NANOACADEMIC TECHNOLOGIES

Coherent Modeling

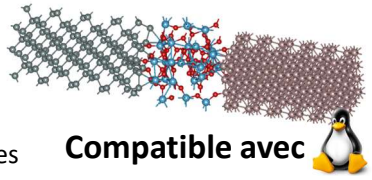
Nanoacademic Technologies développe des logiciels de simulation DFT avancés et innovants pour étudier et prédire les propriétés des matériaux et des dispositifs, ainsi que des outils de conception assistée par ordinateur pour les qubits de spin.

NanoDCAL+ est une évolution de notre package de transport quantique à usage général et à la pointe de la technologie **NanoDCAL** - combinant 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 d'équilibre dans les nanostructures dont les dispositifs nanométriques et bénéficie d'une nouvelle architecture, de nouvelles fonctionnalités et de performances très améliorées.

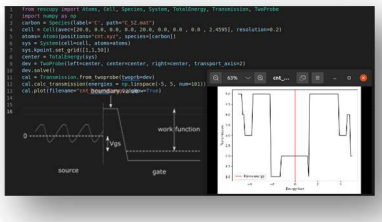
NANODCAL+

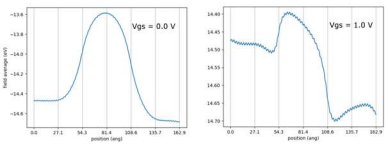
Un solveur de transport nanoélectronique NEGF-DFT multifonctionnel de nouvelle génération

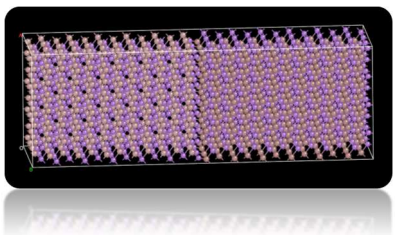
NanoDCAL+ (**Nano D**FT **CAL**culator **Plus**) est une implémentation LCAO de NEGF-DFT. Il s'agit d'un outil polyvalent pour la modélisation *ab initio* du transport quantique hors équilibre. Il hérite de **NanoDCAL** qui a été utilisé dans des centaines de publications scientifiques dans des domaines aussi variés que l'électronique moléculaire, les nanotubes, les isolants topologiques, les batteries, les jonctions tunnel magnétiques, les joints de grains métalliques, etc. Son ensemble de fonctionnalités complémentaires en fait la meilleure base technologique pour vos projets de R&D.



Compatible avec







Fonctionnalités principales :

- Écrit en Fortran et Python
- Fournit une modularité améliorée, une intégration aisée avec des outils tiers, un parallélisme, une portabilité et des performances matérielles améliorés
- Focus sur l'électronique moléculaire et nanométrique (systèmes réalistes à grande échelle jusqu'à 10 000+ atomes)
- Spintronique (couplage colinéaire / non colinéaire / spin-orbite)
- Nanoélectronique des semiconducteurs (courbes I-V)
- Calcul de la transmission, du courant et de la conductance

Les états de diffusion, les photocourants, les courants thermoélectriques, les calculs de phonons font quant à eux parties de l'héritage de l'outil **NanoDCAL**.

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, infolettre 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 vos projets R&D !

LOGICIELS DE MODÉLISATION POUR LES MATÉRIAUX DE DEMAIN

+1 514-387-4003
nanoacademic.com
info@nanoacademic.com
666 Rue de Sherbrooke Ouest, Suite 802
Montréal, Québec H3A 1E7 Canada