**Erstellung von Plots mit R oder Python | Mathematisches Modell**

**Daten:**QM-Rechnungen mit Punktladungen auf einem Grid in der Nähe eines halogen bond-Komplexes  
Systeme:  
*N*-methylacetamid mit iodbenzol +1  
*N*-methylacetamid mit iodbenzol -1  
*N*-methylacetamid mit brombenzol +1  
*N*-methylacetamid mit brombenzol -1  
*N*-methylacetamid mit chlorbenzol +1  
*N*-methylacetamid mit chlorbenzol -1  
  
**Ziel 1:**Automatisierte Erstellung von 2D-Plots der verschiedenen Schnittebenen mit unterschiedlichen Interpolationsmethoden.  
Feste Energieskala für alle Systeme für bessere Vergleichbarkeit. Niedrigster Energiewert bis -10 kJ/mol oben. Höchster +10 kJ/mol.   
(Bevorzugt ein Farbübergang von Rot 🡪 Orange 🡪 Gelb 🡪 Grün 🡪 Blau 🡪 Violett.)

**Ziel 2:**Gridpunkte, die zu Nahe am Interaktionssystem sind sollen vernachlässigt werden.  
Zu nah bedeutet: Van der Waals Radius des jeweiligen Atoms + “Radius” der Punktladung, für die der Radius von Stickstoff angenommen werden soll.  
Verschiedene Interpolationsmethoden, die mit den “Lücken” zurecht kommen.  
 **Ziel 3**:  
Das Molekül soll im Plot zu sehen sein.  
 **Ziel 4:**Hier soll versucht werden ein mathematisches Modell (Scoring oder ähnliches) für die Daten der 6 verschiedenen Interaktionssysteme erzeugt werden.