

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.

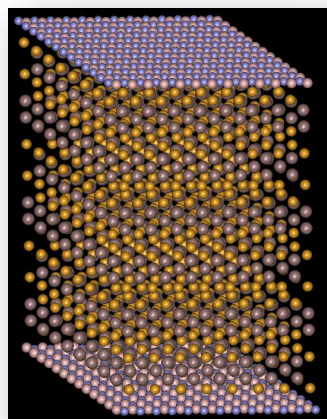
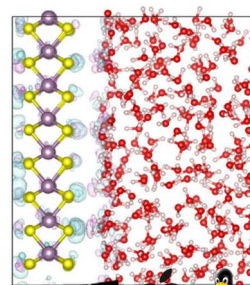
Notre puissant outil de simulation atomistique **RESCU** avec sa portée générale et son pouvoir prédictif, permet de simuler tous les atomes d'un matériau en utilisant la théorie fonctionnelle de la densité pour résoudre la fameuse équation de Schrödinger. Il s'agit de discrétiser l'équation de Kohn-Sham sur des grilles spatiales réelles, avec des ondes planes ou avec des orbitales atomiques. Son efficacité provient des mathématiques numériques ainsi que de sa conception pour le calcul parallèle.



RESCU

Un solveur multifonctionnel basé sur la DFT/DFPT

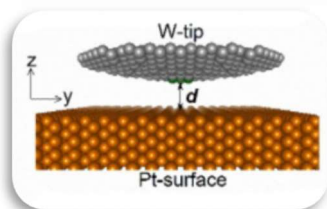
RESCU (Real space Electronic Structure Calculator) est optimisé en tant que solution DFT à grande échelle comprenant un ensemble complet de fonctionnalités. Plus précisément, RESCU est un package Kohn-Sham DFT de pointe basé sur des mathématiques numériques avancées et une implémentation parallèle qui prédit les propriétés des matériaux sur des grappes informatiques. Il comprend des outils d'analyse de structure électronique et implémente une extension perturbative de la DFT (DFPT) qui permet de calculer des fonctions de réponse telles que la polarisation, les structures de bande phononiques ou les propriétés optiques.



Fonctionnalités principales :

- Écrit en MATLAB et C
- Focus sur les systèmes à grande échelle (jusqu'à 20,000 atomes)
- Implémentation DFPT (tenseur diélectrique, matrice dynamique)
- Propriétés optiques (permittivité diélectrique, indice de réfraction)
- Outils Raman (tenseur, spectre, intensités)
- Traitement fonctionnel avancé: DFT + EXX (hybride) et DFT + U (Hubbard)
- Outils d'analyse courants tels que DOS, PDOS, LDOS, PLDOS, structure de bande, déploiement de bande, analyse de charge
- Susceptibilité optique non linéaire
- Spintronique (colinéaire / non colinéaire / couplage spin-orbite)
- Outils pour les phonons (basés sur les différences finies)
- Solveur CFSI à grande échelle

Compatible avec   



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 RESCU
pour catalyser vos études de matériaux et projets de R&D !