



Modelli DFT – La tabella che segue elenca I modelli NLDFT attualmente disponibili. Quelli contrassegnati con un asterisco (*) sono già disponibili nel software a corredo del DataMaster di Micromeritics o a corredo degli strumenti serie ASAP 2020, ASAP 2420, TriStar 3020 e Gemini 2390. Tutti gli altri modelli sono scaricabili e integrabili con quelli già a disposizione nella libreria dei modelli NLDFT. E' necessario registrarsi per acquisire i nuovi aggiornamenti software. [Istruzioni operative per scaricare i nuovi modelli.](#)

La base teorica su cui si fonda ogni nuovo modello è contraddistinta da un numero che corrisponde ad un contributo di letteratura presentato nella pagina [Modelli di Riferimento DFT.](#)

Nuovi modelli verranno aggiunti regolarmente all'elenco. Non esitare a contattarci qualora volessi contribuire allo sviluppo di questi.

Tabella dei Modelli NLDFT

Materiale	Temperatura del Fluido	Modello di Adsorbente	Teoria Molecolare e Riferimenti	Applicazione
Carbone Ultima Versione	Ar, 77K	Infinite Slit	NLDFT [2, 3]	PSD*** di carboni microporosi e mesoporosi con pori compresi tra 3.5 e 120 Å. Assunzione: modello per pori a facce piatte di dimensione infinita. Questo modello si applica a dati di adsorbimento misurati fino a pressione di saturazione/sublimazione (203 torr)
Carbone Ultima Versione	N ₂ , 87K	Infinite Slit	NLDFT [2, 3]	PSD*** di carboni microporosi e mesoporosi con pori compresi tra 3.5 e 1000 Å. Assunzione: modello per pori a facce piatte di dimensione infinita. Questo modello si applica a dati di adsorbimento misurati fino alla pressione di saturazione (2130 torr)
Carbone NOVITA'!	Ar, 87K	2D - Disc, AR*=6	2D-NLDFT [1, 2, 3]	PSD*** di carboni microporosi con pori compresi tra 3.5 e 250 Å. Assunzione: modello 2D per pori a facce piatte di dimensione finita con rapporto diametro-ampiezza pari a 6.
Carbone NOVITA'!	Ar, 87K	2D - Disc, AR*=12	2D-NLDFT [1, 2, 3]	PSD*** di carboni microporosi con pori compresi tra 3.5 e 250 Å. Assunzione: modello 2D per pori a facce piatte di dimensione finita con rapporto diametro-ampiezza pari a 12.
Carbone NOVITA'	Ar, 87K	Infinite Slit	NLDFT [2, 3]	PSD*** di carboni microporosi e mesoporosi con pori compresi tra 3.5 e 1000 Å. Assunzione: modello per pori a facce piatte di dimensioni infinite
Carbone NOVITA'!	N ₂ , 77K	2D - Disc, AR*=6	2D-NLDFT [1, 2, 3]	PSD*** di carboni microporosi con pori compresi tra 3.5 e 250 Å. Assunzione: modello 2D per pori a facce piatte di dimensione finita con rapporto diametro-ampiezza pari a 6.
Carbone NOVITA'!	N ₂ , 77K	2D - Disc, AR*=12	2D-NLDFT (1, 2, 3)	PSD*** di carboni microporosi con pori compresi tra 3.5 e 250 Å. Assunzione: modello 2D per pori a

				facce piate di dimensione finita con rapporto diametro-ampiezza pari a 12.
Carbone NOVITA'	N ₂ , 77K	Infinite Slit	NLDFT [2, 3]	PSD*** di carboni microporosi e mesoporosi con pori compresi tra 3.5 e 1000 Å. Assunzione: modello per pori a facce piate di dimensione infinita
Carbone**	N ₂ , 77K	Infinite Slit	NLDFT [5, 6, 7, 8]	PSD*** di campioni carbonosi con pori compresi tra 3.5 e 3000 Å
Carbone**	Ar, 87K	Infinite Slit	NLDFT [5, 6, 7, 8]	PSD*** di campioni carbonosi con pori compresi tra 3.5 e 3000 Å
Carbone**	CO ₂ , 273K	Infinite Slit	NLDFT [2, 3]	PSD*** di campioni carbonosi con pori compresi tra 3.5 e 3000 Å
Zeolite**	N ₂ , 77K	Cylinder	NLDFT [6, 8]	PSD*** di ossidi e zeoliti scambiate con Na, Ca e K
Zeolite**	N ₂ , 77K	Cylinder	NLDFT [2, 3, 9]	PSD*** di ossidi e zeoliti scambiate con H e NH
Zeolite**	Ar, 87K	Cylinder	NLDFT [2, 3, 9]	PSD*** di ossidi e zeoliti scambiate con H e NH
Argilla pilastrata**	N ₂ , 77K	Window	NLDFT [10, 11, 12, 13]	PSD*** di argille pilastrate
Tutti**	N ₂ , 77K	Solid surface	<u>NLDFT</u> [6]	Distribuzione di energia superficiale per campioni che non presentano micropori né piccoli mesopori.
Tutti**	Ar, 87K	Solid surface	<u>NLDFT</u> [6]	Distribuzione di energia superficiale per campioni che non presentano micropori né piccoli mesopori.

* AR è il rapporto tra il diametro e l'ampiezza

** Fornito con il software DFT originale

*** PSD = Distribuzione della Dimensione dei Pori

[Archived Webinars](#)