

# **Molecular simulation technics for adsorption and intrusion in soft porous materials**

Guillaume Fraux

January 8, 2019



---

## CONTENTS

---

List of publications	5
Introduction	7
1 Some Testing	9
2 Test Chapter	11
2.1 A Section . . . . .	11
3 Chapter 3	13
3.1 A Section . . . . .	13
Conclusions	15
A Appendix Chapter	17
A.1 A Section . . . . .	17



---

## LIST OF PUBLICATIONS

---

### PEER-REVIEWED JOURNALS

- 1 Jack D. Evans, Guillaume Fraux, Romain Gaillac, Daniela Kohen, Fabien Trouselet, Jean-Mathieu Vanson, and François-Xavier Coudert. “Computational Chemistry Methods for Nanoporous Materials”. In: *Chemistry of Materials* 29.1 (Sept. 2016), pp. 199–212. DOI: [10.1021/acs.chemmater.6b02994](https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.6b02994).
- 2 Guillaume Fraux and François-Xavier Coudert. “Recent advances in the computational chemistry of soft porous crystals”. In: *Chemical Communications* 53.53 (2017), pp. 7211–7221. DOI: [10.1039/c7cc03306k](https://doi.org/10.1039/c7cc03306k).
- 3 Guillaume Fraux, François-Xavier Coudert, Anne Boutin, and Alain H. Fuchs. “Forced intrusion of water and aqueous solutions in microporous materials: from fundamental thermodynamics to energy storage devices”. In: *Chemical Society Reviews* 46.23 (2017), pp. 7421–7437. DOI: [10.1039/c7cs00478h](https://doi.org/10.1039/c7cs00478h).
- 4 Gérald Chaplais, Guillaume Fraux, Jean-Louis Paillaud, Claire Marichal, Habiba Nouali, Alain H. Fuchs, François-Xavier Coudert, and Joël Patarin. “Impacts of the Imidazolate Linker Substitution (CH<sub>3</sub>, Cl, or Br) on the Structural and Adsorptive Properties of ZIF-8”. In: *The Journal of Physical Chemistry C* 122.47 (Oct. 2018), pp. 26945–26955. DOI: [10.1021/acs.jpcc.8b08706](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b08706).
- 5 Guillaume Fraux, Anne Boutin, Alain H. Fuchs, and François-Xavier Coudert. “On the use of the IAST method for gas separation studies in porous materials with gate-opening behavior”. In: *Adsorption* 24.3 (Mar. 2018), pp. 233–241. DOI: [10.1007/s10450-018-9942-5](https://doi.org/10.1007/s10450-018-9942-5).
- 6 Laura Scalfi, Guillaume Fraux, Anne Boutin, and François-Xavier Coudert. “Structure and Dynamics of Water Confined in Imogolite Nanotubes”. In: *Langmuir* 34.23 (May 2018), pp. 6748–6756. DOI: [10.1021/acs.langmuir.8b01115](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.8b01115).

### PREPRINTS

- 1 Johannes P. Dürholt, Guillaume Fraux, François-Xavier Coudert, and Rochus Schmid. “Ab initio derived force fields for Zeolitic Imidazolate Frameworks: MOF-FF for ZIFs”. <https://chemrxiv.org/articles/link/7322183>.

- 2 Guillaume Fraux, Siwar Chibani, and François-Xavier Coudert. “Modelling of framework materials at multiple scales: current practices and open questions”. <https://chemrxiv.org/articles/link/7322237>.

---

## INTRODUCTION

---

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.





---

## SOME TESTING

---

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.



---

## TEST CHAPTER

---

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

### 2.1 A SECTION

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.



---

CHAPTER 3

---

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

## 3.1 A SECTION

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.



---

## CONCLUSIONS

---







---

## APPENDIX CHAPTER

---

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

### A.1 A SECTION

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.