3D-Moleküle mit Orbitalen in Moodle

Anleitung zum JSmol-Seitenbaukasten · für Lehrkräfte · Stand Oktober 2026

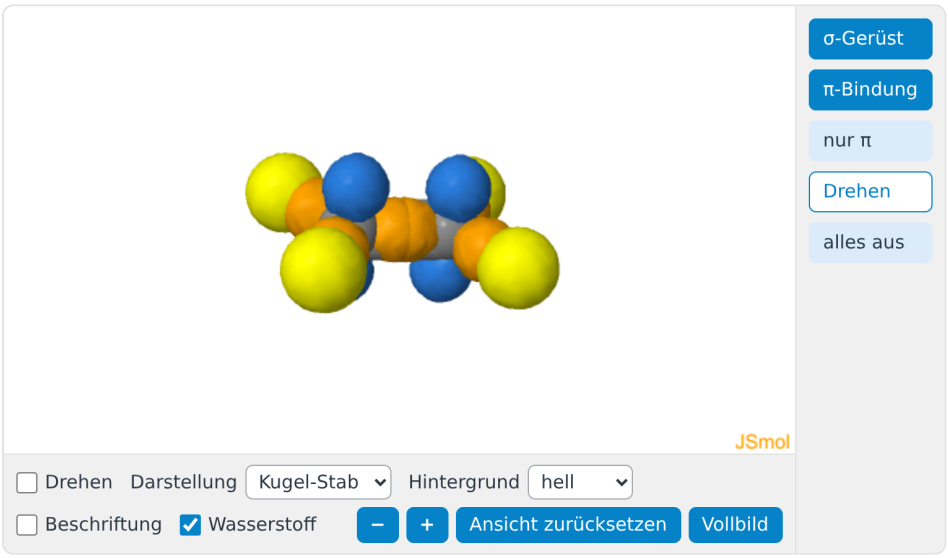
Inhalt

1. Worum geht es?
2. So hängt alles zusammen
3. Einmalig: Datei-Aktivität „Moleküle“
4. Einmalig: Datei-Aktivität „Baukasten“
5. Eine Seite bauen
6. Seite hochladen und einbinden
7. Seite später ändern
8. Häufige Probleme

1 Worum geht es?

Mit dem **JSmol-Seitenbaukasten** erstellen Sie ohne Programmierkenntnisse interaktive 3D-Molekülseiten für Moodle. Die Lernenden können das Molekül drehen, zoomen und die Darstellung wechseln. Mit eigenen **Knöpfen** blenden sie zum Beispiel Orbitale, freie Elektronenpaare oder die Polarität des Moleküls ein und aus.

Die fertige Seite binden Sie in eine Moodle-Textseite oder in den **H5P Iframe Embedder** ein. So lässt sie sich mit Aufgaben und H5P-Quizzen kombinieren.

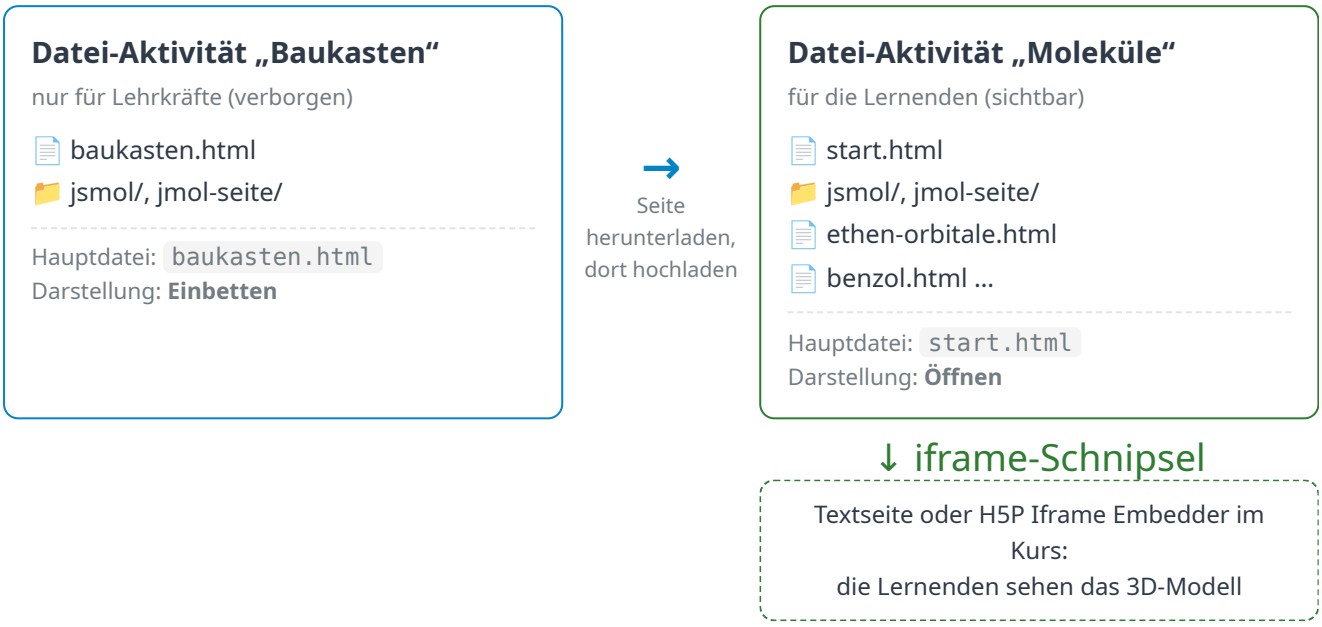


Fertige Seite „Ethen – Orbitale“: Die Knöpfe „σ-Gerüst“ (sp^2-Orbitale orange, s-Orbitale gelb) und „π-Bindung“ (p-Orbitale blau) sind eingeschaltet.

> **Datenschutz**
> Die Seiten für die Lernenden laden nichts von fremden Servern: keine Schriften, keine Statistik, kein Nachladen von Molekülen. Nur der Baukasten fragt bei der Molekülsuche die Datenbank PubChem (USA) ab, und das nur, wenn Sie selbst suchen.

2 So hängt alles zusammen

Sie richten in Moodle **zwei Datei-Aktivitäten** ein: eine Werkstatt für sich selbst und eine Ablage für die fertigen Seiten.



Drei Begriffe

Grundpaket	Das Programm JSmol, das die Moleküle zeichnet (Ordner `jsmol` und `jmol-seite`, ca. 1500 Dateien). Es liegt **einmal** in jeder Datei-Aktivität. Jede Ihrer Seiten ist nur eine kleine HTML-Datei und benutzt das Grundpaket, das **in derselben Datei-Aktivität** liegt.
Seite	Eine HTML-Datei aus dem Baukasten, z. B. `ethen-orbitale.html`. Das Molekül und alle Einstellungen stecken in dieser einen Datei.
Adresse	Moodle gibt jeder Datei eine Internetadresse. Der Baukasten braucht **einmal** die Adresse der Datei-Aktivität „Moleküle“. Dann kann er für jede Seite gleich den passenden Schnipsel zum Einbinden erzeugen. Die Startseite zeigt Ihnen diese Adresse an.

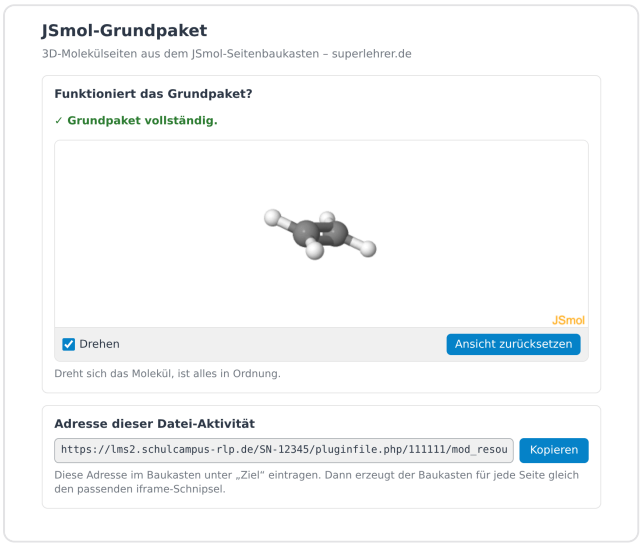
Sie benötigen zwei ZIP-Dateien:

- `jmol-grundpaket.zip` für die Datei-Aktivität „Moleküle“
- `jmol-baukasten.zip` für die Datei-Aktivität „Baukasten“ (enthält das Grundpaket für die Vorschau und das Grundpaket-ZIP zum Herunterladen)

Beide und diese Anleitung finden Sie unter **birgitlachner.codeberg.page/moodle-JSmol-Baukasten**. Dort können Sie den Baukasten auch direkt im Browser ausprobieren.

3 Einmalig: Datei-Aktivität „Moleküle“

1. Im Kurs **Bearbeiten** einschalten und im gewünschten Abschnitt **Aktivität oder Material anlegen → Datei** wählen.
2. Namen eintragen, z. B. „Moleküle“. Die Datei `jmol-grundpaket.zip` in das Feld für die Dateien ziehen.
3. Auf die ZIP-Datei klicken und **Entpacken** wählen. Die ZIP-Datei selbst können Sie danach löschen.
4. Auf `start.html` klicken und **Als Hauptdatei festlegen** wählen.
5. Im Bereich **Darstellung** bei **Anzeigen** die Einstellung **Öffnen** wählen.
6. **Speichern und anzeigen**. Es erscheint die Startseite des Grundpakets.



Startseite der Datei-Aktivität „Moleküle“

Dreht sich das Molekül und steht dort „✓ Grundpaket vollständig“, funktioniert alles.

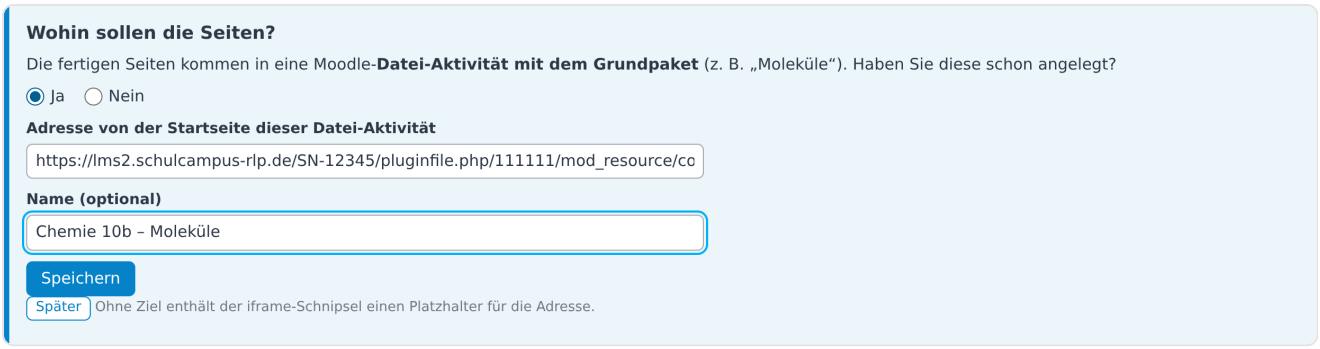
Klicken Sie unten auf Kopieren. Die kopierte Adresse tragen Sie gleich im Baukasten ein (Abschnitt 4).

> **Nicht verbergen!**
> Die Datei-Aktivität „Moleküle“ darf **nicht verborgen** sein, sonst sehen die Lernenden die eingebundenen Seiten nicht. Soll sie nicht auf der Kursseite erscheinen, wählen Sie – falls Ihr Moodle das anbietet – „Verfügbar, aber nicht auf der Kursseite angezeigt“.

4 Einmalig: Datei-Aktivität „Baukasten“

1. Eine weitere Datei-Aktivität anlegen, z. B. „Baukasten“, und `jmol-baukasten.zip` hineinziehen und **entpacken**.
2. `baukasten.html` als **Hauptdatei** festlegen.
3. Bei **Darstellung → Anzeigen** die Einstellung **Einbetten** wählen.
4. Bei der Verfügbarkeit **Verbergen** wählen. Der Baukasten ist nur für Sie gedacht.
5. Speichern und anzeigen.

Beim ersten Öffnen fragt der Baukasten **„Wohin sollen die Seiten?“**. Wählen Sie **Ja**, fügen Sie die kopierte Adresse der Startseite ein, geben Sie dem Ziel einen Namen und klicken Sie auf Speichern.



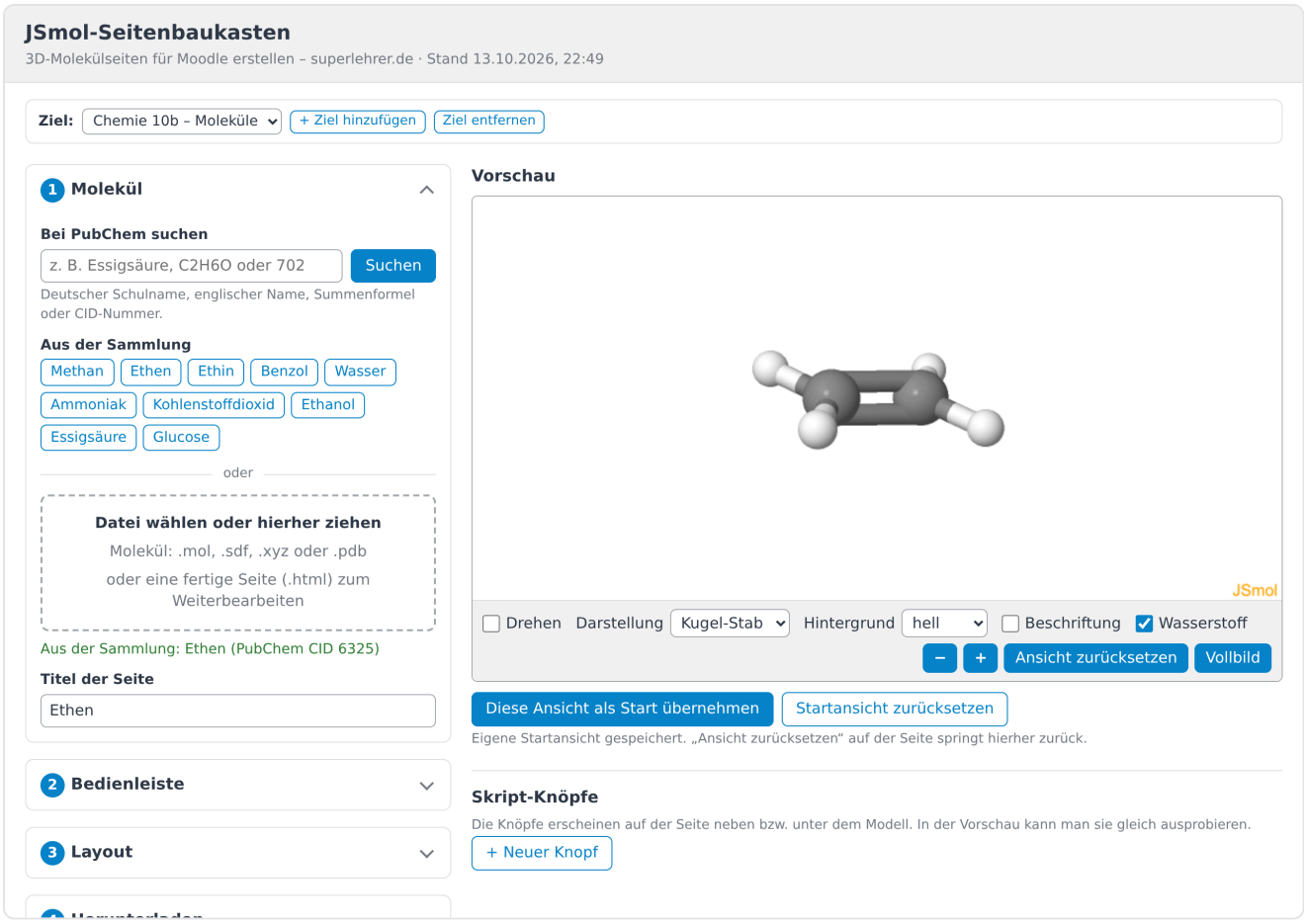
Ziel eintragen: die Adresse von der Startseite der Datei-Aktivität „Moleküle“

Gut zu wissen

- Der Baukasten merkt sich das Ziel **in Ihrem Browser**. An einem anderen Rechner oder in einem anderen Browser tragen Sie es einmal neu ein.
- Sie können **mehrere Ziele** speichern, z. B. eines pro Kurs, und oben im Baukasten zwischen ihnen wählen.
- Den Baukasten brauchen Sie nur einmal. Sie können ihn z. B. in einem eigenen Lehrkräfte-Kurs anlegen und von dort aus Seiten für alle Kurse bauen.

5 Eine Seite bauen

Links stehen die Einstellungen in vier aufklappbaren Abschnitten, rechts die **Vorschau**. Die Vorschau ist genau die spätere Seite: Alles, was Sie dort sehen und anklicken, funktioniert später im Kurs genauso.



Der Baukasten mit gespeichertem Ziel und Ethen aus der Sammlung

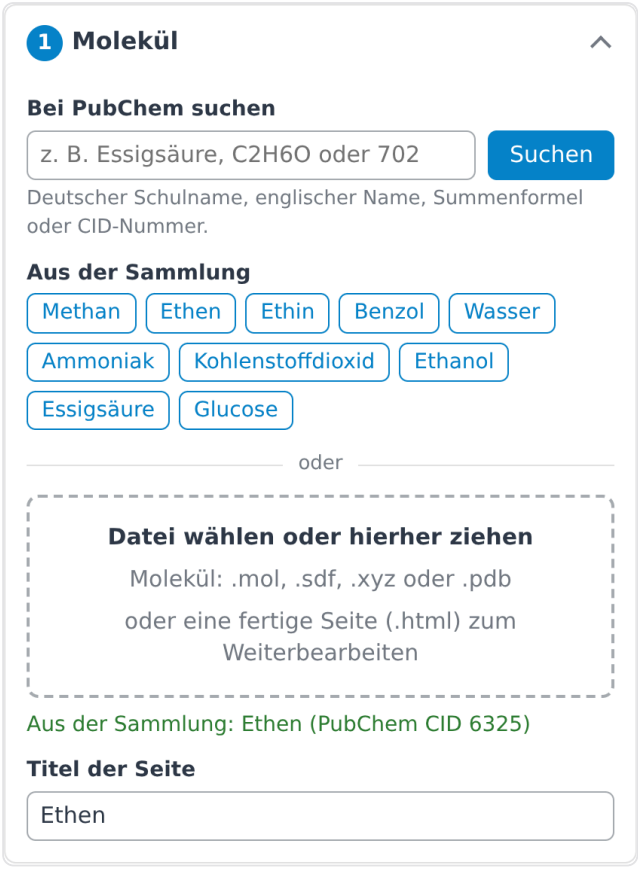
5.1 Molekül wählen

Es gibt drei Wege:

- **Bei PubChem suchen:** deutscher Schulname („Essigsäure“), englischer Name, Summenformel („C2H6O“, dann erscheint eine Auswahlliste) oder CID-Nummer.
- **Aus der Sammlung:** zehn häufige Moleküle, ein Klick genügt. Funktioniert auch ohne Internet.
- **Datei:** eine eigene Moleküldatei (`.mol` , `.sdf` , `.xyz` , `.pdb`) in das Feld ziehen.

Prüfen Sie danach den **Titel der Seite**. Aus ihm entsteht auch der Dateiname.

Für Salze, Ionen und viele Radikale hat PubChem keine 3D-Struktur. Dann meldet der Baukasten das.



5.2 Startansicht festlegen

Drehen Sie das Modell in der Vorschau mit gedrückter Maustaste, zoomen Sie mit dem Mausrad und klicken Sie dann unter der Vorschau auf Diese Ansicht als Start übernehmen. So erscheint das Molekül beim Öffnen der Seite, und „Ansicht zurücksetzen“ springt hierher zurück.

> **Tipp für Orbitale:** Moleküle aus PubChem sieht man oft genau von oben. p-Orbitale erscheinen dann nur als Kreise. Drehen Sie das Molekül schräg, bevor Sie die Ansicht übernehmen.

5.3 Bedienleiste

Für jedes Element der Leiste unter dem Modell legen Sie fest, ob es **angezeigt** wird und welchen **Startwert** es hat.

Brauchen Sie nur ein Element, klicken Sie zuerst auf keine anzeigen und haken dann das gewünschte an.

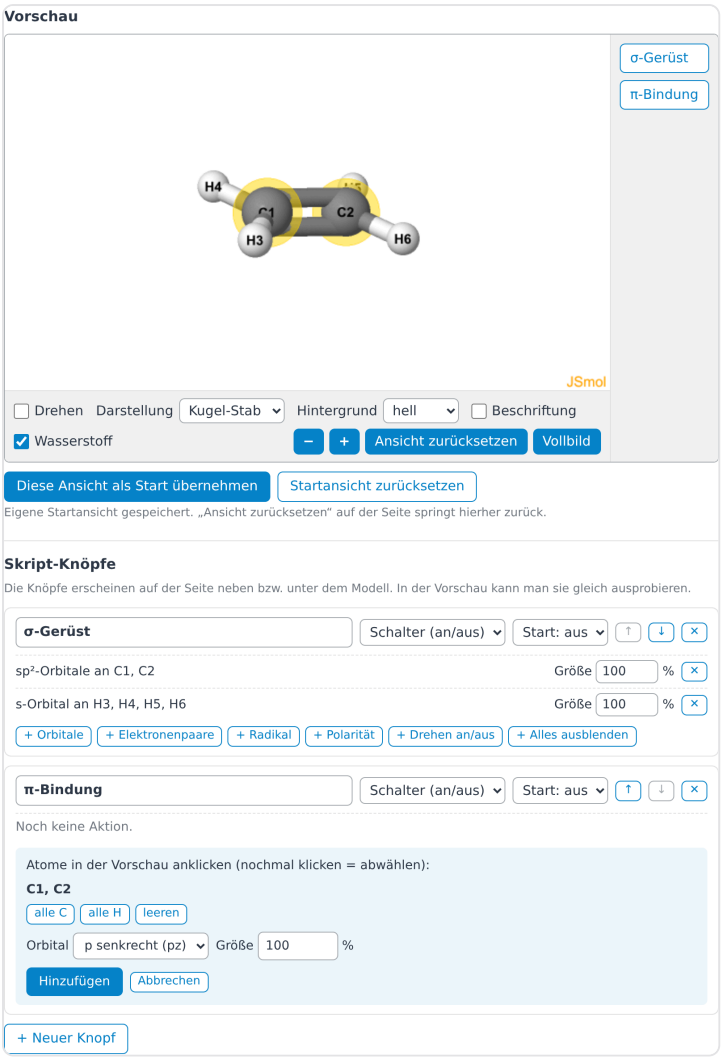
Ausgeblendete Elemente wirken nur über ihren Startwert. Beispiel: Hintergrund „dunkel“ ohne Auswahlliste ergibt eine Seite, die immer dunkel ist.



5.4 Skript-Knöpfe: Orbitale, Elektronenpaare, Polarität

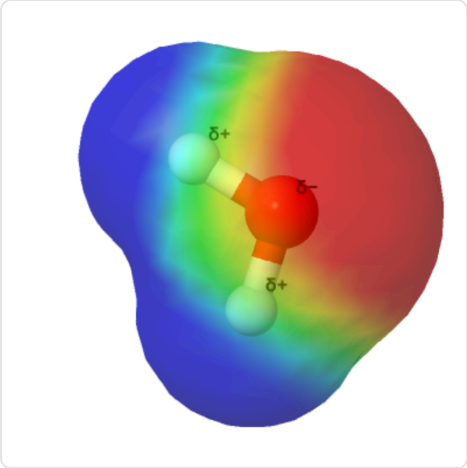
Die Knöpfe legen Sie **rechts unter der Vorschau** an:

1. + Neuer Knopf klicken und die **Beschriftung** eintragen, z. B. „π-Bindung“.
2. Die **Art** wählen:
   - **Schalter (an/aus):** Ein Klick schaltet ein, der nächste aus. Ein gedrückter Knopf ist blau. Beim Start kann er an oder aus sein.
   - **einmalig:** führt seine Aktionen aus, ohne gedrückt zu bleiben. Beispiel „nur π“: zuerst „Alles ausblenden“, dann die p-Orbitale.
3. **Aktionen hinzufügen** (ein Knopf kann beliebig viele haben): + Orbitale + Elektronenpaare + Radikal + Polarität + Drehen an/aus + Alles ausblenden
4. Bei Orbitalen, Elektronenpaaren und Radikalen **die Atome in der Vorschau anklicken**. Die Atomnummern werden eingeblendet, gewählte Atome bekommen einen gelben Ring. Ein zweiter Klick wählt ab. Schneller geht es mit „alle C“, „alle H“ usw. Dann Orbital bzw. Darstellung und Größe wählen und auf Hinzufügen klicken.
5. Die Polarität gilt immer für das **ganze Molekül**. Sie müssen keine Atome wählen, die Aktion steht nach dem Klick sofort in der Liste.



Knopf „σ-Gerüst“ ist fertig, für „π-Bindung“ werden gerade C1 und C2 gewählt (gelbe Ringe in der Vorschau).

Aktion	Was erscheint
Orbitale	**s** (gelb), **p senkrecht** zur Molekülebene sowie **px/py** (blau), **sp, sp², sp³** (orange, alle Keulen am Atom, entlang der Bindungen ausgerichtet). Die **Größe** in Prozent ändert die Orbitalgröße (100 % = Standard).
Elektronenpaare	Freie Elektronenpaare als **Wolke** (orange), **Punkte** (wie in der Lewis-Formel) oder **Wolke + Punkte**. Die Wolke ist wählbar undurchsichtig, wenig, mittel (Vorgabe) oder stark durchsichtig. So unterscheidet sie sich von den immer undurchsichtigen Orbitalen. Die Anzahl der Paare ermittelt die Seite selbst aus den Bindungen (N in NH_3: 1, O in H_2O: 2, Cl: 3).
Radikal	Ein einzelnes Elektron, ebenfalls als Wolke, Punkt oder beides.
Polarität	**δ+/δ−** an den Atomen, die **MEP-Fläche** (elektrostatisches Potential) oder beides. Die Durchsichtigkeit der Fläche ist wählbar wie bei den Elektronenpaaren. Ist die Beschriftung eingeschaltet, steht δ+/δ− hochgestellt am Elementsymbol.
Drehen an/aus	Schaltet die Drehung des Modells.
Alles ausblenden	Blendet alle Orbitale, Elektronenpaare und die Polarität aus und schaltet alle anderen Schalter aus.



Wasser: δ− am O, δ+ an den H, die Fläche ist am O rot, an den H blau.



Methan: keine polaren Bindungen, die Fläche ist überall grün.

So entstehen δ+/δ− und die Farben

- **δ+/δ−** ergibt sich aus der Elektronegativität (Pauling), wie im Unterricht: Eine Bindung gilt ab einer Differenz von **0,4** als polar. C–H (0,35) zählt also nicht. Atome, die nur unpolare Bindungen haben, bekommen kein Zeichen.
- Die **MEP-Fläche** berechnet JSmol aus Teilladungen. **Rot** heißt negativ, **blau** positiv, **grün** neutral. Die Farbskala ist für alle Moleküle gleich, die Farben lassen sich also vergleichen.
- Bei Ethen und Benzol ist die Fläche über der Doppelbindung bzw. dem Ring gelb bis rot. Das ist die π-Elektronenwolke und entspricht den MEP-Bildern in Lehrbüchern.

Beispiele für typische Knöpfe:

Molekül	Knopf	Aktionen
Ethen	σ-Gerüst	sp^2 an allen C, s an allen H
	π-Bindung	p senkrecht an allen C
Ethin	π-Bindungen	p (px) und p (py) an allen C
Methan	Orbitale	sp^3 an C, s an allen H
Benzol	π-System	p senkrecht an allen C
Wasser	freie Paare	Elektronenpaare (Wolke + Punkte) an O
	Polarität	Polarität (δ+/δ− und MEP-Fläche)

5.5 Layout und Größe

Im Abschnitt **3 Layout** legen Sie fest, ob die Knöpfe **rechts** oder **unter** dem Modell stehen (auf schmalen Bildschirmen rutschen sie automatisch nach unten), und wie **breit** und **hoch** die Seite im Kurs erscheint. Die Vorschau zeigt die eingestellte Größe.

6 Seite hochladen und einbinden

1. Im Abschnitt **4 Herunterladen** den Dateinamen prüfen und auf HTML-Seite herunterladen klicken.
2. In Moodle die Datei-Aktivität **„Moleküle“** bearbeiten, die heruntergeladene Datei in das Dateifeld ziehen und speichern. Die Hauptdatei bleibt `start.html`.
3. Im Baukasten auf Schnipsel kopieren klicken.
4. Den Schnipsel einfügen, entweder
   - in eine **Textseite** oder ein Textfeld: im Editor auf die Quelltext-Ansicht umschalten (Symbol `</>`), einfügen, speichern, oder
   - in den **H5P Iframe Embedder**: dort nur die Adresse eintragen, also den Teil zwischen den Anführungszeichen nach `src=`, und Breite und Höhe passend wählen.



> **Dateiname genau übernehmen**
>
> Der Schnipsel enthält den Dateinamen. Hängt Ihr Browser beim Herunterladen etwas an, z. B. `ethen-orbitale(1).html`, benennen Sie die Datei vor dem Hochladen wieder um. Sonst findet das iframe die Seite nicht.

7 Seite später ändern

1. Die fertige HTML-Datei in den Baukasten ziehen (in dasselbe Feld wie Molekülдateien). Alle Einstellungen, Knöpfe und die Startansicht sind wieder da.
2. Ändern, herunterladen und in der Datei-Aktivität „Moleküle“ die alte Datei durch die neue ersetzen, **mit demselben Namen**. Der Schnipsel im Kurs bleibt unverändert.

> **Die alte Fassung ist noch zu sehen?**
>
> Ihr Browser hat die Seite zwischengespeichert. Öffnen Sie die Adresse aus dem Schnipsel in einem neuen Tab und drücken Sie **Strg + F5** (Mac: **Cmd + Umschalt + R**). Danach zeigt auch das eingebundene iframe die neue Fassung.

8 Häufige Probleme

Problem	Lösung
Die Seite zeigt „Grundpaket nicht gefunden“.	Die Seite liegt nicht in derselben Datei-Aktivität wie `jsmol` und `jmol-seite`, oder das ZIP wurde nicht entpackt.
Der Baukasten meldet „Im Grundpaket fehlt …“.	`jmol-baukasten.zip` in der Datei-Aktivität „Baukasten“ (erneut) entpacken.
Im iframe erscheint eine Fehlermeldung oder nichts.	Dateiname im Schnipsel und in Moodle vergleichen (z. B. „(1)“ am Ende). Stimmt das gewählte Ziel im Baukasten?
Sie sehen die Seite, die Lernenden nicht.	Die Datei-Aktivität „Moleküle“ ist verborgen. Sichtbar machen (siehe Abschnitt 3).
Eine Änderung ist nicht zu sehen.	Browser-Zwischenspeicher, siehe Abschnitt 7 (Strg + F5).
Der Knopf „Vollbild“ fehlt.	Im Schnipsel muss `allowfullscreen` stehen. Manche Editoren entfernen es beim Speichern.
PubChem meldet „keine 3D-Struktur“ oder „überlastet“.	Salze, Ionen und viele Radikale haben dort keine 3D-Struktur. Bei Überlastung kurz warten und erneut suchen, oder ein Molekül aus der Sammlung nehmen.
An einem Atom erscheinen keine Elektronenpaare.	Das Atom hat keine freien Elektronenpaare (z. B. C in Methan). Bei eigenen Dateien prüfen, ob die Bindungen in der Datei richtig angegeben sind.
An einem Atom steht kein δ+ oder δ−.	Das Atom hat nur unpolare Bindungen (Differenz der Elektronegativität unter 0,4, z. B. C–H oder C–C).
Die MEP-Fläche erscheint erst nach einem Moment.	Beim ersten Einschalten lädt die Seite einige Teile von JSmol nach und berechnet die Fläche. Danach geht es schneller.
Neue Knöpfe (z. B. Polarität) funktionieren auf der Seite nicht.	Das Grundpaket in der Datei-Aktivität „Moleküle“ ist älter als der Baukasten. Die Datei `jmol-seite/jmol-seite.js` aus dem neuen Grundpaket hochladen und ersetzen.
Das Drehen ruckelt im Vollbild.	Das ist normal: JSmol rechnet ohne Grafikkarte, große Flächen brauchen mehr Zeit.

JSmol-Seitenbaukasten und Grundpaket: Birgit Lachner, superlehrer.de · 3D-Darstellung: JSmol (Jmol-Projekt, jmol.sourceforge.net), GNU Lesser General Public License 2.1 · Moleküldaten: PubChem (National Center for Biotechnology Information, USA)