# ARGUS LAB (आर्गस लैब)

## रसायन विज्ञान में एक समृद्धि उपकरण

डॉ. सुनीता गुलिया
वरिष्ठ शैक्षणिक सलाहकार
डीआईसीटी, सीआईईटी,एनसीईआरटी

# शिक्षण और अधिगम में प्रौद्योगिकी का एकीकरण

NEP 2020 सभी शैक्षणिक स्तरों पर शिक्षण-सीखने की प्रक्रिया में प्रौद्योगिकी के उपयोग को बढ़ावा देता है। इसमें कक्षा के शिक्षण को बेहतर बनाना और डिजिटल उपकरणों, शैक्षणिक सामग्री और ऑनलाइन प्लेटफार्मों के उपयोग के माध्यम से एक अधिक गतिशील और आकर्षक सीखने का वातावरण बनाना शामिल है।

**K–12 शिक्षा में, प्रौद्योगिकी नवोन्मेषी शिक्षण और अध्ययन प्रथाओं के लिए एक उत्प्रेरक के रूप में कार्य करती है।**

# रसायन विज्ञान में इंटरैक्टिव उपकरण

**Avogadro**

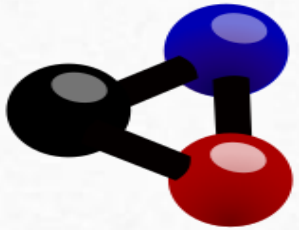
https://avogadro.cc/

मॉलिक्यूलर संपादक और 3D दृश्यकरण उपकरण

**Jmol**

https://jmol.sourceforge.net/

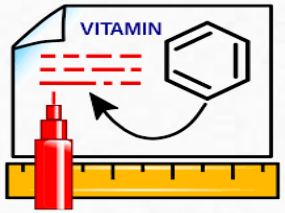
3D संरचना का आणविक दर्शक



**Kalzium**

https://apps.kde.org/kalzium/

तत्वों की विशेषताओं का पता लगाने के लिए उपकरण (तत्वों की आवर्त सारणी के आधार पर)




**ChemSketch**

https://www.acdlabs.com/resources/free-chemistry-software-apps/chemsketch-freeware/

रासायनिक संरचना चित्रण सॉफ़्टवेयर

**Ptable**

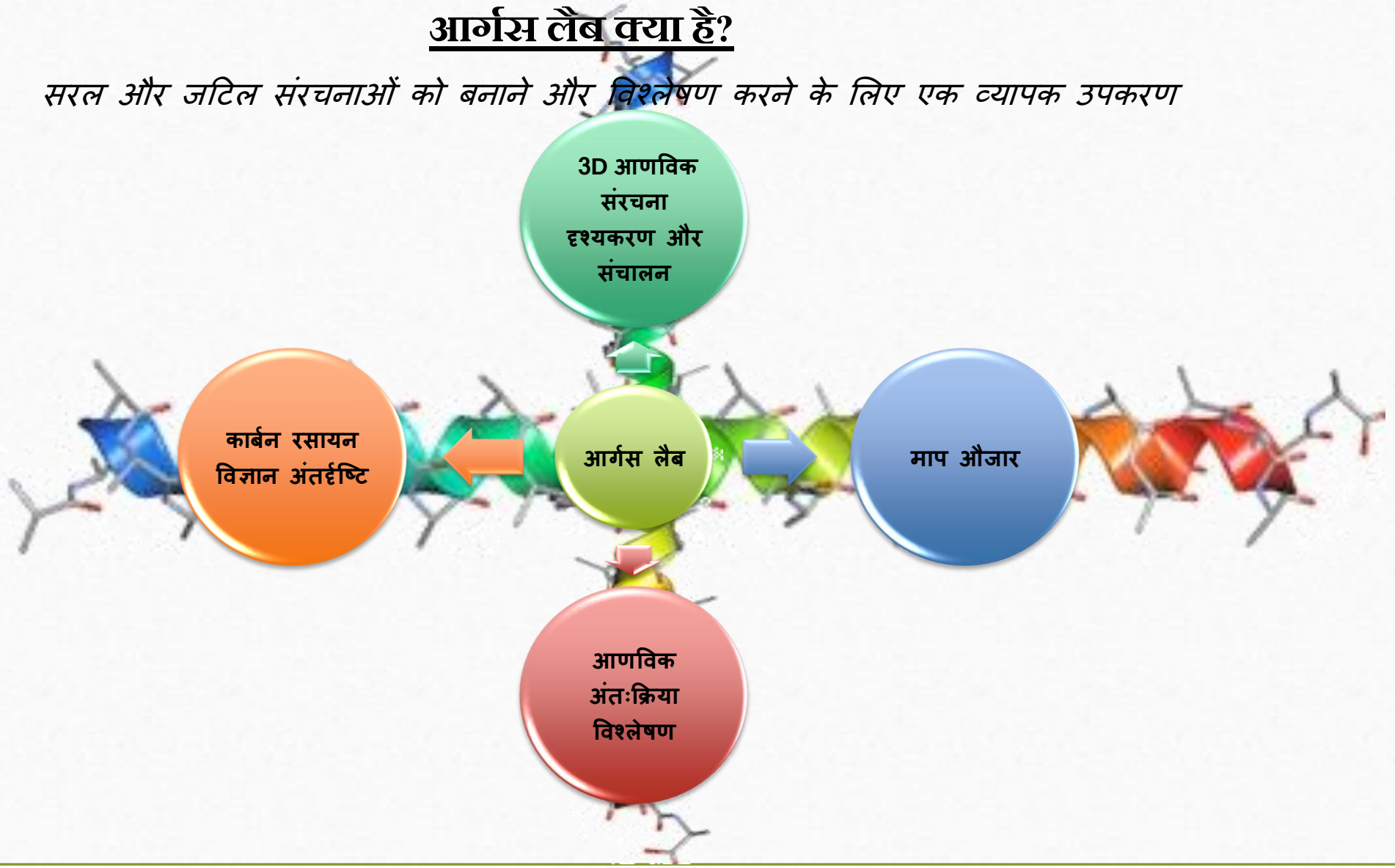
https://ptable.com/?lang=en#Properties

इंटरैक्टिव आवर्त सारणी जिसमें नाम, इलेक्ट्रॉनों और ऑक्सीडेशन अवस्थाएँ दिखाई गई हैं

**Argus Lab**

# आर्गस लैब क्या है?

*सरल और जटिल संरचनाओं को बनाने और विश्लेषण करने के लिए एक व्यापक उपकरण*



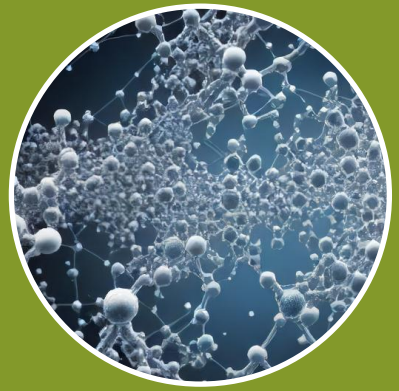
# शैक्षणिक मूल्य

### शिक्षक-छात्र सहयोग को सुगम बनाता है

आर्गस लैब इंटरैक्टिव शिक्षण का समर्थन करता है, जिससे शिक्षकों और छात्रों को आणविक अध्ययन पर प्रभावी ढंग से एक साथ काम करने में सक्षम बनाया जाता है

### आणविक समझ को बढ़ाता है

छात्र विभिन्न गणनाएँ कर सकते हैं, जैसे द्विध्रुव क्षण, ऊर्जा और आणविक आकार, आणविक संरचनाओं की गहरी समझ प्रदान करते हैं



### 3D विज़ुअलाइज़ेशन का एकीकरण

आर्गस लैब छात्रों को पारंपरिक रसायन विज्ञान अध्ययन को 3D आणविक संरचनाओं के अवलोकन के साथ संयोजित करने, अवधारणाओं की समझ और अवधारण को बढ़ाने की अनुमति देता है।

# लाभ - सीमाएं

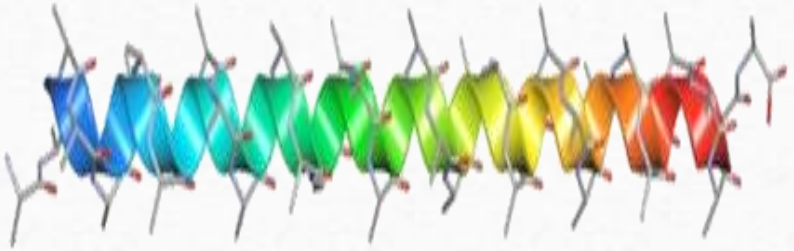
| लाभ |
| --- |
| **स्वतंत्र रूप से लाइसेंस प्राप्त**<br>*बिना किसी लागत के सभी उपयोगकर्ताओं तक पहुंच* |
| **उपयोग में आसानी**<br>*उपयोग में आसान, पीसी और टैबलेट के साथ संगत* |
| **उपभोक्ता - अनुकूल इंटरफ़ेस**<br>*बुनियादी और जटिल दोनों कार्यों के लिए उपयुक्त* |
| **उन्नत आणविक समझ**<br>*आणविक संरचनाओं की बेहतर समझ को सुगम बनाता है* |
| **अणु-निर्माण क्षमताएँ**<br>*सभी आवर्त सारणी तत्वों को कवर करने वाली लाइब्रेरी के साथ ऑन-स्क्रीन सुविधाएं* |
| **लचीले आउटपुट विकल्प**<br>*परिणाम मुद्रित, प्लॉट किए जा सकते हैं, मालिकाना प्रारूपों में सहेजे जा सकते हैं, या बीएमपी, जेपीजी, टीआईएफएफ, या पीओवी-रे प्रारूपों में निर्यात किए जा सकते हैं।* |
| |

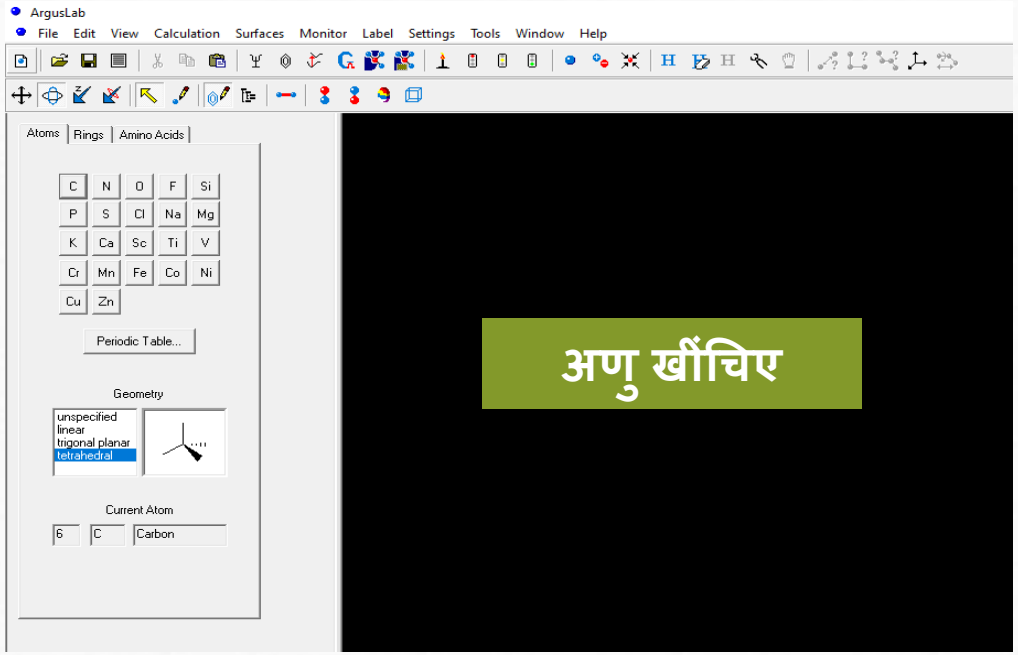
| सीमाएं |
| --- |
| **भाषा की सीमा**<br>*केवल अंग्रेजी में उपलब्ध है* |
| **कार्यक्षमता सीमा**<br>*गैर-सहसंयोजक बांडों का सीमित प्रतिनिधित्व* |
| **अनुकूलता सीमा**<br>*केवल विंडोज़ ओएस के साथ संगत* |

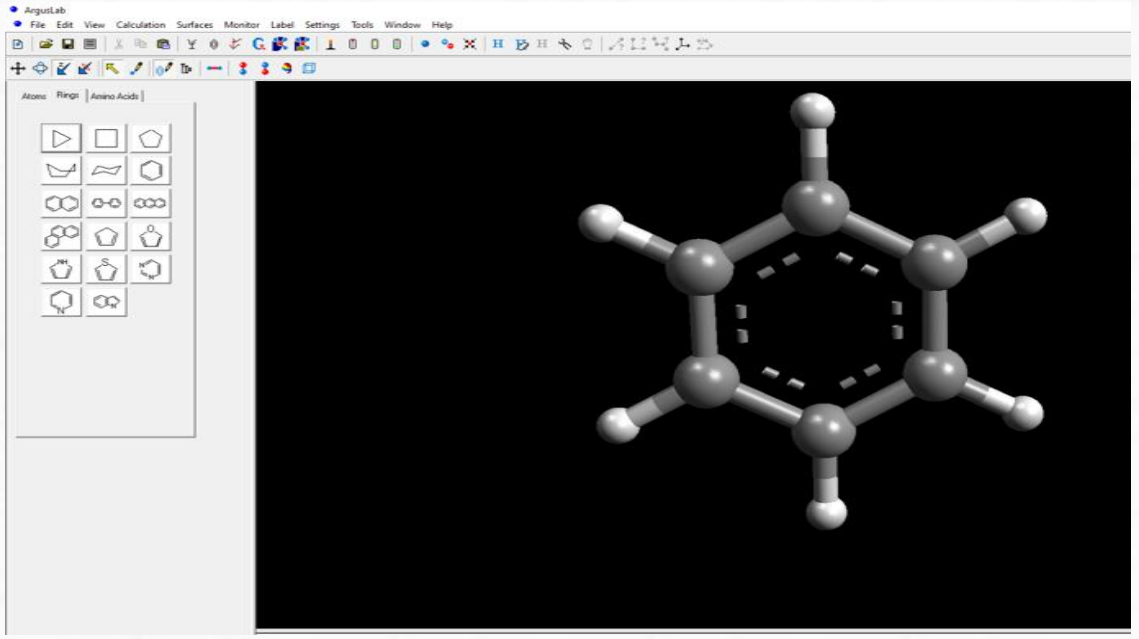
**लिंक पर क्लिक कर फाइल को डाउनलोड करें**

http://www.arguslab.com/arguslab.com/ArgusLab.html

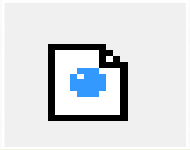
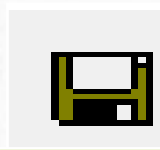
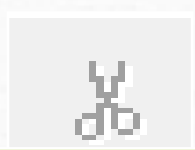
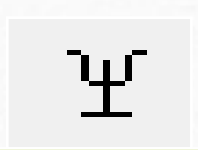
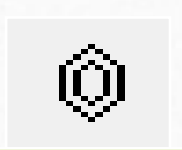
# ArgusLab आर्गस लैब

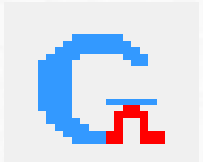
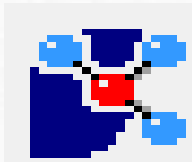
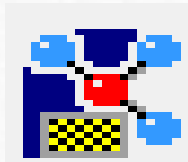
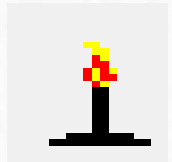
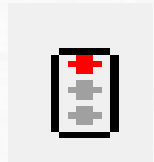
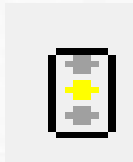
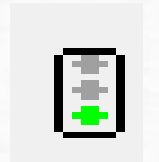
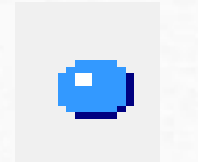
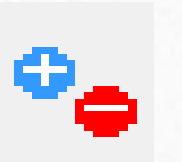
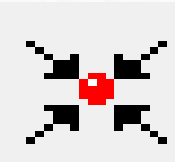




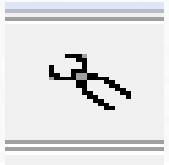
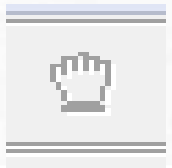
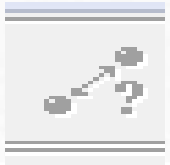
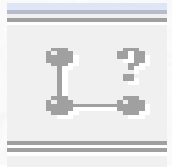
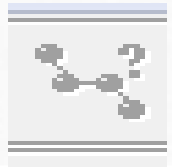
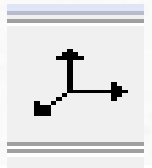
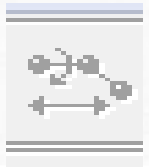



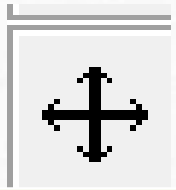
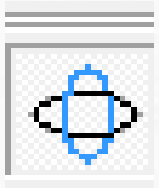
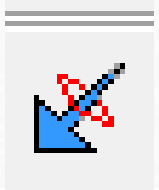
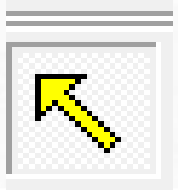
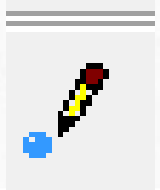
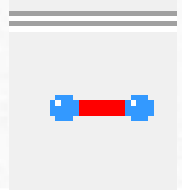
# टूल आइकन इंडेक्स

|  | |  | |  | | |  |  | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Create new molecule | Open molecule | Save molecule | View latest calculation results | Cut | Copy | Paste | Single point energy calculations | Geometry optimization calculations | Electronic absorption spectrum |

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Gaussian calculations | Dock calculations | Dock database calculations | Run a calculation | kill the active window's calculation | Suspend the active window's calculation | Resume the active window's calculation | Display settings dialog for the current window | Molecular settings dialog for the current window | Center the molecule in the window |

# टूल आइकन इंडेक्स

| | | |  |  |  |  |  |  |  |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Add hydrogens | Delete hydrogens | Show/ Hide hydrogens | Clean geometry | Attach selection to a manipulator | distance between two atoms | angle between 3 atoms | torsion angle between 4 atoms | Show the XYZ axes | Orient the molecule |

|  |  | |  |  |  | | |  |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Set mode to ‘Translate’ for left mouse button | Set mode to ‘Rotate’ for left mouse button | Set mode to ‘Zoom’ for left mouse button | Set mode to ‘Rotate’ about Z axes for left mouse button | Set mode to ‘Selection’ for right mouse button | Set mode to ‘Add Atoms’ for right mouse button | Show/Hide the Builder Toolkit | Show/Hide the molecular tree view | Automatic bonds are ON/OFF |

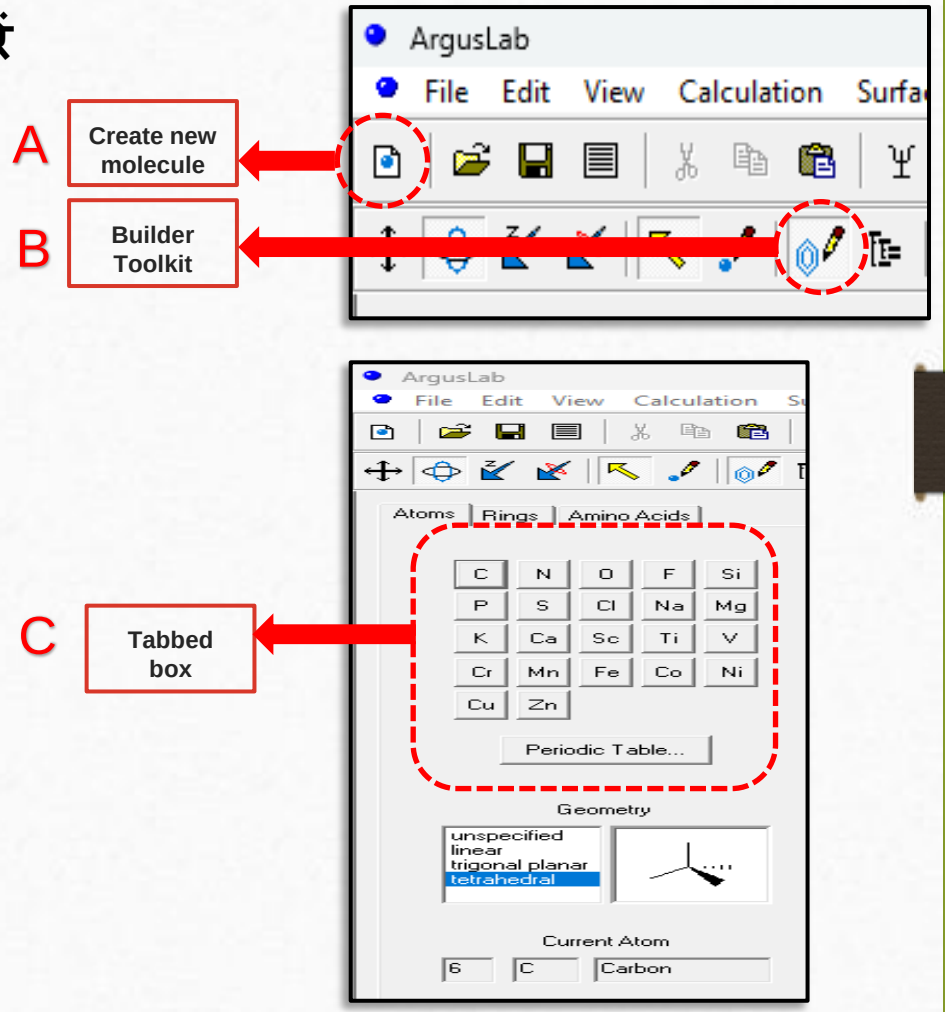
# 3D संरचनाओं का निर्माण

## चरण 1: स्क्रीन पर परमाणुओं को गिराकर अणु का निर्माण करें

A आर्गस लैब खोलें, एक नया दस्तावेज़ बनाएं: **create new molecule icon** पर क्लिक करें

B अणु का निर्माण शुरू करने के लिए, **builder toolkit** का चयन करें

C **Tabbed box** से परमाणुओं, छल्लों या अमीनो एसिड का चयन करके अणुओं का निर्माण करें

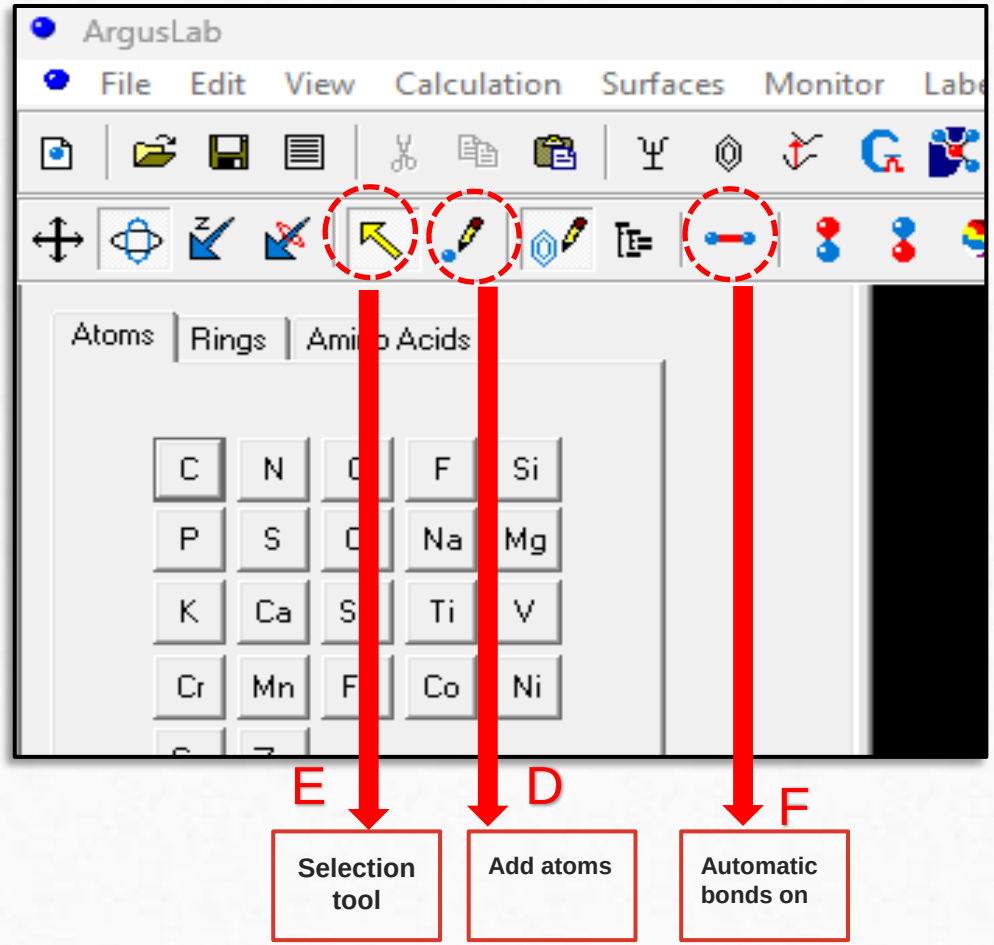


# 3D संरचनाओं का निर्माण

D बिल्डिंग टूल चुनने के बाद, **add atom icon** चुनें

E परमाणुओं को चुनने के लिए **selection tool** का उपयोग करें

F अणुओं का निर्माण शुरू करने के लिए **Automatic bonds** चालू होना चाहिए



# 3D संरचनाओं का निर्माण

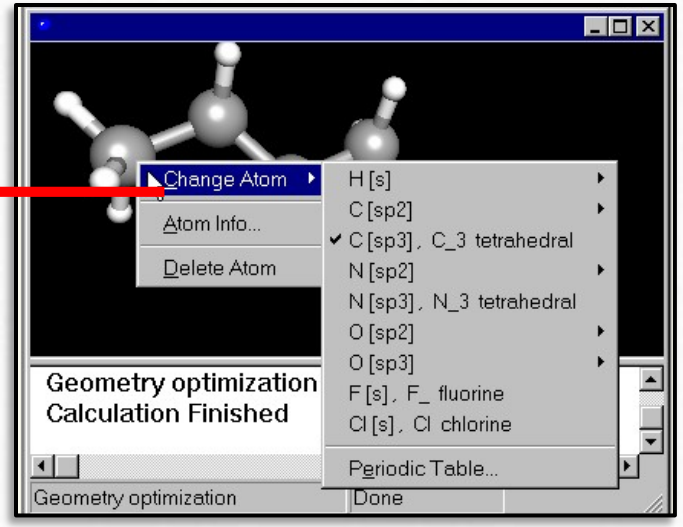
## चरण 2: परमाणुओं को परिभाषित करें

A

परमाणु की ज्यामिति और संकरण बदलने के लिए: चयन टूल पर क्लिक करें: परमाणु पर राइट-क्लिक करें: परिवर्तन परमाणु चुनें

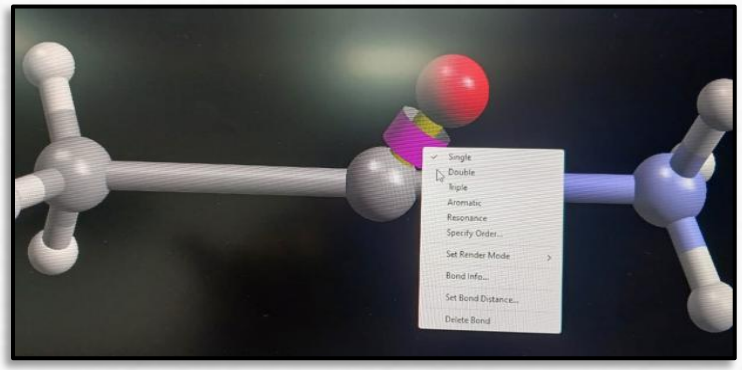
A

Atom geometry and hybridisation is changed



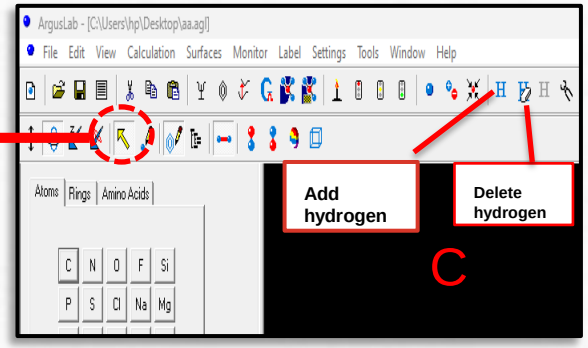

B

डबल बॉन्ड और ट्रिपल बॉन्ड जोड़ने के लिए, बॉन्ड पर राइट-क्लिक करें और चयन टूल का उपयोग करके वांछित बॉन्ड प्रकार का चयन करें



B

Selection tool




C

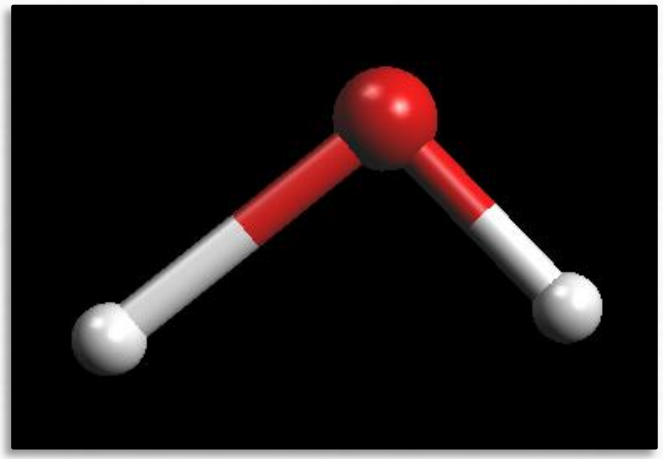
हाइड्रोजन परमाणुओं को जोड़ने के लिए आइकन का चयन करें

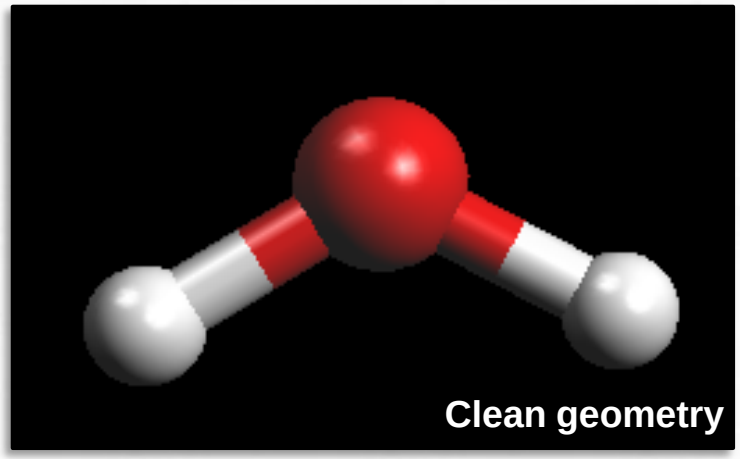
आइकन का उपयोग करके हाइड्रोजन परमाणुओं को हटाया जा सकता है

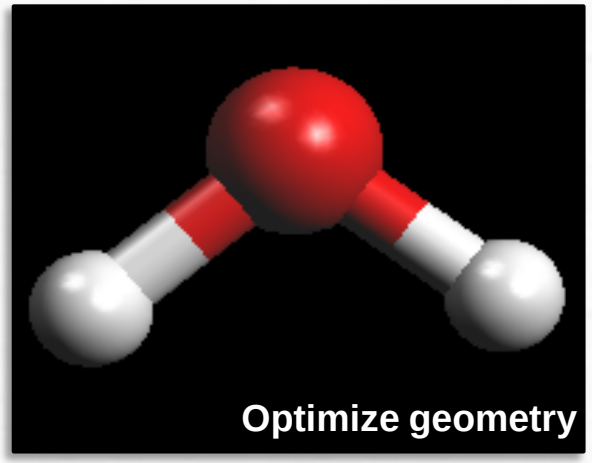
# 3D संरचनाओं का निर्माण

## चरण 3: ज्यामिति अनुकूलन

अणु बनाएँ ⟶ अणु सहेजें (फ़ाइल नाम) ⟶ आइकन का उपयोग करके साफ़ संरचना ⟶ संरचना का अनुकूलन करें

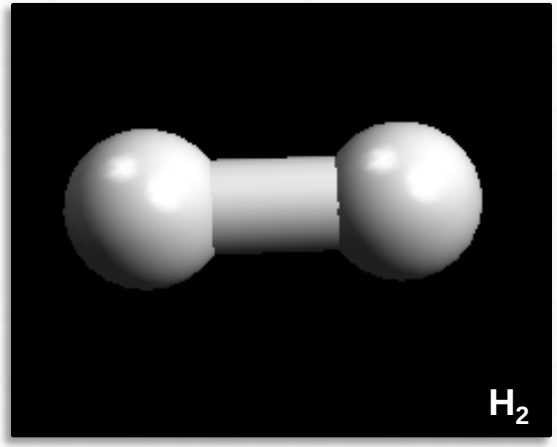


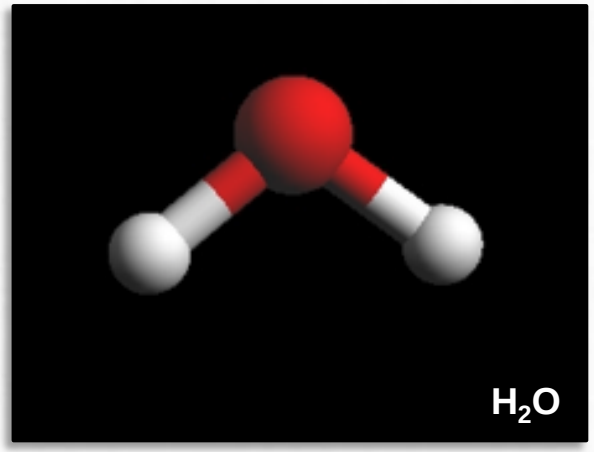


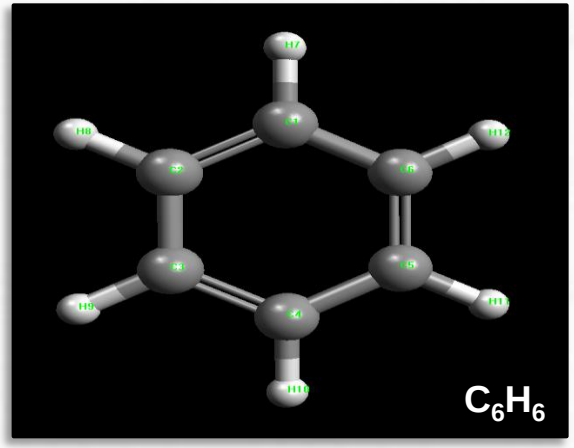



# Hands On Exercise - 1

**$H_2$, $H_2O$, $C_6H_6$ आदि अणुओं का निर्माण करें।**



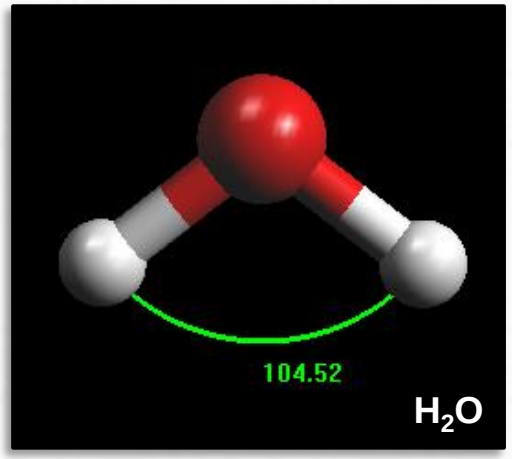



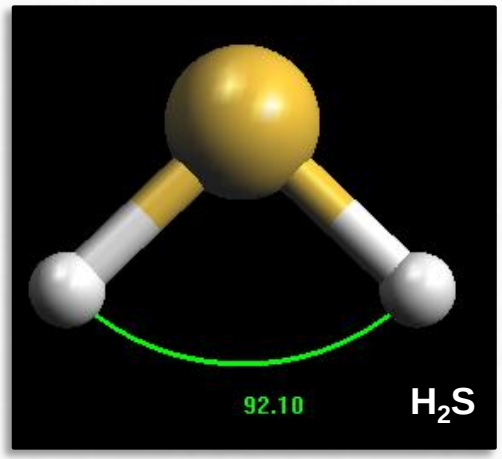

**सीखने के परिणाम :**

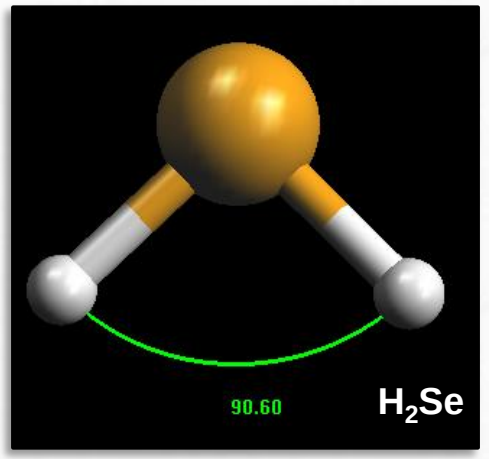
- ✔ ArgusLab में एक समय में एक परमाणु का निर्माण कैसे करें (बिल्डर टूल का उपयोग करके)
- ✔ टेम्प्लेट संरचनाओं का उपयोग करके ArgusLab में अणुओं का निर्माण कैसे करें
- ✔ परमाणु कैसे बदलें
- ✔ अणु की समतलता

# Hands On Exercise - 2

## अनुकूलित बांड कोण $H_2O$, $H_2S$, $H_2Se$ की तुलना करें




जैसे-जैसे केंद्रीय परमाणु की इलेक्ट्रोनगेटिविटी घटती है या परमाणु A का आकार बढ़ता है, बॉन्ड कोण कम हो जाता है

| Molecule | Bond angle |
|---|---|
| $H_2O$ | 104.52 |
| $H_2S$ | 92.10 |
| $H_2Se$ | 90.60 |

**केंद्रीय परमाणु के EN का घटता क्रम**

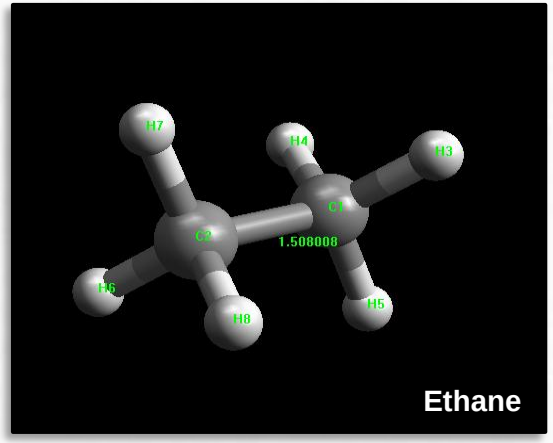
**O > S > Se**

**केंद्रीय परमाणु A के आकार का बढ़ता हुआ क्रम**

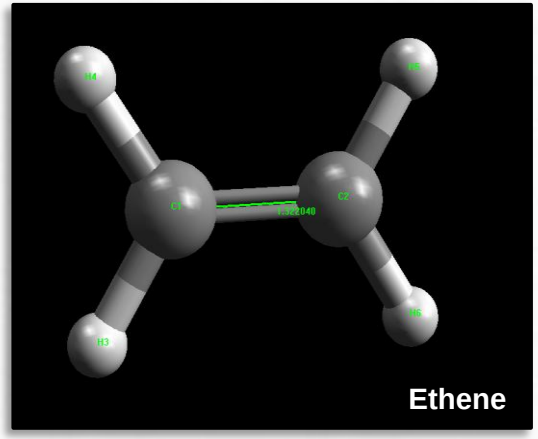
**O < S < Se**

# Hands On Exercise - 3

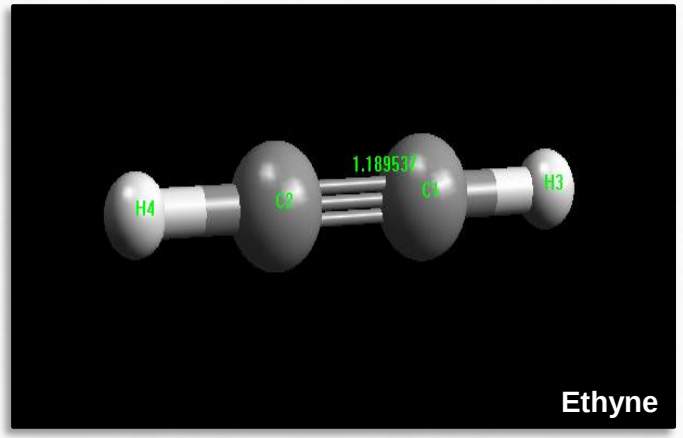
**ईथेन, एथीन और एथीन में अनुकूलित C-C बांड लंबाई और बांड क्रम की तुलना करें**



Ethane



Ethene



Ethyne

**सीखने के परिणाम:**

बांड की लंबाई और बांड क्रम के बीच एक विपरीत संबंध है

| Molecules | C-C bond length | C-C bond order |
|---|---|---|
| Ethane | 1.50800 | 1.00909 |
| Ethene | 1.32204 | 2.00789 |
| Ethyne | 1.18957 | 2.97152 |

**C-C बांड की लंबाई का बढ़ता क्रम**

Ethyne < Ethene < Ethane

**C-C बांड ऑर्डर का घटता क्रम**

Ethyne > Ethene > Ethane

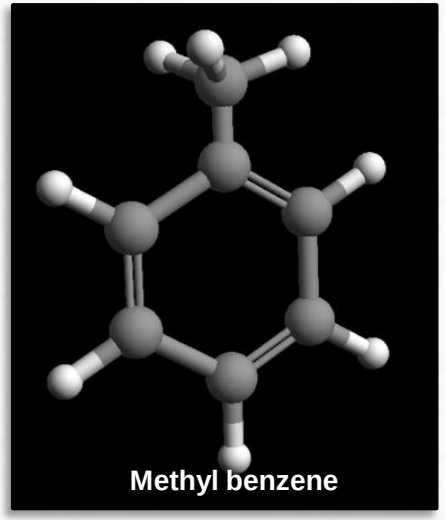
# Hands On Exercise - 4

**साइक्लोहेक्सेन से बेंजीन रिंग की 3D अणु संरचना का निर्माण करें और फिर इसे मिथाइल बेंजीन में संशोधित करें ।**

पहले स्क्रीन पर परमाणुओं को गिराकर साइक्लोहेक्सेन का अणु बनाएं, फिर इसे बेंजीन रिंग में और फिरमिथाइल बेंजीन में बदलें।

**सीखने के परिणाम:**

- 3D में एक रासायनिक संरचना बनाएं (बिल्डर टूल का उपयोग करके)
- आणविक दृश्य
- संकरण



# धन्यवाद