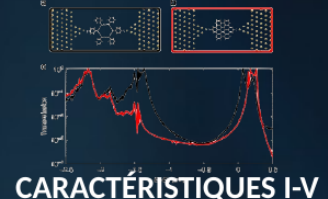
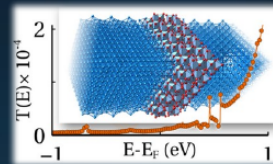
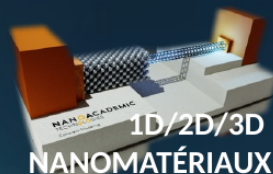


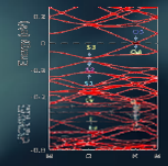
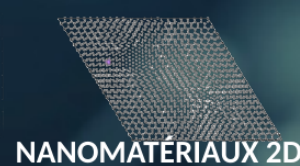
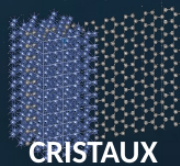
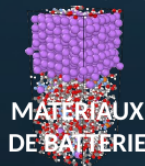
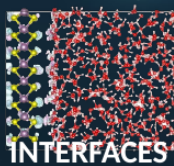
Solveurs atomistiques avancés pour vos projets de R&D

Nanoacademic développe des solveurs DFT avancés pour les matériaux émergents. Licences et services-conseils en sciences des matériaux et en modélisation de dispositifs quantique.

NanoDCAL (Nano DFT CALculator) est une implémentation LCAO de NEGF-DFT pour modéliser ab initio le transport quantique hors équilibre. Cité dans des centaines de publications, il couvre l'électronique moléculaire, les nanomatériaux 2D/3D, les nanotubes, les isolants topologiques, les batteries, les jonctions tunnel magnétiques, les joints de grains et plus.



RESCU (Real space Electronic Structure CalcUlator) est un solveur DFT optimisé à grande échelle. RESCU est un progiciel DFT de Kohn-Sham combinant méthodes numériques avancées et calcul parallèle pour prédire les propriétés des matériaux sur de petites grappes. Son extension DFPT calcule des fonctions de réponse telles que la polarisation, les bandes de phonons et les propriétés optiques.



Calcul optimisé : jusqu'à 1 000 atomes sur portable; 10 000+ sur HPC

Notre **NOUVEL assistant DFT** : **LatticeMind**

LatticeMind est un pipeline agentique dont chaque module prend en charge une étape du flux de simulation DFT afin d'assurer l'exactitude, la reproductibilité et la fiabilité de vos projets de R&D en science des matériaux.

Il **accélère RESCU et NanoDCAL**, **réduit les erreurs** et **automatise** les entrées de simulation.



Génération de flux
Flux complets RESCU
et NanoDCAL

Paramétrage
Structure, grilles k et
paramètres SCF/XC
automatisés

Production de scripts
Scripts Bash + scripts
Python de post-
traitement

Intégration des
données
Accès automatisé à
Materials Project

Rapports tutoriels
Rapports PDF/HTML et
instructions détaillées

RESCU NanoDCAL et LatticeMind

sont offerts sur

[qBraid](https://qbraids.com) | LAB

Sans installation ni maintenance
Sans configuration HPC/DFT
Sans file d'attente + HPC efficace
Moins de dépannage et d'assistance

➔ account.qbraid.com

Services infonuagiques clés en main

Les utilisateurs doivent vérifier les données d'entrée et les paramètres de simulation générés.

Licences individuelles et collectives avec installation, HPC et assistance

Contactez-nous pour obtenir **une licence d'essai gratuite de nos outils avancés** puis adoptez-les pour accélérer vos projets de R&D!



Documentation



Portail utilisateur

