

Outil numérique « Made in Liège »

Semaine de l'Enseignement
Novembre 2017

Armélinda Agnello
D.E. Chimie

Projet



Département de Chimie

En partenariat avec :

- D.E. Géographie

- FSA (Montéfiore)

- Prof. E. De Pauw
- Prof. Ch. Damblon
- Prof. J.-F. Focant
- Dr. A. Agnello

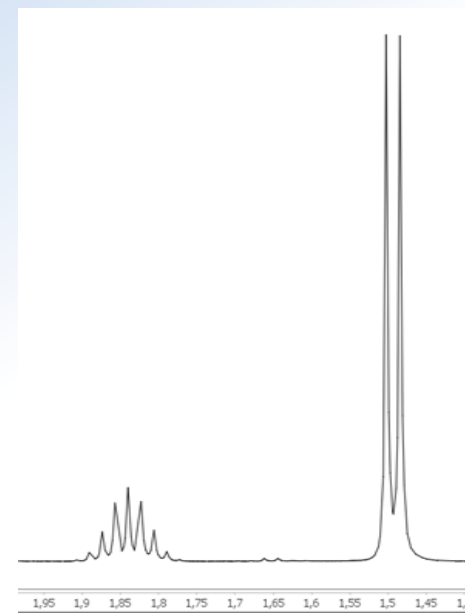
- Prof. R. Billen
- C. Carré

- Prof. B. Boigelot
- S. Vanberg

Outil didactique innovateur



Enseignement de
l'analyse structurale
par méthodes
spectroscopiques



Analyse structurale



Sujet idéal pour **développer** des **compétences** à rassembler des **informations complémentaires** fournies par différentes méthodes d'analyse



- ✓ Enseignement **par problème**
- ✓ Important pour les **travaux intégrés**
- ✓ Développement de l'**esprit critique**



But : remplacer les livres
d'exercices classiques



Avantages pédagogiques :

- ✓ Outil **flexible** et **interactif**
- ✓ Favorisant la **proactivité** de l'étudiant

E-learning

- ✓ Logiciel indépendant et gratuit proche
des logiciels commerciaux

Flexibilité = un « plus » pour l'enseignant

- ✓ Possibilité d'adapter le niveau de difficulté aux objectifs du cours.
- ✓ Introduction d'une approche pédagogique « en spirale »...





Concept centré sur l'étudiant

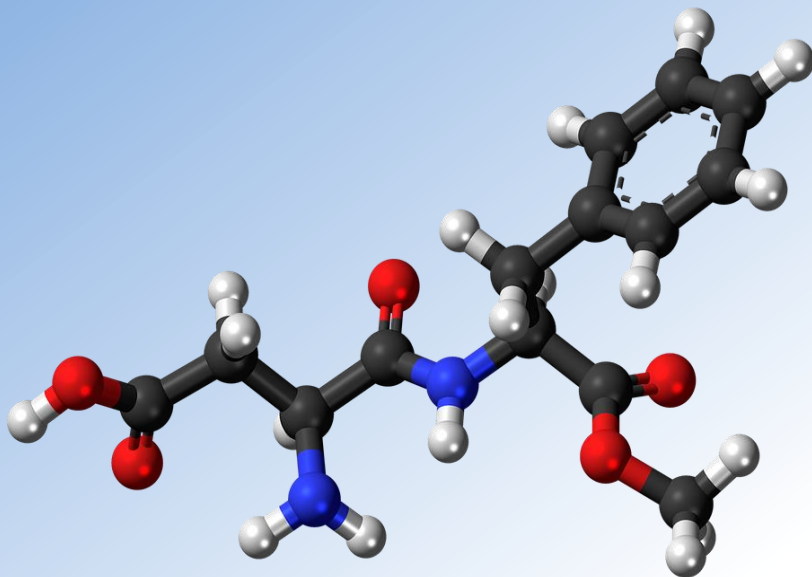
- ✓ Spectres enregistrés par les étudiants (stages)
- ✓ Logiciel développé par des étudiants (doctorat, mémoire)
- ✓ Exercices résolus par les apprenants

Spectres
authentiques \neq parfaits





Méthodes analytiques modernes





Autre base disponible actuellement

AIST - Japan

Avantage quantitatif mais ...

**Spectral Database for
Organic Compounds SDBS**

[Japanese](#)[Introduction](#)[Disclaimer](#)[HELP](#)[Contact](#)[What's New](#)[RIO-DB](#)[FAQ](#)[LINK](#)

SDBS Information

SDBS No.: 2192

Compound Name:

p-(dimethylamino)cinnamaldehyde

Molecular Formula: C₁₁H₁₃NO

Molecular Weight: 175.2

CAS Registry No.:

6203-18-5

Spectral Code:

[Mass :](#)

[13C NMR : in CDCl₃](#)

[1H NMR : 90 MHz in CDCl₃](#)

[IR : nujol mull](#)

[IR : KBr disc](#)

[Chemical Information:](#)

[Return to Search:](#)

[Return to Result:](#)

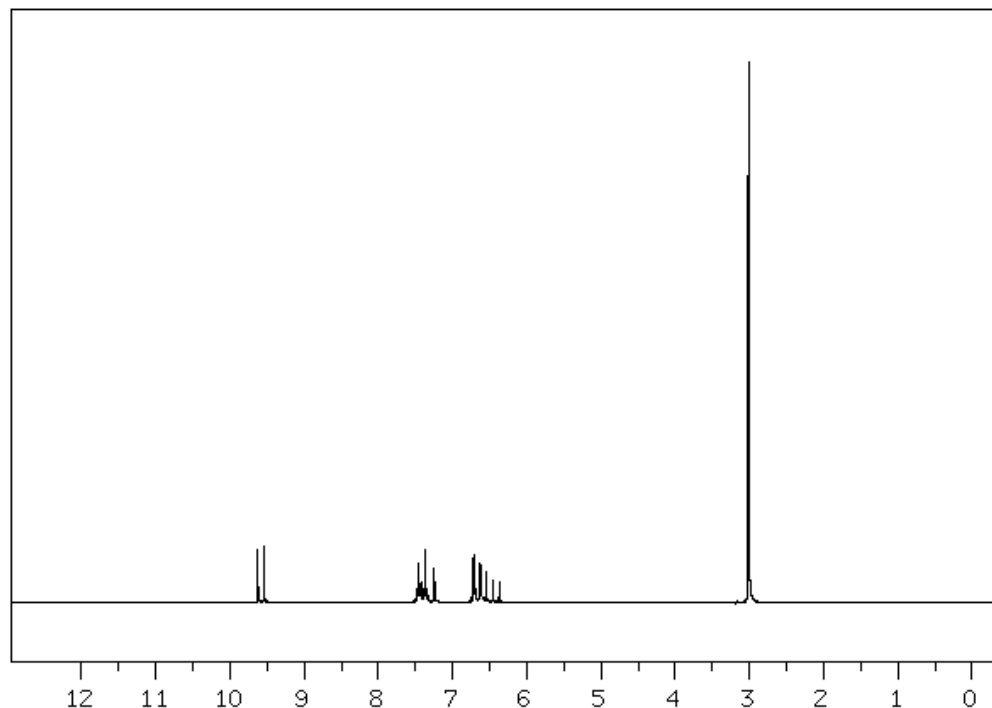
SDBS-¹H NMRSDBS No. 2192HSP-04-413

C₁₁ H₁₃ N O

p-(dimethylamino)cinnamaldehyde

89.56 MHz

0.041 g : 0.5 ml CDCl₃



HSP-04-413

ppm

EI/MS

- Image fixe
- Masses peu visibles
- Interprétation malaisée

SDBS-Mass

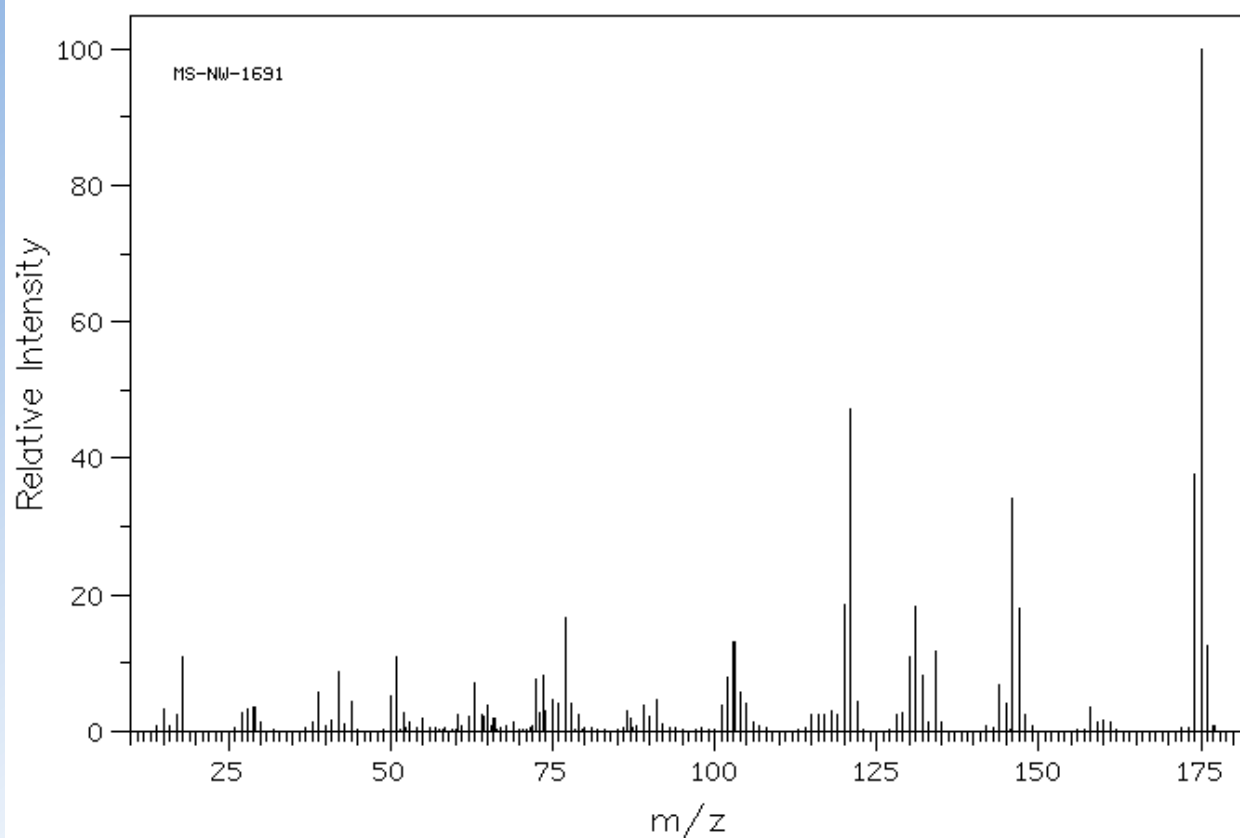
MS-NW-1691

SDBS NO. 2192

p-(dimethylamino)cinnamaldehyde

C₁₁H₁₃NO

(Mass of molecular ion: 175)



Source Temperature: 250 °C

Sample Temperature: 180 °C

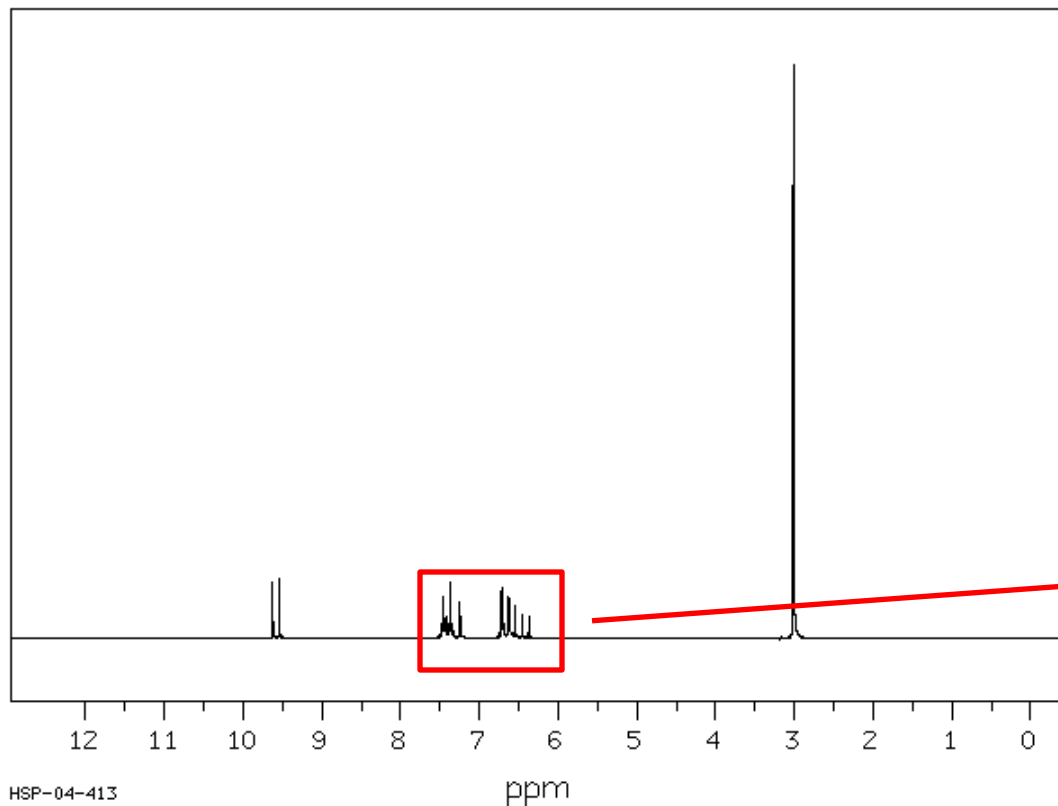
RESERVOIR, 75 eV

RMN (H):

SDBS-¹H NMR SDBS No. 2192HSP-04-413

C₁₁H₁₃NO

p-(dimethylamino)cinnamaldehyde



- Image fixe
- Multiplicité peu visible
- Pas d'intégration
- Interprétation malaisée



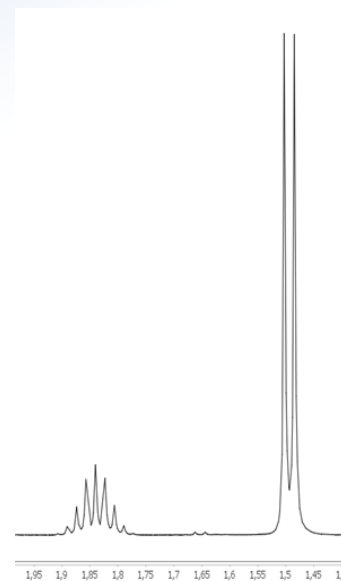
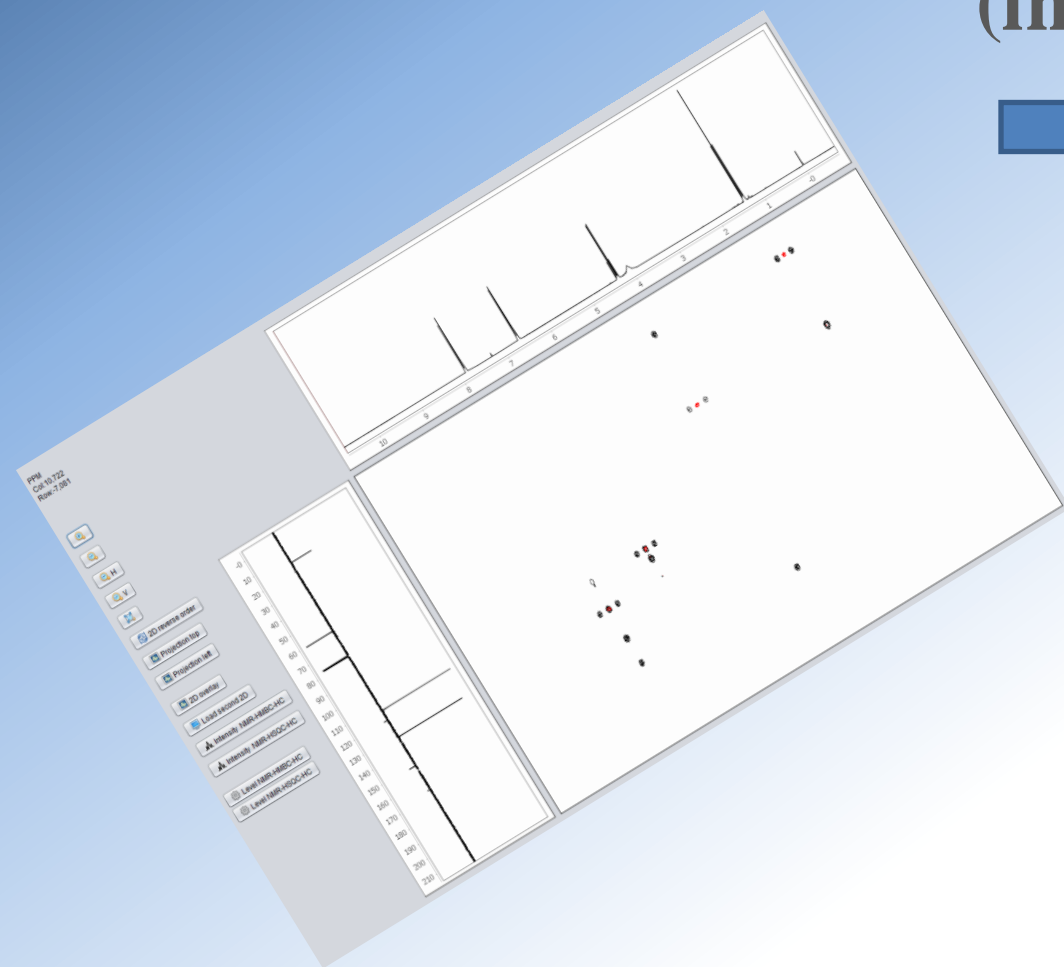
- Pas de spectres 2D

1^{ère} version opérationnelle et testée (interactivité RMN)



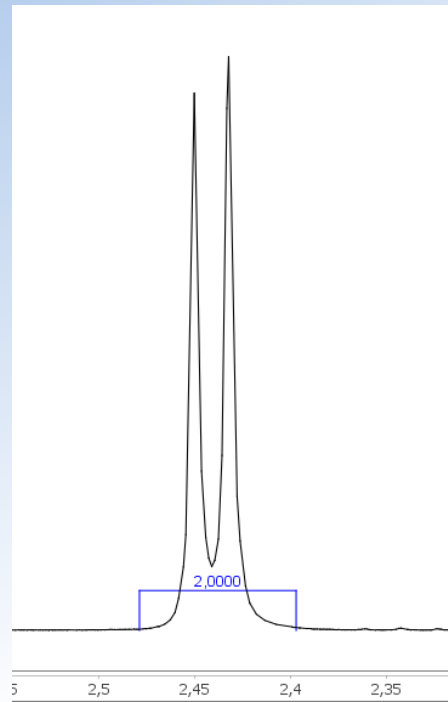
Pourquoi ?

Challenge important à
cause de l'aspect 1D et 2D



1^{ère} version opérationnelle et testée (interactivité RMN)

- ✓ Zoom
- ✓ Intégration des pics
- ✓ Calibration



Tutoriaux disponibles

Evaluation par :



- ✓ Sciences (BAC-3 \approx 20 étudiants)
- ✓ Gembloux Agro-Bio Tech (Bio Ingé BAC-3 \approx 30 étudiants)
- ✓ Médecine vétérinaire (BAC-1 \approx 300 étudiants)
- ✓ Médecine (SBIM BAC-2 \approx 30 étudiants)

Analyse statistique:

Groupe « contrôle »

- ✓ 2010-2013
- ✓ Sans ULg Spectra
- ✓ 1495 examens
- ✓ Moyenne : 7,4/20
- ✓ Médiane : 7,0/20

Groupe « test »

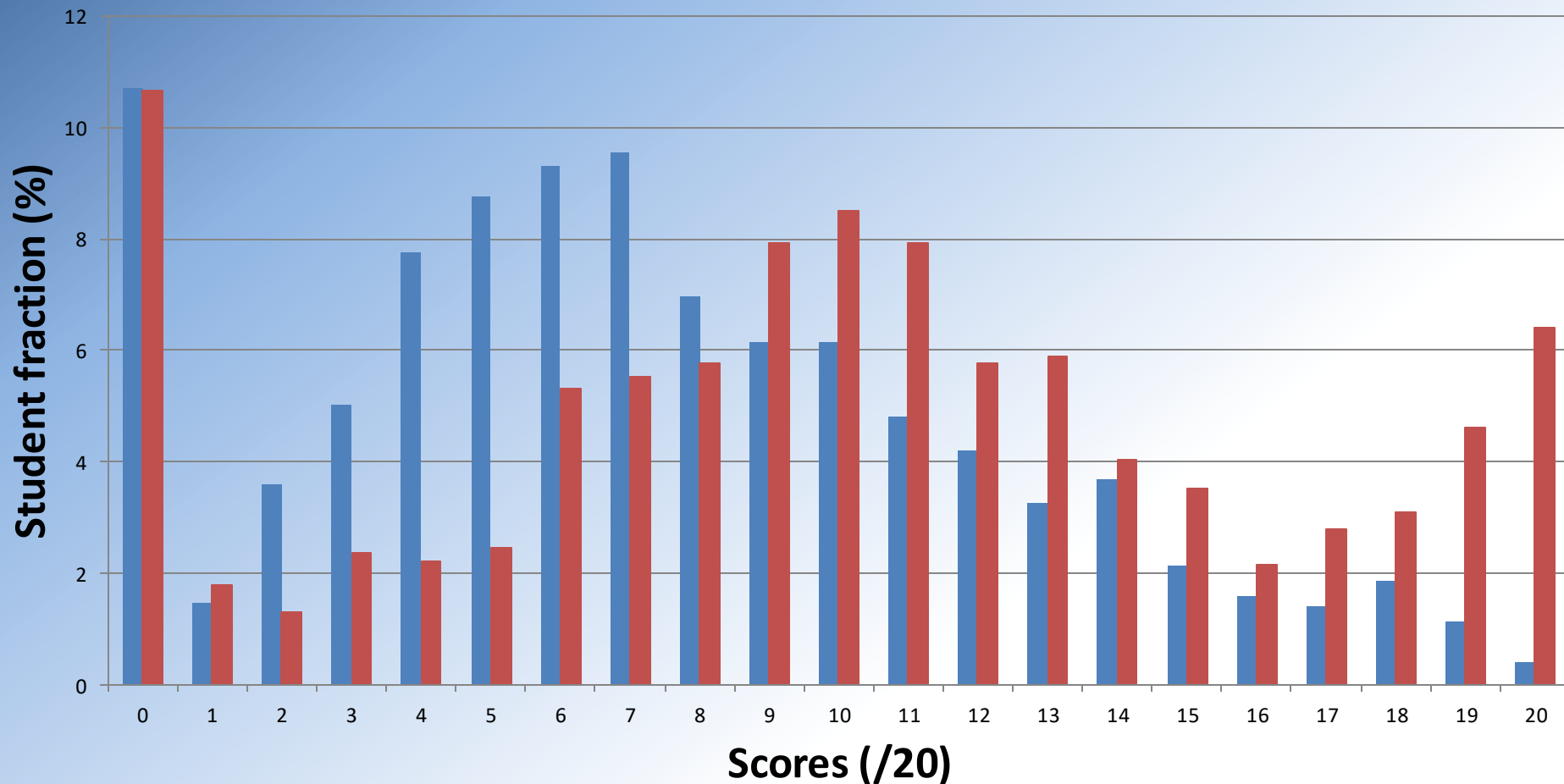
- ✓ 2014-2017
- ✓ Avec ULg Spectra
- ✓ 1390 examens
- ✓ Moyenne : 10,0/20
- ✓ Médiane : 10,0/20

Test U de Mann-Whitney

⇒ différence significative ($p < 0,001$)

Analyse statistique:

■ Without ULg Spectra ■ With ULg Spectra



2^{ème} version opérationnelle

User-
friendly

Rapidité

Interactivité
MS, IR

Application
WEB

Calculateur
de masse



Perspectives



- ✓ Test par les étudiants de la 2^{ème} version
- ✓ MS/MS
- ✓ Feedback aux étudiants

Remerciements



✓ Etudiants stagiaires SBIM :



- **Valérie Dion**
- **Julie Van Leeuw**
- **Anne Heyen**
- **Adeline Geagea**
- **Sally Lamborelle**
- **François Sevrin**
- **Kevin Jehasse**
- **Jérémy Lejeune**
- **Xavier Pepin**
- **Marlon Arnone**
- **Camille Staal**
- **Tom Wissocq**