



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 n°388

**Chimie Physique et
Chimie Analytique de
Paris Centre**

Spécialité

Chimie Physique



ParisTech



La faim est la meilleure et la plus piquante des sauces

Chrétien DE TROYES
Yvain ou le Chevalier au Lion

Times flies like an arrow; fruit flies like a banana

Anthony OETTINGER

REMERCIEMENTS

Bonjour, merci.

TABLE OF CONTENTS



List of Publications	vii
Peer-reviewed papers	vii
Preprint	vii
Publication from a previous project	vii
Résumé en français	ix
Introduction	ix

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](https://doi.org/10.21468/SciPostChem.1.2.005).

PREPRINT

PUBLICATION FROM A PREVIOUS PROJECT

RÉSUMÉ EN FRANÇAIS

Introduction	ix
------------------------	----



INTRODUCTION



RÉSUMÉ

MOTS CLÉS

simulation moléculaire, adsorption, matériaux nanoporeux, topologie, zéolites

ABSTRACT

KEYWORDS

molecular simulation, adsorption, nanoporous materials, topology, zeolites

