

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PSL

Préparée à Chimie ParisTech

Développements méthodologiques pour la simulation de l'adsorption des gaz simples dans les matériaux nanoporeux

Methodology developments for the simulation of simple gas adsorption in nanoporous materials

Soutenue par

Lionel Zoubritzky

Le

Composition du jury :

François-Xavier COUDERT
Directeur de Recherche CNRS, Chimie ParisTech

Directeur de thèse

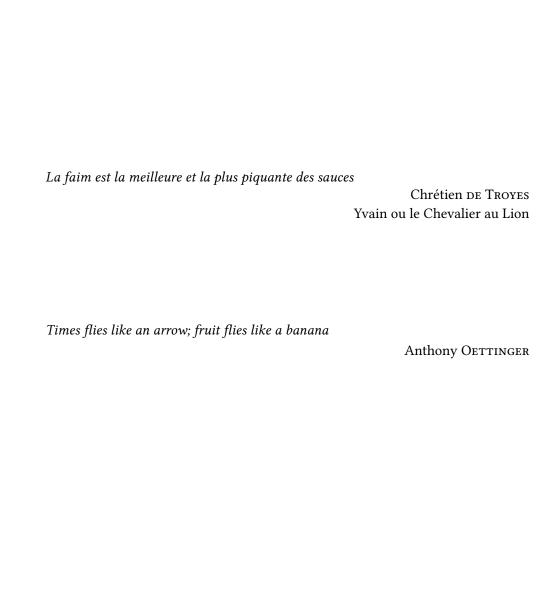
École doctorale nº388

Chimie Physique et Chimie Analytique de Paris Centre

Spécialité

Chimie Physique





REMERCIEMENTS

Bonjour, merci.

TABLE OF CONTENTS

List of Publications									vi
Peer-reviewed papers									vi
Preprint									vi
Publication from a previous project .							•		vi
Résumé en français									ix
Introduction									is

LIST OF PUBLICATIONS

PEER-REVIEWED PAPERS

1. Lionel Zoubritzky and François-Xavier Coudert. "CrystalNets.jl: Identification of Crystal Topologies". In: *SciPost Chem.* 1 (2022), p. 005. DOI: 10.21468/SciPostChem.1.2.005.

PREPRINT

Publication from a previous project

RÉSUMÉ EN FRANÇAIS

Introduction								•						ix
			>•	C-	⊃o-	<			_					

Introduction

RÉSUMÉ			
MOTO OLÉ			
MOTS CLÉ		riaux nanoporeux, topologie, zéolites	
ABSTRACT	Г		
KEYWORD	OS .		
molecular s	simulation, adsorption, nanopor	rous materials, topology, zeolites	