

1.1. Le modèle TTM.

1.1.1. Description du modèle.

TTM est une méthode physico-numérique permettant de prendre en compte une partie des propriétés électroniques dans un calcul de dynamique moléculaire classique [5]. Il consiste à coupler une équation de la chaleur dédiée aux électrons (Eq. 1) à une équation du mouvement des ions (Eq. 2 et 3) :

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \vec{\nabla} [K_e(T_e) \vec{\nabla} T_e] - g(T_e - T_i) + S_e(x, y, z, t) \quad (1)$$

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -\vec{\nabla}_i E(\{\vec{r}_i\}) + \xi m_i \vec{v}_i + S_i(x, y, z, t) \quad (2)$$

$$\xi = \frac{gV(T_e - T_i)}{\sum_{i=0}^N m_i v_i^2} \quad (3)$$

$\vec{\nabla}$ désigne l'opérateur gradient. Les notations des équations (1-3) sont définies dans le tableau 1.

Grandeur	Définition	Unité
t	temps	s
x, y, z	Coordonnées cartésiennes	m
$C_e(T_e)$	Capacité thermique électronique pouvant dépendre de T_e	$J \times m^{-3} \times K^{-1}$
T_e	Température des électrons	K
T_i	Température des ions	K
K_e	Conductivité thermique électronique	$J \times s^{-1} \times m^{-1} \times K^{-1}$
g	Constante de couplage	$J \times s^{-1} \times m^{-3} \times K^{-1}$
$S_e(x, y, z, t)$	Terme source électronique	$J \times s^{-1} \times m^{-1}$
$S_i(x, y, z, t)$	Terme source ionique	$J \times m$
m_i	Masse de l'ion i	kg
\vec{r}_i	Position de l'ion i	m
\vec{v}_i	Vitesse de l'ion i	$m \times s^{-1}$
$E(\{\vec{r}_i\})$	Energie potentielle	J
V	Volume de la boîte de simulation	m^3
N	Nombre de particules de la boîte de simulation	-

Tableau 1. Notations des équations 1-3.

La résolution de l'équation de la chaleur (Eq. 1) est numérique et implique la superposition d'un maillage tridimensionnel sur la configuration ionique. La résolution de l'équation du mouvement des ions utilise un algorithme standard (Verlet-vitesse, *a priori*).

En fonction du problème traité lors de la simulation, le pas de temps de l'équation de la chaleur peut être plus petit ou plus grand que le pas de temps correspondant à l'équation du mouvement des ions.

1.1.2. Contraintes.

1. TTM doit être compatible avec tous les potentiels actuels et futurs d'ExaStamp.
2. TTM doit être compatible avec la combinaison de conditions aux limites périodiques, libre et mur.
3. TMM doit être compatible avec la structure AMR du code ExaStamp.
4. Les termes sources seront définis de façon tabulée. Il faut donc prévoir leur lecture ainsi qu'une méthode d'interpolation sur un échantillonnage pouvant être irrégulier.