektrontillstånden i materialet ändras över en viss tid – i materialet som resultat av interaktioner med mörk materia måste beskrivas. Den fysikaliska principen bakom växelverkan mellan infallande DM-partiklar och de fria elektronerna i detektormaterialet är kollisioner. Träffar

kan under rätt förhållanden överföra tillräcklig rörelsemängd och energi för att excitera elektronerna till högre energitillstånd. Hur ofta elektroner exciteras beror i sin tur på hur täta elektronerna är, hur tät infallande mörk materia är, DM-partiklarnas massor och hastighetsfördelning, samt materialets känslighet och respons på störningar.

För att beskriva växelverkan måste en mångfald av tekniska områden sammanvävas. Härledningarna i arbetets teoretiska avsnitt kopplar samman kvantmekanik och statistisk mekanik med koncept från fasta tillståndets fysik, partikelfysik, och elektromagnetisk fältteori för att slutligen landa i en ekvation som utifrån ett materials dielektriska egenskaper kan beskriva elektroners spridningshastighet i materialet som respons till infallande mörk materia.

## 2 Härledning av övergångshastighet $\Gamma$

Detta avsnitt kommer ägnas till att systematiskt gå igenom de viktigaste teorierna, göra vissa härledningar och förklara viktiga koncept. Läsaren antas ha en grundläggande förståelse för kvantmekanik och bekantskap med dess notation, en kort genomgång av detta finnes annars i bilaga A respektive B. Genomgående i denna rapport används naturliga enheter, vilket är konvention inom partikelfysiken. Det innebär att ljusets hastighet  $c$ , Boltzmanns konstant  $k_B$  och den reducerade Planck-konstanten  $\hbar$  sätts till ett,

$$c = k_B = \hbar = 1. \quad (1)$$

Vidare är alla energier, rörelsemängder och massor uttryckta i elektronvolt, eV. För att konvertera massorna används den välkända ekvationen  $E = mc^2$ . I just den konverteringen har ljusets hastighet sitt vanliga värde  $c = 299\,792\,458 \text{ m s}^{-1}$ .

### 2.1 Störningsteori och Fermis gyllene regel

En DM-partikels kollision och påverkan på ett detektormaterial kan beskrivas matematiskt med kvantmekanikens störningsteori där ett resultat av teorin är Fermis gyllene regel. Störningsteori approximerar hur ett systems mätbara storheter påverkas då en liten störning appliceras på systemet [6]. Störningsteori innebär att man adderar justeringstermer till det ostörda problemet för att uppskatta hur exempelvis energitillstånden påverkas av störningen. I fallet med mörk materia agerar en inkommande DM-partikel som den nödvändiga störningen på systemet och orsakar således elektronövergångar.

Principen för detektion är, som tidigare nämnt, kollisioner mellan mörk materia och elektroner från mottagarmaterialet där elektronerna i materialet ursprungligen befinner sig i jämvikt. Sättet som ett jämviktssystem svarar på och upplever externa störningar beskrivs av "Fluctuation-Dissipation Theorem" som är en sats från statistisk mekanik [7]. Då satsen inte är huvudfokusen av arbetet kommer den inte förklaras djupgående, men den nämns eftersom den sammanlänkar teorin bakom detektionen.

Fermis gyllene regel beskriver övergångssannolikheten för elektroner som går från ett ursprungligt energitillstånd  $i$  till ett slutgiltigt tillstånd  $f$  då en liten störning läggs på systemet. Genom att skala upp övergångssannolikhet till ett makroskopiskt system kan övergångshastighet uttryckas. Denna utgör en praktisk beskrivning av hur effektivt ett

detektormaterial är på att faktiskt detektera en signal. Eftersom Fermis gyllene regel styr övergångssannolikheten utgår ett fullständigt uttryck för övergångshastigheten från regeln som skrivs enligt ekvationen nedan [8].

$$\omega_{\text{in} \rightarrow \text{out}} = 2\pi |\langle \text{out} | V | \text{in} \rangle|^2 \delta(E_{\text{out}} - E_{\text{in}}). \quad (2)$$

Där “in” och “out” är kombinerade tillstånd för både en elektron och en DM-partikel vilka innehåller information om elektronens energitillstånd, samt DM-partiklens rörelsemängd före respektive efter interaktionen. Energierna  $E_{\text{out}}$  och  $E_{\text{in}}$  är den sammanlagda energin mellan DM och elektronen innan respektive efter interaktionen.  $\langle \text{out} | V | \text{in} \rangle$  är ett matriselement som beskriver störningen från mörk materia på elektrondensiteten i målmaterialet. Det antas att interaktionen kan modelleras enligt:

$$\langle \text{out} | V | \text{in} \rangle = -\frac{g_\chi g_e}{V} F_{\text{DM}}(\mathbf{k}) \langle f | n(-\mathbf{k}) | i \rangle, \quad (3)$$

där  $i$  och  $f$  är energitillstånd för enbart elektronen,  $\mathbf{k}$  är överförda rörelsemängden i interaktionen, och  $\langle f | n(-\mathbf{k}) | i \rangle$  är ett matriselement för elektrondensiteten i detektormaterialet. Vidare kan  $F_{\text{DM}}(\mathbf{k})$  ses som mediators styrka i interaktionen,  $g_\chi$  är kopplingskonstanten mellan mediators och DM-partikeln.  $g_e$  är på liknande vis kopplingskonstanten mellan mediators och elektronen. Slutligen är  $V$  en volymfaktor som uppstår från normalisering av ursprungliga och slutliga tillstånd.

En mediator är en förmedlare av en naturkraft mellan två partiklar. Till exempel är fotonen förmedlare av den elektromagnetiska kraften. På samma sätt måste mörk materia interagera genom en mediatorpartikel. Styrkan för interaktionen antas kunna skrivas som

$$F_{\text{DM}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{k^2 + m_{\text{med}}^2}, \quad (4)$$

där  $m_{\text{med}}$  är mediators massa och  $\mathbf{k}$  är den överförda rörelsemängden. Om energitillstånden i deltafunktionen från ekvation (2) utvecklas kan Fermis gyllene regel nu uttryckas som

$$\omega_{\text{in} \rightarrow \text{out}} = 2\pi |\langle \text{out} | \bar{V} | \text{in} \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \Delta E_\chi). \quad (5)$$

Här är  $E_f$  den slutgiltiga elektronenergin,  $E_i$  den ursprungliga elektronenergin, och  $\Delta E_\chi$  skillnaden i DM-partiklens energi. Om ekvation (3) och (5) nu kombineras kan övergångssannolikheten från ett initialt tillstånd “in”, till ett slutgiltigt tillstånd “out” skrivas som:

$$\omega_{\text{in} \rightarrow \text{out}} = \frac{g_\chi^2 g_e^2}{V^2} |F_{\text{DM}}(\mathbf{k})|^2 |\langle f | n(-\mathbf{k}) | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \Delta E_\chi). \quad (6)$$

För att få fram det totala antalet elektronövergångar  $\Gamma$  måste Fermis gyllene regel inkorporera övergångar från alla elektron-energitillstånd  $i$ , till alla elektron-energitillstånd  $f$ ,

vid kollision med alla möjliga tredimensionella DM-rörelsemängder  $d^3\mathbf{k}$ . Då  $d^3\mathbf{k}$  utgör ett infinitesimalt volymselement bidrar alla slutliga DM-tillstånd inom elementet lika mycket. Summering över alla slutliga DM-tillstånd beror då på det totala antalet tillstånd och kan uttryckas  $Vd^3\mathbf{k}/(2\pi)^3$ . Övergångshastigheten skrivs nu som

$$d\Gamma = \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \omega_{\text{in} \rightarrow \text{out}} V \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (7)$$

där  $\exp(-\beta E_i)$  är Boltzmannfaktorn, inom vilken  $\beta = T^{-1}$ . Boltzmannfaktorn och partitionsfunktionen  $Z$  används då för att vikta alla energitillstånd efter sin sannolikhet. Summering över  $i$  med inbakad partitionsfunktion ger då medelvärdet av alla initiala elektrontillstånd. De slutgiltiga energitillstånden  $f$  summeras över på vanligt vis. Ersätts nu  $\omega_{\text{in} \rightarrow \text{out}}$  med ekvation (6) fås

$$d\Gamma = g_e^2 g_\chi^2 |F_{\text{DM}}(\mathbf{k})|^2 \frac{2\pi}{V} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} |\langle f | n(-\mathbf{k}) | i \rangle|^2 \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \delta(E_f - E_i + \Delta E_\chi). \quad (8)$$

För att uttrycka hela övergångshastigheten  $\Gamma$  måste integration utföras över hela rörelsemängdsrummet, men innan dess behöver matriselementet  $\langle f | n(-\mathbf{k}) | i \rangle$ , som beskriver överförda rörelsemängden till elektronerna i systemet uttryckas. Elektrondensitet kopplar starkt till materialspecifika egenskaper såsom korrelationsfunktionen, som visar sig ytterst användbara i att beskriva övergångshastigheten.

## 2.2 Korrelationsfunktionen och materials svar på störningar

När man handskas med system som innehåller stora mängder elektroner och DM-partiklar är det omöjligt att beskriva hela processen exakt. Medan kvantmekaniken beskriver väl vad som händer på mikroskopisk skala behövs statistisk mekanik för att öka omfattningen till hela systemet. Speciellt användbart i spridningsexperiment såsom kolliderande partiklar är så kallade korrelationsfunktioner. Dessa beskriver hur mikroskopiska variabler som exempelvis spinn och täthet genomsnittligt korrelerar inom ett material över rum och tid [9]. Målet är att beskriva hur elektrontätheten – och i sin tur elektrontillstånden – i detektormaterialet hänger samman. Således utgår arbetet från den så kallade “density-density correlation function”, som kommer att utgöra grunden i härledningen av spridningshastigheten. Korrelationsfunktionen för elektrontätheten skrivs som [9]

$$K_{nn}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{V} \langle n(\mathbf{k}, t) n(-\mathbf{k}, 0) \rangle. \quad (9)$$

Här är  $V$  en normeringskonstant kopplad till volymen,  $\mathbf{k}$  betecknar den till elektronerna överförda rörelsemängden, och  $n$  är en täthetsfunktion för elektroner. För att utvidga ekvationen från att enbart behandla elektroner i ett tillstånd, införs summeringar över tillstånden  $i$  och  $f$ . Vidare viktas elektronernas initiala energitillstånd utefter deras sannolikhet med Boltzmannfaktorn och partitionsfunktionen  $Z$ . Ekvation (9) skrivs då om som en summa över ursprungliga och slutliga energitillstånd och hur dessa korrelerar.



$$K_{nn}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{V} \sum_i \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \langle i|n(\mathbf{k}, t) \sum_f |f\rangle \langle f|n(-\mathbf{k}, 0)|i\rangle, \quad (10)$$

där  $i$  och  $f$  är förkortningar av  $\Psi_i$  och  $\Psi_f$ , som är egenfunktioner till hamiltonianen. Funktionernas egenvärden är energierna  $E_i$  och  $E_f$ . Härnäst kombineras summorna, vilket ger

$$K_{nn}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{V} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \langle i|n(\mathbf{k}, t)|f\rangle \langle f|n(-\mathbf{k}, 0)|i\rangle. \quad (11)$$

Ett mer praktiskt sätt att skriva ekvationen ovan vore ifall braketsen i slutet kunde kombineras till ett absolutbelopp i enlighet med följande ekvation:

$$\langle i|n(\mathbf{k}, 0)|f\rangle \langle f|n(-\mathbf{k}, 0)|i\rangle = \langle f|n(-\mathbf{k}, 0)|i\rangle^* \cdot \langle f|n(-\mathbf{k}, 0)|i\rangle = |\langle f|n(-\mathbf{k})|i\rangle|^2. \quad (12)$$

Omskrivningen kräver att braketsen skrivs om till varandras komplexkonjugat, vilket vore gjort ifall tidsberoendet kunde elimineras från  $\langle i|n(\mathbf{k}, t)|f\rangle$ . För att flytta ut tidsberoendet ur braketen utnyttjas några kvantmekaniska knep. Istället för en tidsberoende operator  $n(\mathbf{k}, t)$  kan det ses som om vågfunktionerna utvecklas i tiden likt

$$\langle i|n(\mathbf{k}, t)|f\rangle = \langle \Psi_i(t)|n(\mathbf{k}, 0)|\Psi_f(t)\rangle. \quad (13)$$

Synsätten är fysikaliskt ekvivalenta, och kallas "Heisenbergbild" för tidsberoende operatorer, och "Schrödingerbild" för tidsberoende vågfunktioner [6]. Vidare används tidsutvecklingsoperatoren  $\hat{U} = e^{-i\hat{H}t}$  [6] för att flytta ut tidsberoendet från braketen enligt

$$\langle \Psi_i(t)|n(\mathbf{k})|\Psi_f(t)\rangle = \langle \Psi_i(0)| \cdot e^{+iE_i t} n(\mathbf{k}) e^{-iE_f t} |\Psi_f(0)\rangle = e^{i(E_i - E_f)t} \langle i|n(\mathbf{k})|f\rangle. \quad (14)$$

Braketsen kan nu slås samman till ett absolutbelopp enligt ekvation (12) eftersom de utgör komplexkonjugat till varandra. Det som visats i ekvation (13) och (14) gör att ekvation (11) nu kan skrivas som

$$K_{nn}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{V} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} e^{i(E_i - E_f)t} |\langle f|n(-\mathbf{k})|i\rangle|^2. \quad (15)$$

Eftersom tidsberoendet nu endast finns i en exponentialfunktion kan uttrycket fouriertransformeras enligt standardtransformen för deltafunktionen. Teckenkonventionen är olika för transform av rums- och tidsvariabeln [10]. I detta fall utförs fouriertransformen med avseende på tidsvariabeln enligt

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} e^{i(E_i - E_f)t} = 2\pi \delta(\omega + E_i - E_f). \quad (16)$$

Fouriertransform gör då att ekvation (15) skrivs som

$$K_{nn}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2\pi}{V} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} |\langle f|n(-\mathbf{k})|i\rangle|^2 \delta(\omega + E_i - E_f). \quad (17)$$

Ekvation (17) påminner starkt om uttrycket för övergångshastigheten från ekvation (8) och kan substitueras in för att fortsätta härledningen av ett fullständigt uttryck för spridningshastigheten  $\Gamma$ . Korrelationsfunktionen kopplar dock vidare till viktiga materialegenskaper såsom den dielektriska funktionen.

Det slutliga uttrycket för DM-spridningen ska ta hänsyn till materialets dielektriska egenskaper, därav kommer korrelationsfunktionen  $K_{nn}$  uttryckas i den dielektriska responsen. Detta görs med hjälp av den så kallade energiförlustfunktionen (ELF), likt [4]. ELF:en beskriver farten på energiförlusten hos laddade partiklar som färdas igenom ett specifikt material. Den definieras som inversen av imaginärdelen av den longitudinella dielektriska responsen i materialet, alltså

$$\text{ELF}(\omega, \mathbf{k}) = \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_L(\omega, \mathbf{k})} \right]. \quad (18)$$

För att bestämma den dielektriska responsen numeriskt används Lindhard- och Mermin-modellerna, mer om detta finns i avsnitt 3.1.

Vidare introduceras ett nytt materialkoncept som kopplar starkt till korrelationsfunktionen och ELF:en, nämligen susceptibiliteten  $\Pi(\mathbf{k}, \omega)$ . Susceptibilitet betyder känslighet, och kan ses som ett mått på hur kraftigt ett material svarar på en extern störning. Enligt den så kallade "Fluctuation - dissipation" satsen [9], så är korrelationsfunktionen relaterad med den generella susceptibiliteten enligt

$$K_{nn}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{2}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \text{Im} \left[ \Pi(\mathbf{k}, \omega) \right]. \quad (19)$$

Enligt samma sats så är den dielektriska responsen relaterad till generella susceptibiliteten enligt

$$\frac{1}{\epsilon_L(\omega, \mathbf{k})} = 1 + \frac{4\pi\alpha_{\text{em}}}{k^2} \Pi(\omega, \mathbf{k}), \quad (20)$$

där  $\alpha_{\text{em}}$  är finstrukturkonstanten. På så sätt kan man uttrycka korrelationsfunktionen i den dielektriska responsfunktionen enligt

$$K_{nn}(\mathbf{k}, \omega) = \frac{k^2}{2\pi\alpha_{\text{em}}} \frac{1}{1 - e^{-\beta\omega}} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_L(\mathbf{k}, \omega)} \right]. \quad (21)$$

Notera att alla dielektriska materialegenskaper nu inkluderas i korrelationsfunktionen. En av dessa egenskaper är bland annat den elektromagnetiska summeringsregeln, som diskuteras mer i avsnitt 3. Summeringsregeln och ekvation (21) är även grunden till att ett uttryck för den teoretiska övre gränsen för spridningshastighet kan hittas.

## 2.3 Övergångshastighet uttryckt i dielektrisk respons

Avsnitt 2.1 avslutades efter ekvation (8) för att det ett uttryck för matriselementet  $\langle f|n(-\mathbf{k})|i \rangle$  behövdes. I avsnitt 2.2 motiverades det att korrelationsfunktionen, ekvation (17), kan substitueras in i ekvation (8) för att fortsätta härledningen av den fullständiga övergångshastigheten  $\Gamma$ . Vidare visades det i avsnitt 2.2 att korrelationsfunktionen kan uttryckas i den dielektriska responsfunktionen. Med denna robusta teoretiska grund kan en härledning av den fullständiga övergångshastigheten  $\Gamma$  uttryckt i den dielektriska responsen påbörjas.

Härledningen börjar med att återgå till övergångshastigheten  $d\Gamma$  som härleddes i 2.1 med Fermis gyllene regel,

$$d\Gamma = g_e^2 g_\chi^2 \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |F_{\text{DM}}(\mathbf{k})|^2 \frac{2\pi}{V} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} |\langle f | n(\mathbf{k}) | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \Delta E_\chi). \quad (22)$$

Genom att skriva om deltafunktionen enligt  $\delta(E_f - E_i + \Delta E_\chi) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\omega + \Delta E_\chi) \delta(\omega + E_i - E_f)$ , samt substituera in ekvation (17), kan  $d\Gamma$  förkortas enligt

$$\begin{aligned} d\Gamma &= g_e^2 g_\chi^2 \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |F_{\text{DM}}(\mathbf{k})|^2 \int d\omega \frac{2\pi}{V} \sum_{i,f} \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} |\langle f | n(\mathbf{k}) | i \rangle|^2 \delta(\omega + \Delta E_\chi) \delta(\omega + E_i - E_f) \\ &= g_e^2 g_\chi^2 \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |F_{\text{DM}}(\mathbf{k})|^2 \int d\omega K_{nn}(\mathbf{k}, \omega) \delta(\omega + \Delta E_\chi). \end{aligned} \quad (23)$$

För att få totala spridningshastigheten  $\Gamma$  integreras nu  $d\Gamma$  över hela rörelsemängdsrummet till

$$\Gamma = g_e^2 g_\chi^2 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |F_{\text{DM}}(\mathbf{k})|^2 \int d\omega K_{nn}(\mathbf{k}, \omega) (2\pi)^3 \delta(\omega + \Delta E_\chi). \quad (24)$$

DM-partiklarnas hastigheter är fördelade enligt någon godtycklig distribution,  $f(\mathbf{v})$ . För den totala spridningshastigheten multipliceras uttrycket med denna hastighetsfördelning,  $f(\mathbf{v})$  och integrerar över alla hastigheter enligt

$$\Gamma = g_e^2 g_\chi^2 \int d^3 v f(\mathbf{v}) \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} |F_{\text{DM}}(\mathbf{k})|^2 \int d\omega K_{nn}(\mathbf{k}, \omega) (2\pi)^3 \delta(\omega + \Delta E_\chi). \quad (25)$$

Slutligen införs en enhetsomvandlingsfaktor  $\rho_\chi / (\rho_T m_\chi)$ , där  $\rho_\chi$  är densiteten hos DM-partiklarna,  $m_\chi$  DM-partiklarnas massa och  $\rho_T$  densiteten hos målmaterialiet. Denna faktor översätter spridningshastigheten till per kilogram målmaterial, och substituerar in uttrycket för korrelationsfunktionen enligt ekvation (21).  $F_{\text{DM}}(\mathbf{k})$  uttrycks nu enligt ekvation (4) och omskrivningen

$$\Delta E_\chi = k^2 / (2m_\chi) - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} \quad (26)$$

görs. Uttrycket för den totala spridningshastigheten per kilogram detektormaterial kan därmed uttryckas som:

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{\rho_\chi}{\rho_T m_\chi} \frac{g_e^2 g_\chi^2}{2\pi \alpha_{em}} \int d^3 v f(\mathbf{v}) \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{k^2}{(m^2 + k^2)^2} \\ &\quad \times \frac{1}{1 - e^{-\beta\omega}} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_L(\omega, \mathbf{k})} \right] \delta\left(\omega + \frac{k^2}{2m_\chi} - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}\right). \end{aligned} \quad (27)$$

### 3 Optimerad övergångshastighet vid begränsningar

I det här avsnittet beräknas en övre gräns för spridningshastigheten,  $\Gamma_{\text{opt}}$ , under begränsning av summeringsreglerna. Därefter blir uppgiften att optimera spridningshastigheten genom att med hjälp av olika parametrar försöka komma så nära den här övre gränsen som möjligt. En förutsättning för att detta ska kunna utföras är genom användning av så kallade summeringsregler. Det finns flera olika sorters summeringsregler, vilka beskriver olika fysikaliska fenomen. De här reglerna innebär, förenklat, begränsningar och villkor för hur stora olika summeringar eller integraler kan bli. I rapporten används den elektromagnetiska summeringsregeln som beskrivs nedan.

Genom att använda sig av Kramers-Kronig-relationerna i [9] och uttrycket för susceptibiliteten i ekvation (20) kan man skriva:

$$1 - \frac{1}{\epsilon_L(0, \mathbf{k})} = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_L(\omega, \mathbf{k})} \right]. \quad (28)$$

Här går det även att använda att ELF:en är reell vid  $\omega = 0$ , eftersom att dess imaginära del är en udda funktion av  $\omega$  [9]. Det här kan sedan skrivas om till den elektromagnetiska summeringsregeln:

$$\int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_L(\omega, \mathbf{k})} \right] = \frac{\pi}{2} \left( 1 - \frac{1}{\epsilon_L(0, \mathbf{k})} \right). \quad (29)$$

Om temperaturen hos målmaterialet bortses från och integralen över hela frekvensrummet beräknas kan ekvation (27) förenklas till

$$\bar{\Gamma} \simeq \frac{2g_\chi^2 g_e^2}{e^2} \int d^3v f(\mathbf{v}) \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{(k^2 + m^2)^2} \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_L(\omega_{k,v}, k)} \right], \quad (30)$$

där  $\omega_{k,v} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - k^2/(2m_\chi)$ . Notera att  $\alpha_{\text{em}} = e^2/(4\pi)$  och  $\rho_\chi/(\rho_T m_\chi) = 1$  där  $\rho_\chi$  är densiteten för DM,  $\rho_T$  är densiteten för målmaterialet och  $\alpha_{em}$  finstruktur faktorn. Detta görs för att förenkla beräkningarna så mycket som möjligt samt att dessa termer försvinner i den numeriska analysen som utförs i nästa kapitel.

Hastighetsdistributionen approximeras som isotropisk och varje infallsriktning för DM-partikeln antas är lika sannolik. Samtidigt tas ett medelvärde över sannoliketsfördelningarna över alla infallsvinklar. Sedan kan sannolikhetsfördelningen uttryckas för DM-hastigheten i en dimension, parallell med riktningen för den infallande DM-partikeln,  $f_1(v_k)$ , där  $v_k$  är hastigheten i  $\mathbf{k}$ -riktningen, vilket gör att den genomsnittliga spridningshastigheten kan skrivas

$$\bar{\Gamma} \simeq \frac{2g_\chi^2 g_e^2}{e^2} \int_0^\infty \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k^2}{(k^2 + m^2)^2} \int dv_k f_1(v_k) \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_L(\omega_{k,v}, k)} \right], \quad (31)$$

där för ett givet  $k$ , frekvensen  $\omega_{k,v}$  nu endast beror av hastigheten i  $\mathbf{k}$ -riktningen,  $v_k$ , likt [11]. Genom att göra variabelbytet  $d\omega_{k,v} = k dv_k$  vilket fås från uttrycket för  $\omega_{k,v}$  fås följande uttryck:

$$\bar{\Gamma} = \frac{2g_\chi^2 g_e^2}{e^2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k}{(k^2 + m^2)^2} \int_0^\infty d\omega f_1(v_k(\omega)) \text{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_L(\omega, k)} \right]. \quad (32)$$

Nu användes summeringsregeln från ekvation(29) och det går att utnyttja att

$$\int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \omega f_1(v_k(\omega)) \operatorname{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_L(\omega, k)} \right] \leq \frac{\pi}{2} \left( 1 - \frac{1}{\epsilon_L(0, k)} \right) \max_\omega(\omega f_1(v_k(\omega))). \quad (33)$$

Nu betecknas att  $1 - \frac{1}{\epsilon_L(0, \mathbf{k})}$  som  $g_0(k)$  så fås, genom att kombinera ekvationerna (32) och (33):

$$\bar{\Gamma} \leq \frac{\pi g_\chi^2 g_e^2}{e^2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{k}{(k^2 + m^2)^2} g_0(k) \max_\omega(\omega f_1(v_k(\omega))). \quad (34)$$

En odefinierad form för hastighetsfördelningen  $f_1(v_k(\omega))$  användes för att evaluera ekvation (34). Det utnyttjas att en isotropisk hastighetsfördelning för en specifik hastighet  $v_\chi$  uppfyller  $f(v) \propto \delta(|v| - v_\chi)$  och det fås då att  $f_1(v_k) = \frac{1}{2v_\chi}$  då  $|v_k| \leq v_\chi$ . Det här gör även att  $\max_\omega f_1(v_k(\omega)) = \frac{k}{2} - \frac{k^2}{4m_\chi v_\chi}$  för  $k \leq 2m_\chi v_\chi$  [11]. Om en övre gräns även definieras för  $g_0(k)$  som  $g_0$  fås sedan med en masslös mediator ( $m_{\text{med}} = 0$ ), att ekvation (34) kan skrivas

$$\bar{\Gamma} \leq \frac{g_\chi^2 g_e^2 g_0}{4\pi e^2} m_\chi f_\chi = \bar{\Gamma}_{\text{opt}}, \quad (35)$$

vilket ger en teoretisk övre gräns för spridningshastigheten. En mer realistisk modell för  $f_1(v_k(\omega))$  är den trunkerade Maxwell-Boltzmannfördelningen, som presenteras i avsnitt 3.2, vilket erhåller:

$$\bar{\Gamma} \leq 0.68 \frac{g_\chi^2 g_e^2 g_0}{4\pi e^2} m_\chi v_\chi = \bar{\Gamma}_{\text{opt}}. \quad (36)$$

Ekvation (32) kan därefter separeras som integraler över rörelsemängd och rymdvinkel. Jämförs denna med ekvation (36) fås slutligen

$$\begin{aligned} \bar{\Gamma} &= \frac{2g_\chi^2 g_e^2}{e^2} \int dk \int \frac{d\omega}{\omega} \overbrace{\left[ \frac{k^3 \omega}{(k^2 + m^2)^2} f_1(v_k(\omega)) \right]}^{I(\omega, k)} \times \int \frac{d\Omega}{(2\pi)^3} \operatorname{Im} \left[ \frac{-1}{\epsilon_L(\omega, k)} \right] \\ &\leq 0.68 \frac{g_\chi^2 g_e^2 g_0}{4\pi e^2} m_\chi v_\chi, \end{aligned} \quad (37)$$

där  $I(\omega, k)$  är den så kallade integralfunktionen. Denna ekvation kommer att användas i den numeriska analysen. Innan övergångshastigheten kan modelleras måste de två kvarvarande pusselbitarna – den dielektriska funktionen respektive hastighetsdistributionen – uttryckas.

### 3.1 Modellering av den dielektriska responsfunktionen $\epsilon_L$

Den dielektriska responsfunktionen  $\epsilon_L(\omega, \mathbf{k})$ , kan beräknas med ett flertal metoder, en av dem är Lindhardmodellen som anses vara den enklaste modellen [4]. Enligt [4] kan  $\epsilon_L(\omega, \mathbf{k})$  skrivas om till:

$$\epsilon_{\text{Lin}}(\omega, k; \omega_p) = 1 + \frac{3\omega_p^2}{k^2 v_F^2} \left[ y_1\left(\frac{\omega}{kv_F}, \frac{k}{2mv_F}\right) + iy_2\left(\frac{\omega}{kv_F}, \frac{k}{2mv_F}\right) \right], \quad (38)$$

där

$$y_1(u, z) = \frac{1}{2} + \frac{1}{8z} [g(z - u) + g(z + u)], \quad (39)$$

$$y_2(u, z) = \begin{cases} \frac{\pi}{2} & z + u < 1 \\ \frac{\pi}{8z}(1 - (z - u)^2) & |z - u| < 1 < z + u \\ 0 & |z - u| > 1 \end{cases} \quad (40)$$

och

$$g(x) = (1 - x^2) \log \left| \frac{1 + x}{1 - x} \right|. \quad (41)$$

Här är  $\omega_p = \sqrt{4\pi\alpha_{\text{em}}n_e/m_e}$  plasmafrekvensen,  $n_e$  elektronernas nummerdensitet,  $m_e$  elektronmassan,  $\alpha_{\text{em}}$  finstruktur faktorn och  $v_F = k_F/m_e = \left(\frac{3\pi\omega_p^2}{4\alpha_{\text{em}}m_e^2}\right)^{1/3}$  är fermihastigheten. En nackdel med modellen, som tas upp i [4], är att även om den är relativt enkel så ger den en plasmonbredd som är lika med noll, vilket ger problem vid användning på halvledare.

För att lösa Lindhardmodellens bristande hantering av plasmontoppen införs Merminmodellen. Detta är en förlängning av Lindhardmodellen som är konstruerad på så vis att den tar hänsyn till plasmontoppens bredd  $\gamma$  samtidigt som den förhåller sig till den elektromagnetiska summeringsregeln, ekvation (29). Merminmodellen uttrycker den dielektriska funktionen som [4]

$$\epsilon_{\text{Mer}}(\omega, k; \omega_p, \gamma) = 1 + \frac{(1 + i\gamma/\omega)(\epsilon_{\text{Lin}}(k, \omega + i\gamma) - 1)}{1 + (i\gamma/\omega)\frac{\epsilon_{\text{Lin}}(k, \omega + i\gamma) - 1}{\epsilon_{\text{Lin}}(k, 0) - 1}} \quad (42)$$

vilket avsiktligt reduceras till  $\epsilon_{\text{Lin}}$  då plasmontoppen sätts till 0:

$$\epsilon_{\text{Mer}}(\omega, k; \omega_p, \gamma = 0) = \epsilon_{\text{Lin}}(k, \omega; \omega_p). \quad (43)$$

## 3.2 Hastighetsdistribution hos mörk materia enligt Maxwell-Boltzmannfördelningen

Eftersom den mörka materia tänks vara isotermiskt och isotropiskt fördelad runt universum är det naturligt att göra antagandet att partiklarnas hastigheter förhåller sig till Maxwell-Boltzmannfördelningen [12]. Det är en sannolikhetsmodell för hur hastigheterna är fördelade hos partiklarna i en ideal gas, där de ingående gaspartiklarna befinner sig i termodynamisk jämvikt med sin omgivning. Det är även naturligt att begränsa fördelningen till hastigheter lägre än den galaktiska flykthastigheten  $v_{\text{esc}}$ , eftersom DM-partiklar med en högre hastighet än denna inte är bundna till galaxen. Denna trunkerade hastighetsfördelning kan enligt [11] uttryckas som

$$p(v) = \begin{cases} \frac{1}{N_0} e^{-(v+v_e)^2/v_0^2} & v < v_{\text{esc}} + v_e \\ 0 & v > v_{\text{esc}} + v_e \end{cases} \quad (44)$$

där  $v$  är en DM-partikelns hastighet,  $v_e$  jordens hastighet i galaxens referenssystem och  $v_0$  den typiska hastigheten för den mörka materian som genomsyrar galaxen. Notera att den övre gränsen för den mörka materians hastighet förlängs med jordens hastighet eftersom arbetet utgår från det galaktiska referenssystem.  $N_0$  är här en normaliseringsfaktor

$$N_0 = \pi^{3/2} v_0^2 \left[ v_0 \operatorname{erf} \left( \frac{v_{\text{esc}}}{v_0} \right) - \frac{2v_{\text{esc}}}{\sqrt{\pi}} e^{-v_{\text{esc}}^2/v_0^2} \right]. \quad (45)$$

Då det antas en longitudinell dielektrisk funktion,  $\epsilon_L$ , är det önskvärt att reducera hastighetsfördelningen till en dimension för att bättre passa modellen som sökes. Detta uppfylls genom en integration över hastighetskomponenterna i två godtyckliga riktningar  $v_x$  och  $v_y$ , samt rymdvinkeln  $\Omega$  som

$$p_1(v_z) = \frac{1}{4\pi} \int dv_x dv_y d\Omega p(v), \quad (46)$$

där  $v_z$  är den återstående hastighetskomponenten. Enligt [11] kan den trunkerade Maxwell-Boltzmannfördelningen i en dimension explicit uttryckas som

$$p_1(v_z) = \begin{cases} \frac{\pi^{3/2} v_0^3}{4v_e N_0} \left( \operatorname{erf} \left( \frac{v_e - v_z}{v_0} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{v_e + v_z}{v_0} \right) \right) - \frac{\pi v_0^2}{N_0} e^{-v_{\text{esc}}^2/v_0^2} & v_z < v_{\text{esc}} - v_e \\ \frac{\pi^{3/2} v_0^3}{4v_e N_0} \left( \operatorname{erf} \left( \frac{v_{\text{esc}}}{v_0} \right) + \operatorname{erf} \left( \frac{v_e - v_z}{v_0} \right) \right) - \frac{\pi v_0^2}{2N_0} \frac{v_e + v_{\text{esc}} - v_z}{v_e} e^{-v_{\text{esc}}^2/v_0^2} & v_{\text{esc}} - v_e < v_z < v_{\text{esc}} + v_e \\ 0 & v_z > v_{\text{esc}} + v_e \end{cases} \quad (47)$$

## 4 Numerisk beräkning av övergångshastigheten

Arbetet har till stor del utförts rent teoretiskt, men resultaten har producerats genom numeriska beräkningar. Analysen har genomförts med hjälp av Python, där koden DarkELF som presenteras av [13] har använts som ett skal och för att ta fram ELF:en, som definieras i ekvation (18). Koden som användes för att få fram figurer i resultat delen finnes bredvid som en github länk och även i bilaga C. För att göra beräkningar med Lindhard- och Merminmodellernas dielektriska funktioner nyttjas data som har samlats av [14].

Länk till koden

<https://github.com/QU35T5/DarkELF>

Målet med den numeriska delen av arbetet är att ta fram en relation mellan  $\bar{\Gamma}_{\text{opt}}$  (ekvation (36)) och  $\bar{\Gamma}$  (ekvation (37)). Förhållandet mellan dessa är beroende av detektormaterial och den mörka materians massa  $m_\chi$ , och en kvot mellan ekvationerna så nära 1 som möjligt önskades. Detta eftersom  $\bar{\Gamma}_{\text{opt}}/\bar{\Gamma} \approx 1$  hade inneburit att spridningshastigheten för materialet i fråga vore nära den teoretiskt optimala spridningshastigheten.

Nedan presenteras vilka förenklande metoder som användes för att behandla datan numeriskt. Först och främst antogs en masslös mediator, alltså att  $m_{\text{med}} = 0$  i ekvation

(37). Integralen över rymdvinkeln beräknades över hela enhetssfären, vilket resulterade i en faktor  $4\pi$ . Dubbelintegralen över  $\omega$  och  $k$  behandlar ELF:en, som räknas ut med hjälp av Merminmodellen vilken presenteras i ekvation (42). Integranden  $I(\omega, k)$  räknas ut med hjälp av en trunkerad Maxwell-Boltzmann distribution för hastighetsfördelningen hos DM-partiklarna, enligt avsnitt 3.2. Den slutliga ekvationen för  $\bar{\Gamma}_{\text{opt}}/\bar{\Gamma}$  målas sedan upp mot olika värden på  $m_\chi$ .

Innan integralen kunde utföras bestämdes integrationsgränserna för  $\omega$  och  $k$ . Beräkningarna utgick från ekvation (26):

$$\omega = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - \frac{k^2}{2m_\chi}, \quad (48)$$

från vilket en minsta möjliga hastighet  $v_{\text{min}}$  som fortfarande tillåter en elektronexcitation kan fås enligt

$$v_{\text{min}} = \frac{\omega}{k} + \frac{k}{2m_\chi} < v_{\text{max}}, \quad (49)$$

där den maximala hastigheten  $v_{\text{max}} = v_{\text{esc}} + v_e$  med  $v_{\text{esc}} = 600 \text{ km s}^{-1}$  är den galaktiska flykthastigheten och  $v_e = 240 \text{ km s}^{-1}$  är jordens hastighet i det galaktiska referenssystemet och  $v_0 = 230 \text{ km s}^{-1}$  är den typiska hastigheten för mörk materia i galaxen [15]. Ur detta kan  $k_{\text{min}}$  och  $k_{\text{max}}$  lösas ut enligt

$$\frac{\omega}{k} + \frac{k}{2m_\chi} - v_{\text{max}} < 0 \Rightarrow k^2 - 2m_\chi v_{\text{max}} k + 2m_\chi \omega < 0 \quad (50)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} k_{\text{min}} = v_{\text{max}} m_\chi - \sqrt{v_{\text{max}}^2 m_\chi^2 - 2m_\chi \omega} \\ k_{\text{max}} = v_{\text{max}} m_\chi + \sqrt{v_{\text{max}}^2 m_\chi^2 - 2m_\chi \omega} \end{cases} \quad (51)$$

För att undvika att roten blir imaginär sätts en övre gräns för  $\omega$  enligt

$$\omega_{\text{max}} = \frac{v_{\text{max}}^2 m_\chi}{2}. \quad (52)$$

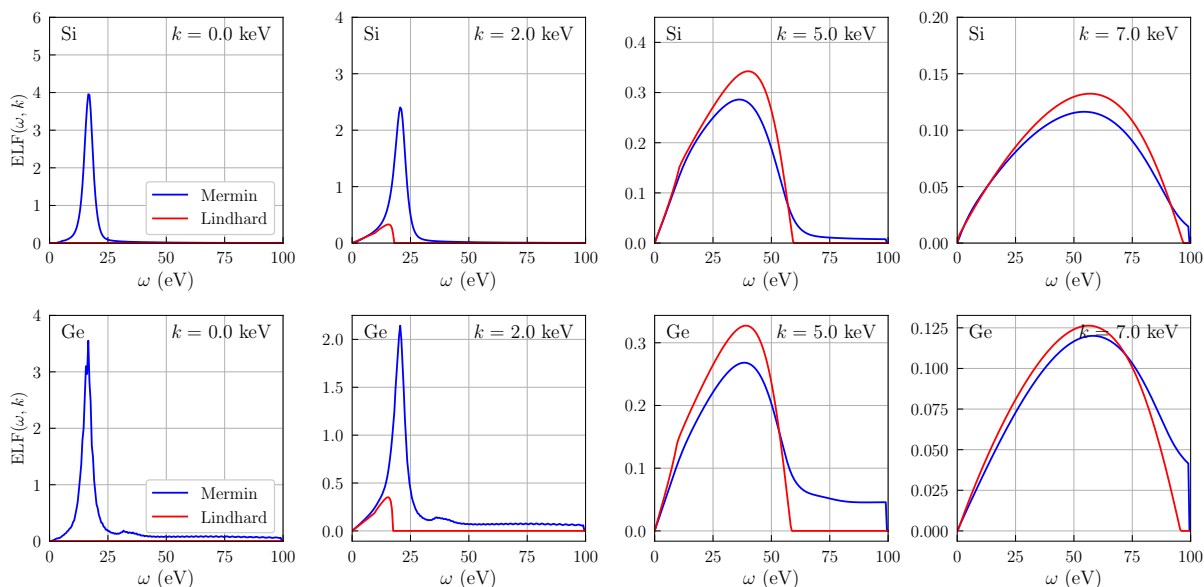
Den undre gränsen  $\omega_{\text{min}}$  kan inte bestämmas analytiskt på samma vis, utan sattes tills vidare till 0 eV. Denna gräns blev sedan materialspecifik och diskuteras i mer detalj i avsnitt 6 nedan.

$\bar{\Gamma}$  har även tagits fram direkt med hjälp av DarkELF-koden från [13] som även kan hittas i vår forkade github. Koden inkluderar en funktion, `R_electron()`, som beräknar spridningshastigheten för materialet i fråga med hjälp av den data som [14] har samlat in.



## 5 Resultat av den numeriska analysen

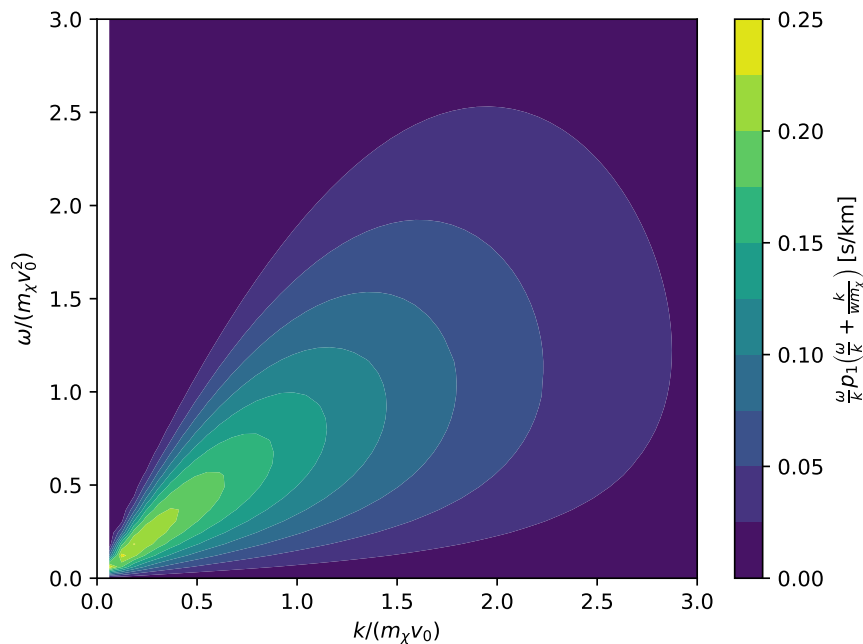
Nedan kommer resultaten av den numeriska analysen presenteras med hjälp av figurer som tagits fram i Python med hjälp av DarkELF-koden. För att bekräfta att de olika elementen i den implementerade övergångshastigheten är korrekta har två av de större delarna målats upp separat. En av dem är energiförlustfunktionen, ELF, som visas i figur 1. Där ritas ELF:en som funktion av frekvensen  $\omega$ , vid fyra olika värden på rörelsemängden  $k = 0, 2, 5$  och  $7$  eV enligt ekvation (18).



Figur 1: Grafer som redovisar ELF:en  $\text{Im}[\frac{-1}{\epsilon_L(\omega, \mathbf{k})}]$  för kisel (Si, övre raden) och germanium (Ge, nedre raden). De röda linjerna representerar ELF:en som funktion av energin  $\omega$  beräknad i enlighet med Lindhardmodellen, och de blå med Merminmodellerna. Varje kolumn nyttjar olika konstanta rörelsemängder  $k$ .

Den andra delen som kontrollerades med hjälp av Python är den endimensionella trunkerade Maxwell-Boltzmannfördelningen från ekvation (47). Fördelningen visas i figur 2, vilket är ett nivådiagram av integranden  $I(\omega, k)$  från ekvation (37) inom vilken fördelningen ingår. Notera att mediatorn antas vara masslös, vilket innebär att  $m_{\text{med}} = 0$ . Diagrammet utgår från hastigheterna  $v_{\text{esc}} = 600 \text{ km s}^{-1}$ ,  $v_e = 240 \text{ km s}^{-1}$  och  $v_0 = 230 \text{ km s}^{-1}$ .

Som nämns i avsnitt 4 har två olika metoder använts för att finna övergångshastigheten. I figur 3 har metoden som har inspirerats av [11], som presenteras i ekvation (37), ritats mot olika massor för den mörka materian. Som kan ses i figuren fås förhållanden för de uppritade ämnena mellan 2-100 vid sina minimumpunkter.



Figur 2: Nivådiagram av integranden  $I(\omega, k)$  från ekvation (37) som demonstrerar hur den trunkerade Maxwell-Boltzmannfördelningen i en dimension (ekvation 47) beror på  $\omega$  och  $k$ , där  $v_0 = 230 \text{ km s}^{-1}$  och  $m_\chi$  är DM-massan.

Figur 4 visar förhållandet mellan den optimala övergångshastigheten från ekvation (36) och den hastighet  $\bar{\Gamma}$  som kan räknas ut med koden DarkELF som skapats av [13].

För båda metoderna användes följande värden på  $\omega_{\min}$ :

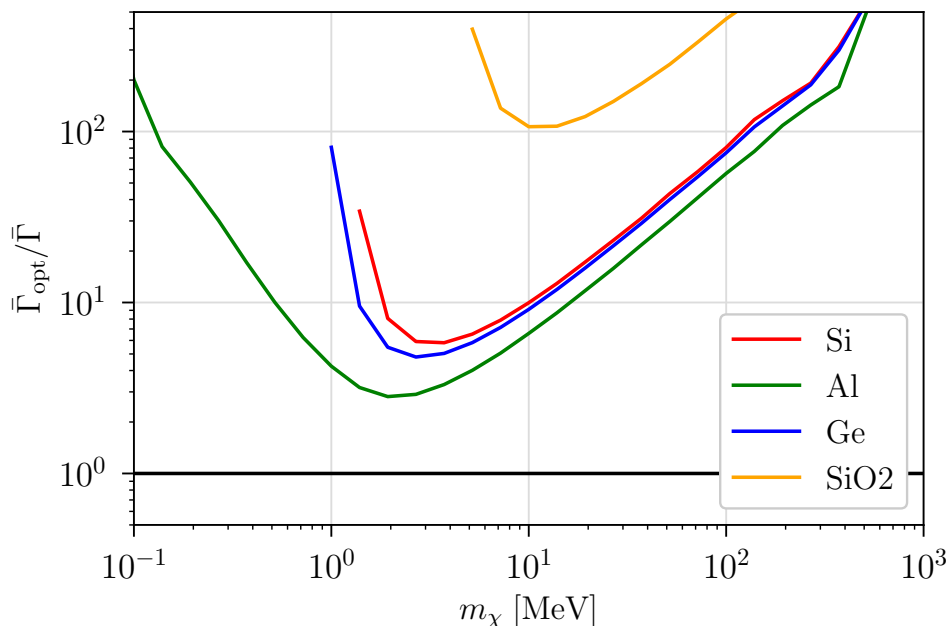
$$\text{Si} : \omega_{\min} = 2e^- = 4,7 \text{ eV}$$

$$\text{Ge} : \omega_{\min} = 2e^- = 3,6 \text{ eV}$$

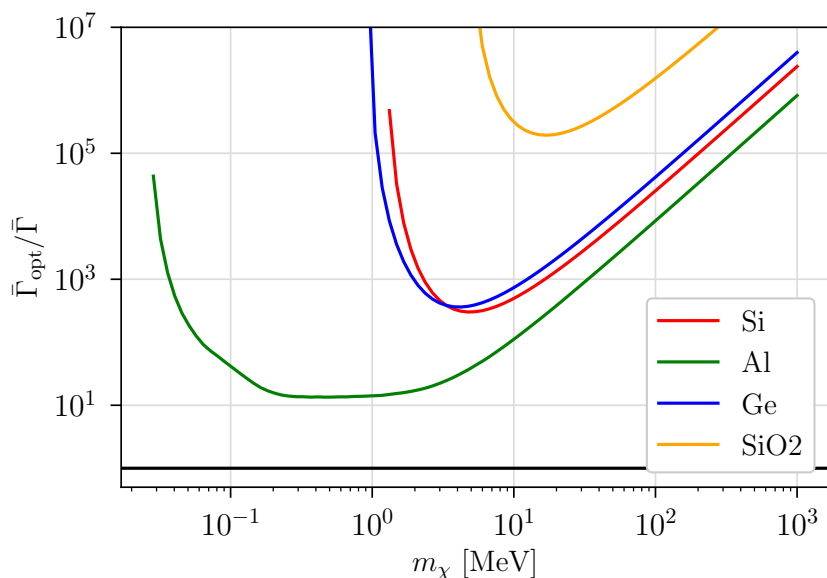
$$\text{Al} : \omega_{\min} = 10 \text{ meV}$$

$$\text{SiO}_2 : \omega_{\min} = 2E_{\text{gap}} = 16,8 \text{ eV}$$

Resultaten från dessa två olika metoder pekar alltså mot att aluminium vore, av de undersökta materialen, det optimala för att detektera mörk materia med en massa runt 1 MeV. SiO<sub>2</sub> framstår enligt de använda metoderna som den sämsta av kandidatmaterialen.



Figur 3: Förhållandet  $\bar{\Gamma}_{opt}/\bar{\Gamma}$  på y-axeln för ämnena kisel (Si), germanium (Ge), aluminium (Al) och kiseldioxid ( $\text{SiO}_2$ ) är plottat för olika DM-massor  $m_\chi$  som beräknats enligt ekvation (37). Ju närmare förhållandet är 1, markerat av den svarta linjen, desto mer optimalt är materialet som detektor för DM.  $\omega_{min}$  för ämnena var: 4,7 eV för Si, 3,6 eV för Ge, 10 meV för Al och 16,8 eV för  $\text{SiO}_2$ .



Figur 4: På x-axeln är förhållandet  $\bar{\Gamma}_{opt}/\bar{\Gamma}$  för ämnena kisel (Si), germanium (Ge), aluminium (Al) och kiseldioxid ( $\text{SiO}_2$ ) plottat för olika DM-massor  $m_\chi$  som räknats ut med hjälp av DarkELF [13]. Ett resultat så nära 1 (svart linje) som möjligt visar på ett optimalt material.  $\omega_{min}$  för ämnena var: 4,7 eV för Si, 3,6 eV för Ge, 10 meV för Al och 16,8 eV för  $\text{SiO}_2$ .

## 6 Diskussion

Resultaten från de två olika metoderna skiljer sig på två markanta sätt. En av skillnaderna är storleken på förhållandet mellan den numeriskt uträknade övergångshastigheten och den optimala, och den andra är för vilka massor  $m_\chi$  som förhållandet har sitt minimum. Avvikelsena kan bero på flertalet små missar i kodningen, eller något mer fundamentalt fel i hur vi analytiskt räknat ut övergångshastigheten  $\bar{\Gamma}$ . Resultaten som presenteras i figur 3 är omkring 100 gånger mindre än de i figur 4. Figur 4 har använt metoden som presenteras av [4] och matchar därmed föga förvånande mycket väl med deras resultat. Den andra markanta skillnaden är för vilken DM-massa  $m_\chi$  som förhållandet har sin minimumpunkt. Figur 3 visar att, för detektion med aluminium, kisel och germanium, vore en DM-massa på omkring 2-4 eV optimalt. För kiseldioxid hamnar den optimala massan på ungefär 10 eV med samma metod. Figur 4 visar, för Si, Ge och SiO<sub>2</sub>, en förflyttning på ungefär 2-3 eV högre optimala massor än förgående bild. För aluminium däremot är kurvan mer utdragen och påvisar en god övergångshastighet för DM-massor mellan 0,1-3 eV.

Vid en jämförelse med de källor som starkast influerat detta projekt ([4, 11]) upptäcks en del olikheter. Börjar vi med att studera figur 3 i förhållande till figur 2 från artikeln [11] är den mest uppenbara skillnaden den för SiO<sub>2</sub>. Deras resultat visar kiseldioxid som det bästa alternativet för alla massor i intervallet, och särskilt i intervallet  $m_\chi = 0,1 - 3 \text{ eV}$ . Den figur som vi har räknat fram med deras metod (figur 3) visar däremot att kiseldioxid är det sämsta av de redovisade materialen i hela det undersökta intervallet. Övriga olikheter mellan de två ovannämnda figurerna är storleksordningen, där vår numeriskt framtagna graf visar på mer än tio gånger bättre övergångshastigheter än deras. Det är svårt att identifiera vad den tydliga skillnaden beror på.

Vid jämförelse av vår figur 4 med figur 3, Massless mediator, ur artikel [4], är likheterna större. Medan vår figur redovisar en övergångshastighet, visar deras figur ett tvärsnitt. De har därmed en annan skala på y-axeln, men kurvornas former kan ändå jämföras. Här är förhållandena mellan kurvorna relativt lika i de båda figurerna, den största skillnaden ligger i att vår figur redovisar Al som bästa detektormaterial oavsett DM-massa  $m_\chi$ .

Som nämnts ovan kan dessa olikheter bero på en rad saker. Att vi kunnat rekonstruera figurerna för ELF:en och för hastighetsdistributionen talar emot att koden skulle vara felaktig. Jämförs figur 2 med figur 1 ur artikeln [11] ser vi en nästan identisk fördelning, vilket pekar mot att delen  $I(\omega, k)$  ur ekvation (37) är korrekt implementerad. Figur 1 visar att ELF:en är korrekt, då den jämförs med figur 1 ur artikeln [4]. Det kan däremot ha uppstått fel när dessa delar sätts samman till en funktion om funktionerna skulle vara inkompatibla; detta ses dock inte som speciellt troligt då de bygger på samma teori.

Den framtagna teoretiska övre gränsen för spridningshastigheten,  $\bar{\Gamma}_{\text{opt}}$  bygger på två viktiga antaganden. Det första antagandet är att vi kan bortse från målmaterialets temperatur. Detta görs för att vi antar att vår modell för detektion av DM endast behöver hålla i en laborationsmiljö där temperaturen hos målmaterialet är så pass låg att antalet termiskt exciterade elektroner är försumbart liten. Det andra antagandet är att DM-hastighetsfördelningen antas vara isotropisk. Det här är en grov förenkling av verkligheten då universum sällan är helt isotropiskt, då naturliga fluktuationer och variationer som i till exempel densitet, är ständigt förekommande. Dessa antaganden inför en viss osäkerhet

i vår modell om den skulle användas för riktiga experiment för detektion av DM.

En av de största svårigheterna med den numeriska analysen var att komma fram till de rätta integrationsgränserna för ekvation (37). Det vore teoretiskt möjligt att integrera över hela rummet både för  $\omega$  och  $k$ , dock gav detta en övergångshastighet som var lika med noll. Detta resonerar vi var på grund av att de numeriska metoderna med dessa integreringsintervall inte hade möjlighet att hitta de relativt små områden som faktiskt tillåter detektion av mörk materia. Området över vilket integralen beräknas behövdes alltså analytiskt minskas, resultatet av minskningen presenteras i avsnitt 4. Den undre gränsen  $\omega_{\min}$  insågs vara materialspecifik, och visade sig ha en stor inverkan på övergångs-sannolikheten  $\bar{\Gamma}$ . De gränser som slutligen användes för att ta fram figurerna 3 och 4 är de minsta energier som fortfarande tillåter en övergång. För kisel och germanium används  $2e^-$ , alltså energin som krävs för att excitera två elektron-hål-par. För aluminium användes  $\omega_{\min} = 10 \text{ meV}$  i enlighet med [4], och för kiseldioxid användes  $\omega_{\min} = 2E_{\text{gap}} = 16,8 \text{ eV}$ . Vidare diskussion på ämnet kommer nu att fokusera på kisel. Det var för oss inte en självklarhet vad för undre gräns som skulle användas, eller hur mycket en liten skiftning i gränsen kunde påverka det slutliga resultatet. När  $\omega_{\min}$  först sattes till noll blev förhållandet  $\bar{\Gamma}_{\text{opt}}/\bar{\Gamma}$  nära ett, vilket ansågs vara orimligt. I de källor som studerats ([4], [11]) var det lägsta redovisade förhållandet cirka 200. Ett alternativ som diskuterades för den nedre gränsen var bandgapsenergin. För Si är  $E_{\text{gap}} = 1,17 \text{ eV}$ . Denna gräns tar dock inte hänsyn till de skärmningseffekter (eng: "screening") som uppstår som en störning och förvränger resultaten. Om istället två elektron-hål-par behöver upptäckas fås en undre gräns  $\omega_{\min} = 4E_{\text{gap}}$ . Denna formel användes för att räkna ut gränserna för kisel och germanium. För aluminium, som inte är en halvledare och därför inte har någon bandgapsenergi, togs gränserna istället för att matcha värdena från litteraturen [4, 11]. För  $\text{SiO}_2$  användes  $\omega_{\min} = 2E_{\text{gap}}$  då  $4E_{\text{gap}}$  hade lämnat ett väldigt litet intervall för  $\omega$  att integreras över. Det är möjligt att metoden för att beräkna de undre gränserna kraftigt påverkat den slutgiltiga spridningshastigheten. En mer konsekvent metod som kunde användas för alla fyra substanser skulle med fördel ha använts för att beräkna  $\omega_{\min}$ .

För att få fram figurerna 3 och 4 har Merminmodellen använts. GPAW och Lindhard är två andra modeller som kan användas för att beräkna energiförlustfunktionen (ELF). Som presenterades i avsnitt 3.1 bygger Merminmodellen på Lindhardmodellen. GPAW, som är en del av DarkELF-koden, är en ändå mer sofistikerad modell. Hade vi haft mer tid att sätta oss in i den GPAW-metoden, är den ett alternativ för att förbättra resultatet vid ett andra försök.

Med mer tid tillgodo hade vi försökt undersöka inverkan som individuella materialegenskaper har på förhållandet  $\bar{\Gamma}_{\text{opt}}/\bar{\Gamma}$ . En djupare insikt i spridningshastighetens beteende hade tillåtit oss att analytiskt minimera  $\bar{\Gamma}_{\text{opt}}/\bar{\Gamma}$ , och därefter teoretiskt söka fram ett optimalt material baserat på deras redan kända egenskaper. Istället var vi i det här arbetet begränsade till att jämföra olika material i deras helhet med hjälp av den data som [14] har samlat in.

## 7 Slutsats

Denna rapport har sammanfattat de centrala teoretiska begreppen som krävs för att använda direkt detektion av mörk materia med en massa under 1 GeV. Den teoretiska delen av arbetet leder upp till introduktionen av begreppet övergångshastighet, som beskriver hur många händelser av något som sker i en bestämd mängd av ett ämne, under ett visst tidsintervall. I fallet med DM-detektion beskriver övergångshastigheten hur många elektroner som den mörka materian kan excitera i ett detektormaterial. En numerisk analys av fyra olika ämnen; kisel, germanium, aluminium och kiseldioxid, har utförts och med hjälp av två olika metoder har övergångshastigheten räknats ut vid olika massor för DM-partiklarna.

Syftet med denna studie var att introducera teori som kan hjälpa till att finna ett optimalt detektormaterial för mörk materia, så att sökandet efter dessa osynliga partiklar kan bli så effektivt som möjligt.

Resultatet från båda de redovisade metoderna var att det optimala detektormaterialet för mörk materia är aluminium. Det visar också att en DM-massa mellan 0,1 – 10 MeV hade varit absolut enklast att hitta med metoden som presenteras.

Även om studien inte hade möjlighet att undersöka specifikt vad som gör ett material till en god kandidat för DM-detektion, så kunde den på ett konsekvent vis bestämma vilken av de undersökta ämnena som är bäst lämpad som detektormaterial i ett framtida forskningsexperiment.

Det här projektet belyser fältets interdisciplinära karaktär, studien om mörk materia kopplar samman bland annat kvantfysik, statistisk mekanik, ellära, fasta tillståndet fysik och fältteori. Komplexiteten som sammankopplingen bidrar till kan vara en av anledningarna att den mörka materian fortsätter vara en av universums olösta mysterier. Större kunskap inom fälten hade möjliggjort studerandet av vilka materialspecifika egenskaper som ämnar sig bäst hos ett detektormaterial. Vidare forskning med teorin som presenteras i denna uppsats hade kunnat inkludera att en större mängd ämnen undersöktes. Ett större urval substanser hade tillåtit att mönster hos effektiva detektormaterial kunnat upptäckas, och att ännu mer passande detektormaterial kunnat hittas. Det vore intressant om framtida studier på ämnet fastställer de specifika egenskaperna ett material behöver för att optimal spridningshastighet. Kunskaper om nyckelegenskaper för spridningshastighet hade kunnat användas för att framställa ett konstmaterial, specifikt optimerat för att upptäcka just mörk materia med en massa under 1 GeV.

## Referenser

- [1] Dan Bertone, Gianfranco och Hooper. History of dark matter. *Reviews of Modern Physics*, 90(4), okt 2018.
- [2] Heinz Andernach and Fritz Zwicky. English and Spanish Translation of Zwicky's (1933) The Redshift of Extragalactic Nebulae, 2017.
- [3] Michael Crisler, Rouven Essig, Juan Estrada, Guillermo Fernandez, Javier Tiffenberg, Miguel Sofo Haro, Tomer Volansky, and Tien-Tien Yu. SENSEI: First Direct-Detection Constraints on Sub-GeV Dark Matter from a Surface Run. *Physical Review Letters*, 121(6), aug 2018.
- [4] Simon Knapen, Jonathan Kozaczuk, and Tongyan Lin. Dark matter-electron scattering in dielectrics. *Physical Review D*, 104(1), jul 2021.
- [5] Michael J. Baker. Dark matter models beyond the WIMP paradigm. *Nuovo Cim. C*, 40(5):163, 2017.
- [6] D.J. Griffiths D.F. Schroeter. *Introduction To Quantum Mechanics*. Cambridge, Reed College, Oregon, 3 edition, 2018.
- [7] W. Wu and J. Wang. Generalized Fluctuation-Dissipation Theorem for Non-equilibrium Spatially Extended Systems. okt 2020.
- [8] JJ Sakurai and J Napolitano. Modern quantum mechanics, 2: nd edition. *Person New International edition*, 2011.
- [9] Jenő Sólyom. *Fundamentals of the Physics of Solids, Volume III*. Springer, 2010.
- [10] P. Richards. *On Fourier Transforms and Delta Functions*. [pdf], 2004.
- [11] Robert Lasenby and Anirudh Prabhu. DM-electron scattering in materials: sum rules and heterostructures, 2021.
- [12] Christopher McCabe. Astrophysical uncertainties of dark matter direct detection experiments. *Phys. Rev. D*, 82:023530, Jul 2010.
- [13] Simon Knapen, Jonathan Kozaczuk, and Tongyan Lin. Python package for dark matter scattering in dielectric targets. *Physical Review D*, 105(1), jan 2022.
- [14] Yang Sun, Huan Xu, Bo Da, Shi feng Mao, and Ze jun Ding. Calculations of Energy-Loss Function for 26 Materials. *Chinese Journal of Chemical Physics*, 29(cjcp1605110):663, 2016.
- [15] Riccardo Catena, Timon Emken, Nicola A. Spaldin, and Walter Tarantino. Atomic responses to general dark matter-electron interactions. *Physical Review Research*, 2(3), aug 2020.
- [16] Gunnar Ohlén, Johnny Kvistholm, and Joakim Kvistholm. *Kvantvärldens fenomen: teori och begrepp*. Studentlitteratur, 2005.

[17] B. Zweibach. *DIRAC'S BRA AND KET NOTATION*. 2013.

[18] A. Borrelli. *Dirac's bra-ket notation and the notion of quantum state*. 2013.



## A Tidsberoende Schrödingerekvationen

Hamiltonoperatoren  $\hat{\mathcal{H}}$  beskriver energierna för ett kvantmekaniskt tillstånd och är summan av tillståndets kinetiska och potentiella energier. För en partikel som påverkas av en potential skrivs hamiltonoperatoren som

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t). \quad (53)$$

där  $V(\mathbf{r}, t)$  är den potentiella energin som beror på partikelns position  $\mathbf{r}$  och tiden  $t$  [8]. Sannolikhetstätheten är

$$P = |\phi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (54)$$

och är alltid lika med 1, den beskriver sannolikheten att partikeln befinner sig vid en viss position. För det specifika syftet att beskriva sannolikhetstätheten för detektorer används istället notationen,

$$\rho(\mathbf{x}, t) \quad (55)$$

Genom användning av ekvation (54) fås väntevärdet av operatoren  $\hat{A}$ ,

$$\langle \hat{A}(t) | \hat{A}(t) \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \langle \psi(r) | \hat{A} | \psi(t) \rangle \langle \psi(r) | \hat{A} | \psi(t) \rangle. \quad (56)$$

vid tillfället där Hamiltonianen är oberoende av tiden är den skriven som  $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}(r)$ . Lösningen antas sedan ha en separabel vågfunktion med en rumsdel och en tidsdel,

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}) T(t) \quad (57)$$

$$i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{\partial}{\partial t} T(t) = \frac{\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r})}{\varphi(\mathbf{r})} \quad (58)$$

vänstra led är en funktion av tiden och högra led en funktion av rummet, för att likheten skall gälla måste båda sidorna vara lika med konstanten  $E$ ,

$$\frac{\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r})}{\varphi(\mathbf{r})} = E \quad (59)$$

som ger att högerled blir

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) = E \varphi(\mathbf{r}) \quad (60)$$

detta är den **tidsberoende** schrödinger ekvationen. Djupgående härledning finnes här [16].

## B Bra-ket-notation

Inom kvantfysiken används ofta bra-ket-notation, även känt som Dirac-notation. Rent matematiskt är notationen ett alternativt sätt att uttrycka vektorer med hjälp av de

speciella parenteserna ”bra”  $\langle |$  och ”ket”  $| \rangle$ . Ket används för att beteckna en komplexvärd kolumnvektor

$$|a\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_i \end{bmatrix} \quad (61)$$

som befinner sig i ett abstrakt vektorrum  $V$  och bra för att beteckna en motsvarande radvektor

$$\langle a| = [a_1^* \ a_2^* \ \dots \ a_i^*], \quad (62)$$

i dualrummet  $V^*$ . Notera att  $\langle a|$  är det konjugerade transponatet av  $|a\rangle$ , vilket även är känt som ett Hermiteskt konjugat. Den inre produkten av en bra  $\langle \alpha|$  och en ket  $|a\rangle$  skrivs som  $\langle \alpha|a\rangle$  och ges av

$$\langle \alpha|a\rangle = \alpha_1^* a_1 + \alpha_2^* a_2 + \dots + \alpha_n^* a_n. \quad (63)$$

Bra-ket-notationen används när man inom kvantfysiken talar om olika kvanttillstånd. Givet ett kvantmekaniskt system innebär  $|\Psi\rangle$  då att  $\Psi$  är ett tillstånd som systemet kan finna sig i. Bra representerar här istället en linjär avbildning från vektorrummet  $V$  till det komplexa rummet  $\mathbb{C}$ , och bör därmed tolkas som en funktion som agerar på en ket snarare än en vektor själv [17].

En av bra-ket-notationens styrkor är att parenteserna  $\langle |$  och  $| \rangle$  visar vilken typ av objekt det är som de innesluter, snarare än det inneslutna objektet själv. Detta resulterar i en frihet att döpa tillstånd till praktiskt taget vad som helst, såsom siffror, tecken, symboler eller hela ord, utan att riskera förvirring. Exempelvis kan de två tillstånden för Schrödingers katt (som kan vara död eller vid liv) kallas för  $|dead\rangle$ , respektive  $|alive\rangle$  [18].

## C Python-kod för figurerna 3 och 4

```

1 #Initialization
2 %matplotlib inline
3
4 import sys, os
5 import numpy as np
6 import math
7 from scipy.integrate import quad,dblquad
8 import matplotlib.pyplot as plt
9 import matplotlib.ticker
10 from matplotlib import rc, rcParams
11 import matplotlib.cm as cm
12 from mpl_toolkits.axes_grid1 import make_axes_locatable
13 from IPython.display import clear_output
14
15 plt.rcParams['axes.grid'] = True
16 plt.rcParams['grid.color'] = 'gainsboro'
17
18 # Make use of TeX\ufeff
19 rc('text',usetex=True)

```

```

20 # Change all fonts to 'Computer Modern'
21 rc('font',**{'size':14, 'family':'serif','serif':['Times New Roman']})
22 rc('xtick.major', size=5, pad=7)
23 rc('xtick', labels=15)
24 rc('ytick.major', size=5, pad=7)
25 rc('ytick', labels=15)
26
27 # this needs to point to the folder where darkelf.py is stored
28 work_dir = os.getcwd()
29 sys.path.append(work_dir+"/..")
30 plotdir=work_dir+"/plots/"
31
32 from darkelf import darkelf, targets
33
34 #Velocities [km/s]
35 v_0 = 230
36 v_e = 240
37 v_esc = 600
38 c = 299792.458
39 v_max = (v_esc + v_e)/c
40
41 #Floating point error handling
42 eVtoInvS = 1.5192674e15
43 yeartosec = 86400 * 365
44 eVtoInvYr = eVtoInvS * yeartosec
45
46 #Truncated Maxwell-Boltzmann Distribution
47 N_0 = np.pi**(3/2)*v_0**2*(v_0*math.erf(v_esc/v_0) - \
48     2*v_esc/np.sqrt(np.pi)*np.exp(-v_esc**2/v_0**2))
49 a = (np.pi**(3/2)*v_0**3)/(4*v_e*N_0)
50
51 def p1(v_z):
52     return (a*(math.erf((v_e-v_z)/v_0) + math.erf((v_e+v_z)/v_0) - \
53         (np.pi*v_0**2/N_0)*np.exp(-v_esc**2/v_0**2)))*(v_z <
54         v_esc - v_e) + \
55         (a*(math.erf(v_esc/v_0) + math.erf((v_e-v_z)/v_0)) - \
56         (np.pi*v_0**2)/(2*N_0)*(v_e + v_esc - v_z)/v_e*np.exp(-
57         v_esc**2/v_0**2)) * \
58         (v_esc - v_e < v_z < v_esc + v_e)
59
60 #Data import
61 Si = darkelf(target='Si',filename='Si_mermin.dat',phonon_filename="
62     Si_epsphonon_data6K.dat")
63 Ge = darkelf(target='Ge',filename='Ge_mermin.dat',phonon_filename="
64     Ge_epsphonon_data2K.dat")
65 Al = darkelf(target='Al',filename='Al_mermin.dat')
66 SiO2 = darkelf(target='SiO2',filename='SiO2_mermin.dat',phonon_filename=
67     'SiO2_epsphonon_e.dat')

```

Listing 1: Initialisering av koden

```

1 #Figure 1 - ELF for Si and Ge
2 #(Routine made by Brian Campbell-Deem, Simon Knapen, Jonathan Kozaczuk,
3     Tongyan Lin and Ethan Villarama)

```

```

4 kval = np.linspace(10,1e4,400)*1e-3
5 oval = np.linspace(0.01,80,160)
6 Nomega = len(oval)
7 Nk = len(kval)
8
9 z1_grid = np.zeros((Nomega,Nk))
10 z2_grid = np.zeros((Nomega,Nk))
11 ELF_Lindhard = np.zeros((Nomega,Nk))
12 ELF_mermin = np.zeros((Nomega,Nk))
13 ELF_gpaw = np.zeros((Nomega,Nk))
14
15 for j in range(Nk):
16     for i in range(Nomega):
17         ELF_gpaw[i][j] = Si.elf(oval[i],kval[j]*1e3)
18         ELF_mermin[i][j] = Si.elf(oval[i],kval[j]*1e3)
19         ELF_Lindhard[i][j] = Si.elf(oval[i],kval[j]*1e3,method="
Lindhard")
20
21 fig, axs = plt.subplots(2, 4,figsize=(14, 7))
22 rc('xtick', labels=14)
23 rc('ytick', labels=14)
24 plt.subplots_adjust(top = 0.93, bottom=0.01, hspace=0.1, wspace=0.2)
25
26 # first row, plots as function of omega
27 #####
28 # omega and k grid
29 olist=np.linspace(0,100,200)
30 klist=[ 1.0, 2.0e3, 5.0e3 , 7.0e3 ]
31
32 # loop over the momenta
33 for i in range(len(klist)):
34     k=klist[i]
35
36     # calculate ELF as function of omega
37     #ELF_gpaw=list(map(lambda om: Si.elf(om,k),olist))
38     ELF_mermin=list(map(lambda om: Si.elf(om,k),olist))
39     ELF_Lindhard=list(map(lambda om: Si.elf(om,k,method="Lindhard"),
olist))
40
41     # plot
42     #axs[0][i].plot(olist,ELF_gpaw,
43     #               label="GPAW",
44     #               color="Indigo")
45     axs[0][i].plot(olist,ELF_mermin,
46                   label=r"Mermin",
47                   color="blue")
48     axs[0][i].plot(olist,ELF_Lindhard,
49                   label=r"Lindhard",
50                   color="red")
51     axs[0][i].set_xlabel(r"$\omega$ (eV)",font=16)
52     axs[0][i].set_xlim([0,100])
53     axs[0][i].tick_params(bottom=True,direction='in',which='both')
54
55 axs[0][0].set_ylim([0,6])
56 axs[0][1].set_ylim([0,4])
57 axs[0][2].set_ylim([0,0.45])

```

```

58 axs[0][3].set_ylim([0,0.2])
59 axs[0][0].legend(loc="lower right",framealpha=1)
60 axs[0][0].set_ylabel(r'$\mathrm{ELF}(\omega,k)$')#set_ylabel(r'$\mathrm{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega,k)}\right]$',fontsize=16)
61
62 # add some decoration
63 for i in range(4):
64     axs[0][i].text(0.05,0.9,"Si",fontsize=16,transform = axs[0][i].
        transAxes)
65     axs[0][i].text(0.95,0.9,r"$k=$ "+str(np.round(klist[i]*1e-3,0))+
        keV",transform = axs[0][i].transAxes,fontsize=16,horizontalalignment=
        "right")
66
67
68
69 # second row, plots as function of k
70 #####
71
72 # omega and k grid
73 olist=np.linspace(0,100,200)
74 klist=[ 1.0, 2.0e3, 5.0e3 , 7.0e3 ]
75
76 # loop over the momenta
77 for i in range(len(klist)):
78     k=klist[i]
79
80     # calculate ELF as function of omega
81     #ELF_gpaw=list(map(lambda om: Ge.elf(om,k),olist))
82     ELF_mermin=list(map(lambda om: Ge.elf(om,k),olist))
83     ELF_Lindhard=list(map(lambda om: Ge.elf(om,k,method="Lindhard"),
        olist))
84
85     # plot
86     #axs[1][i].plot(olist,ELF_gpaw,
87     #               label="GPAW",
88     #               color="Indigo")
89     axs[1][i].plot(olist,ELF_mermin,
90                   label=r"Mermin",
91                   color="blue")
92     axs[1][i].plot(olist,ELF_Lindhard,
93                   label=r"Lindhard",
94                   color="red")
95     axs[1][i].set_xlabel(r"$\omega$ (eV)",fontsize=16)
96     axs[1][i].set_xlim([0,100])
97     axs[1][i].tick_params(bottom=True,direction='in',which='both')
98     plt.grid()
99
100 #axs[0].set_ylim([0,6])
101 #axs[1].set_ylim([0,4])
102 #axs[2].set_ylim([0,0.45])
103 axs[1][0].set_ylim([0,4])
104 #axs[3].set_ylim([0,0.2])
105 axs[1][0].legend(loc='lower right',framealpha=1)
106 axs[1][0].set_ylabel(r'$\mathrm{ELF}(\omega,k)$')#(r'$\mathrm{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\omega,k)}\right]$',fontsize=16)
107 #axs[0].set_xscale("Log")

```

```

108 #axs[1][0].set_yscale("Log")
109
110 # add some decoration
111 for i in range(4):
112     axs[1][i].text(0.05,0.9,"Ge",fontsize=16,transform = axs[1][i].
113     transAxes)
114     axs[1][i].text(0.95,0.9,r"$k=$ "+str(np.round(klist[i]*1e-3,0))+
115     "keV",transform = axs[1][i].transAxes,fontsize=16,horizontalalignment=
116     "right")
117
118 fig.tight_layout()
119
120 #Saves figure as a pdf-file to the 'figures' folder
121 fig.savefig('figures/ELF.pdf',bbox_inches='tight')

```

Listing 2: Koden som skapar figur 1

```

1 #Figure 2 - Contour plot for velocity distribution
2
3 #Constants
4 m_chi = 1e6 #Arbitrary DM-mass
5 omega = np.linspace(0,3*m_chi*v_0**2)
6 k      = np.linspace(0,3*m_chi*v_0)
7
8 #Contour graph routine
9 np.seterr(divide='ignore', invalid='ignore')
10 [K,W] = np.meshgrid(k,omega)
11
12 X = np.zeros((len(K), len(K[0])))
13 Y = np.zeros((len(K), len(K[0])))
14 contour_func = np.zeros((len(K), len(K[0])))
15
16 for i in range(len(K)):
17     for j in range(len(K[0])):
18         contour_func[i][j] = W[i][j]/K[i][j]*p1(W[i][j]/K[i][j]
19         + K[i][j]/(2*m_chi))
20         X[i][j] = K[i][j]/(v_0*m_chi)
21         Y[i][j] = W[i][j]/(v_0**2*m_chi)
22
23 plt.contourf(X,Y,contour_func,9)
24 plt.xlabel(r'$k/(m_\chi v_0)$')
25 plt.ylabel(r'$\omega/(m_\chi v_0^2)$')
26 cbar = plt.colorbar()
27 cbar.set_label(r'$\frac{\omega}{k}p_1\left(\frac{\omega}{k} + \frac{k}{\omega m_\chi}\right) \mathrm{; [s/km]}$')
28 plt.grid(False)
29 plt.show()
30
31 #Saves figure as a pdf-file to the 'figures' folder
32 plt.savefig('figures/velocitydist.pdf',bbox_inches='tight')

```

Listing 3: Koden som skapar figur 2.

```

1 #Figure 3 - Gamma-ratio using our derived gamma-bar
2
3 #Solid angle

```

```
4 solid = 1/(2*np.pi**2)#1/(2*np.pi)**3
5
6 #I(w,k) for massless mediator
7 def I(w,k):
8     return (w/k*p1(w/k + k/(2*m_chi)))/w
9
10 #Lower energy bounds [eV]
11 w_min_al = .01
12 w_max_al = 1
13 w_min_si = 4.7
14 w_min_ge = 3.6
15 w_min_sio2 = 16.8
16
17 #Gamma-opt
18 def gamma_opt(m_X):
19     return 0.68/(4*math.pi)*m_X*v_0/c
20
21 #Integral of I(w,k)ELF(w,k)
22 def Si_integrand():
23     f = lambda k, w: I(w,k)*Si.elf(w,k,method='grid') / eVtoInvYr
24     return dblquad(f,w_min_si,w_max,k_min,k_max)[0] * eVtoInvYr
25
26 def Ge_integrand():
27     f = lambda k, w: I(w,k)*Ge.elf(w,k,method='grid') / eVtoInvYr
28     return dblquad(f,w_min_ge,w_max,k_min,k_max)[0] * eVtoInvYr
29
30 def Al_integrand():
31     f = lambda k, w: I(w,k)*Al.elf(w,k,method='grid') / eVtoInvYr
32     return dblquad(f,w_min_al,w_max_al,k_min,k_max)[0] * eVtoInvYr
33
34 def SiO2_integrand():
35     f = lambda k, w: I(w,k)*SiO2.elf(w,k,method='grid') / eVtoInvYr
36     return dblquad(f,w_min_sio2,w_max,k_min,k_max)[0] * eVtoInvYr
37
38 #Gamma-bar
39 def Si_gamma_bar():
40     return 2*Si_integrand()*solid*c
41
42 def Ge_gamma_bar():
43     return 2*Ge_integrand()*solid*c
44
45 def Al_gamma_bar():
46     return 2*Al_integrand()*solid*c
47
48 def SiO2_gamma_bar():
49     return 2*SiO2_integrand()*solid*c
50
51 #DM-mass
52 mX = np.logspace(2,9,50) #0.01 - 1000 MeV
53
54 Si_ratio = []
55 Al_ratio = []
56 Ge_ratio = []
57 SiO2_ratio = []
58
59 #If the code has already been executed, data from previous session can
```

```

    be re-loaded
60 Si_ratio    = np.load('OurData/Gamma-bar Si.npy')
61 Ge_ratio    = np.load('OurData/Gamma-bar Ge.npy')
62 Al_ratio    = np.load('OurData/Gamma-bar Al.npy')
63 SiO2_ratio  = np.load('OurData/Gamma-bar SiO2.npy')
64 '''
65 #Routine for calculating gamma_opt/gamma-bar for all different mX
66 step = 0
67 for x in mX:
68     step = step + 1
69     clear_output(wait=True)
70     print('Working... (',step, '/',len(mX), ')',sep='')
71
72     m_chi = x
73     w_max = (v_max**2 * m_chi / 2)
74     k_min = lambda w: (v_max*m_chi - np.sqrt(v_max**2 * m_chi**2 - 2 *
m_chi * w))
75     k_max = lambda w: (v_max*m_chi + np.sqrt(v_max**2 * m_chi**2 - 2 *
m_chi * w))
76
77     Si.update_params(mX = m_chi,mediator = 'massless')
78     Al.update_params(mX = m_chi,mediator = 'massless')
79     Ge.update_params(mX = m_chi,mediator = 'massless')
80     SiO2.update_params(mX = m_chi,mediator = 'massless')
81
82     Si_ratio.append(gamma_opt(m_chi)/Si_gamma_bar())
83     Al_ratio.append(gamma_opt(m_chi)/Al_gamma_bar())
84     Ge_ratio.append(gamma_opt(m_chi)/Ge_gamma_bar())
85     SiO2_ratio.append(gamma_opt(m_chi)/SiO2_gamma_bar())
86
87 clear_output(wait=True)
88
89 #Saves data for future use
90 np.save('OurData/Gamma-bar Si.npy',Si_ratio)
91 np.save('OurData/Gamma-bar Ge.npy',Ge_ratio)
92 np.save('OurData/Gamma-bar Al.npy',Al_ratio)
93 np.save('OurData/Gamma-bar SiO2.npy',SiO2_ratio)
94 '''
95 mX = mX/1e6
96
97 #Graphing
98 plt.loglog(mX,Si_ratio,color = 'red',label = 'Si')
99 plt.loglog(mX,Al_ratio,color = 'green',label = 'Al')
100 plt.loglog(mX,Ge_ratio,color = 'blue',label = 'Ge')
101 plt.loglog(mX,SiO2_ratio,color = 'orange',label = 'SiO2')
102 plt.xlabel(r'$m_{\mathrm{\chi}} \mathrm{\;} [MeV]$',)
103 plt.ylabel(r'$\bar{\Gamma}_{\mathrm{opt}}/\bar{\Gamma}$')
104 plt.legend(framealpha=1)
105 plt.grid(color='gainsboro')
106 plt.xlim([1e-1,1e3])
107 plt.ylim([.5e0,5e2])
108 plt.axhline(1,0,1e4,color='black')
109 plt.show
110
111 #Saves figure as a pdf-file to the 'figures' folder
112 plt.savefig('figures/Gamma-ratio using Gamma-bar.pdf',bbox_inches='tight

```



```

    ')

```

Listing 4: Koden som skapar figur 3

```

1 #Figure 4 - Gamma-ratio using target.R_electron
2
3 scalar = 916.667 #g_chi^2*g_e^2/e^2
4
5 #Gamma-opt
6 def gamma_opt(m_X):
7     return 0.68/(4*math.pi)*m_X*v_0/c*scalar
8
9 #If the code has already been executed, the previous data can be
    reloaded instead
10 R_Si = np.load('OurData/R_Si.npy')
11 R_Ge = np.load('OurData/R_Ge.npy')
12 R_Al = np.load('OurData/R_Al.npy')
13 R_SiO2 = np.load('OurData/R_SiO2.npy')
14 mX = np.load('OurData/R_mX.npy')
15
16 '''
17 #DM mass
18 mX = np.logspace(4,9,100) #0.01 - 1000 MeV
19
20 R_Si = []
21 R_Al = []
22 R_Ge = []
23 R_SiO2 = []
24
25 #Routine for calculating Gamma_opt/R for each mX
26 step = 0
27 for x in mX:
28     step = step + 1
29     clear_output(wait=True)
30     print('Working... (',step, '/',len(mX),')',sep='')
31
32     Si.update_params(mX = x,mediator = 'massless')
33     Al.update_params(mX = x,mediator = 'massless')
34     Ge.update_params(mX = x,mediator = 'massless')
35     SiO2.update_params(mX = x,mediator = 'massless')
36
37     R_Si.append(gamma_opt(x)/Si.R_electron())
38     R_Al.append(gamma_opt(x)/Al.R_electron(threshold=0.01,withscreening=
    True))
39     R_Ge.append(gamma_opt(x)/Ge.R_electron())
40     R_SiO2.append(gamma_opt(x)/SiO2.R_electron())
41
42 mX = mX/1e6
43
44 #Saves data for future use
45 np.save('OurData/R_Si.npy',R_Si)
46 np.save('OurData/R_Ge.npy',R_Ge)
47 np.save('OurData/R_Al.npy',R_Al)
48 np.save('OurData/R_SiO2.npy',R_SiO2)
49 np.save('OurData/R_mX.npy',mX)
50 '''

```

```
51 #Graphing routine
52 plt.loglog(mX,R_Si,color='red',label='Si')
53 plt.loglog(mX,R_Al,color='green',label='Al')
54 plt.loglog(mX,R_Ge,color='blue',label='Ge')
55 plt.loglog(mX,R_SiO2,color='orange',label='SiO2')
56 plt.axhline(1,0,1e4,color='black')
57 plt.xlabel(r'$m_{\mathrm{\chi}} \text{ [MeV]}$')
58 plt.ylabel(r'$\bar{\Gamma}_{\mathrm{opt}}/\bar{\Gamma}$')
59 plt.ylim([0.5,1e7])
60 plt.legend(framealpha=1)
61 plt.grid(color='gainsboro')
62 plt.show
63
64 #Saves the figure as a pdf-file to the 'figures' folder
65 plt.savefig('figures/Gamma-ratio using R.pdf',bbox_inches='tight')
```

Listing 5: Koden som skapar figur 4