

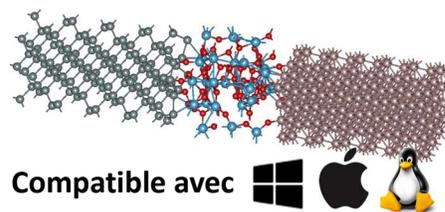
**Nanoacademic Technologies** développe des logiciels de simulation DFT avancés et innovants pour étudier et prédire les propriétés des matériaux et des dispositifs, ainsi que des outils de conception assistée par ordinateur pour les qubits de spin.

**NanoDCAL** est un outil de simulation de transport à la fine pointe de la technologie, combinant les principes premiers, le formalisme des fonctions de Green hors d'équilibre (NEGF en anglais) avec la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) qui prédit le transport quantique hors équilibre dans les nanostructures, y compris les caractéristiques courant-tension des dispositifs d'échelle nanométrique.



## Un solveur de transport nanoélectronique NEGF-DFT multifonctionnel

**NanoDCAL** (**Nano** DFT **CAL**culator) est un outil polyvalent pour la modélisation *ab initio* du transport quantique hors équilibre. Il a été utilisé dans des centaines de publications scientifiques dans des domaines aussi variés que l'électronique moléculaire, les nanotubes, les isolants topologiques, les batteries, les jonctions tunnel magnétiques, les joints de grains métalliques, etc.



Compatible avec   

### Fonctionnalités principales :

- Écrit en MATLAB et C
- Focus sur les systèmes à petite et moyenne échelles (jusqu'à 1 000 atomes)
- Spintronique (colinéaire / non colinéaire / couplage spin-orbite)
- Nanoélectronique des semiconducteurs (courbes I-V)
- Calcul de l'énergie totale, la force, les états de diffusion et les calculs de phonons font partie de la suite NanoDCAL
- Étudier les molécules, les cristaux, les systèmes à une, deux et quatre sondes
- Calcul des forces, du stress et optimisation de structures
- Couplage électron-phonon
- Optimiseur de base orbitale atomique
- Calcul de photocourants
- Coefficients de transport thermique

Des mises à jour, de nouvelles versions sont disponibles régulièrement et un support technique est offert pour aider nos utilisateurs en leur offrant la meilleure expérience possible. Restez à l'écoute de nos articles, infolettres et publications sur notre page **LinkedIn** pour ne rien manquer des dernières actualités de Nanoacademic Technologies !

**Contactez-nous pour tester et essayer NanoDCAL  
pour catalyser vos études de matériaux et projets de R&D !**