

Obtention des
structures des
molécules

```
graph LR; A[Obtention des structures des molécules] --> B[Construction de la structure et agencement des entités chimiques]; B --> C[Conversion de la structure en données compatibles LAMMPS];
```

Construction de la
structure et
agencement des
entités chimiques

Conversion de la
structure en données
compatibles
LAMMPS