

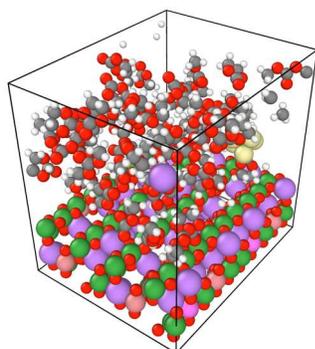
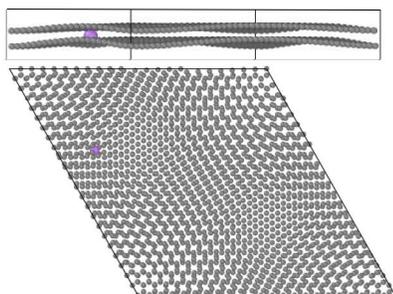
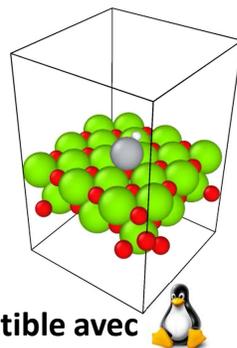
Nanoacademic Technologies développe des logiciels de simulation DFT avancés et innovants pour étudier et prédire les propriétés des matériaux et des dispositifs, ainsi que des outils de conception assistée par ordinateur pour les spin-qubits.

Notre puissante simulation atomistique **RESCU+** avec sa conception nouvelle et améliorée, offre un ensemble de fonctionnalités plus puissant que jamais qui permet de simuler tous les atomes dans un matériau en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) en se concentrant sur la dynamique moléculaire (DM) et d'autres dynamiques ioniques. Il comprend également une approche innovante en exploitant l'apprentissage automatique pour fournir une accélération directe aux calculs ab initio de la dynamique moléculaire (DMAI).



Un outil de résolution multifonctionnel de nouvelle génération basé sur la méthode DFT

RESCU+ (Real space Electronic Structure Calculator Plus) est conçu pour créer une solution DFT complète à grande échelle. Plus précisément, il s'agit d'un package DFT Kohn-Sham à usage général et optimisé comprenant toutes les fonctionnalités énumérées ci-dessous et plus encore. Il offre des fonctionnalités complémentaires à son prédécesseur **RESCU**, telles que la DMAI et la bande élastique coudee (AIMD et NEB en anglais). Avec une modularité renforcée, une interface Python et un noyau de Fortran ainsi qu'un module d'intelligence artificielle dédié, il offre un parallélisme meilleur que jamais et des temps de calcul améliorés notamment sur les clusters et les supercalculateurs d'au moins un ordre de grandeur.



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 les systèmes à très grande échelle (jusqu'à 100 000 atomes)
- Moment dipolaire, populations de Mulliken
- Dynamique moléculaire (DMAI/Intelligence Artificielle)
- Relaxation de structure, bande élastique coudee
- Outils d'analyse courants tels que DOS, PDOS, LDOS, PLDOS,
- Structure (complète, effective) et alignement de bandes
- Outil d'analyse des défauts
- Équation d'états

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, newsletters 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 vos projets R&D !