**Projektion der QM-Daten in die Bindungstasche mit PyMOL**

**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:**Die Daten sollen als Punktwolken (in PyMOL als eingefärbte Pseudoatome) in die Bindungstasche projiziert werden.  
Zum Einen auf einen aromatischen Ring (5-Ring, 6-Ring, mit oder ohne Heteroatome, Doppelringsysteme etc) eines Liganden in der Bindungstasche.  
Die andere Hälfte der Daten auf das Backbone-System.  
  
**Ziel 2:**Zusätzliche Erkennung, ob eine geladene Aminosäure in der jeweiligen Punktwolke liegt oder sehr nah dran liegt.