

Outil numérique « Made in Liège »

Semaine de l'Enseignement
Novembre 2017

Armélinda Agnello
D.E. Chimie

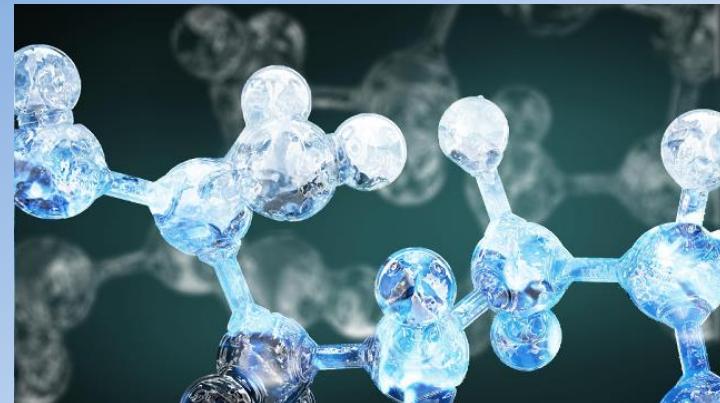
Projet

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

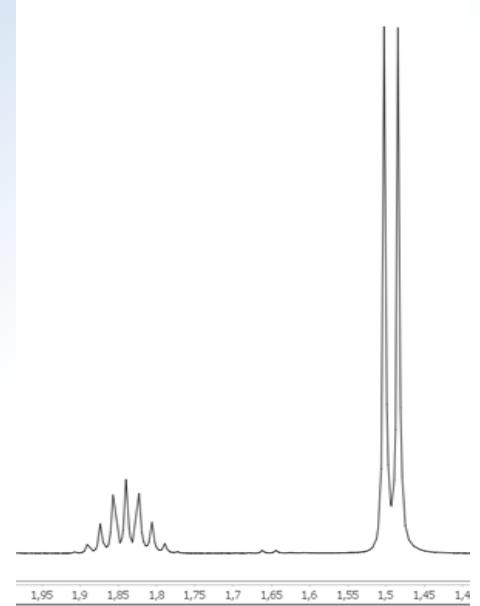
- Prof. R. Billen
- C. Carré

- Prof. B. Boigelot
- S. Vanberg

Outil didactique innovateur



Enseignement de
l'analyse structurale
par méthodes
spectroscopiques





Analyse structurale

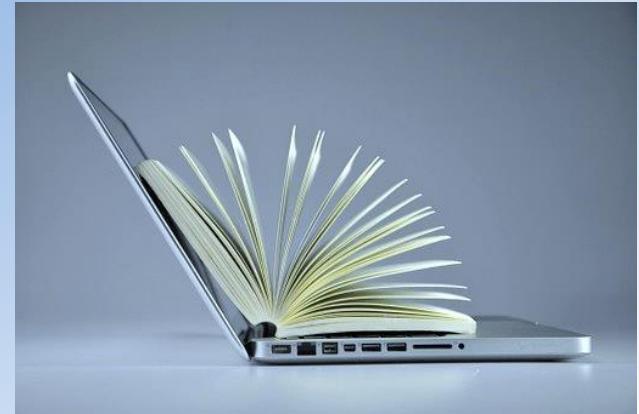


Sujet idéal pour **développer** des **compétences** à rassembler des **informations complémentaires** fournies par différentes méthodes d'analyse

- ✓ 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
- ✓ 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 »...



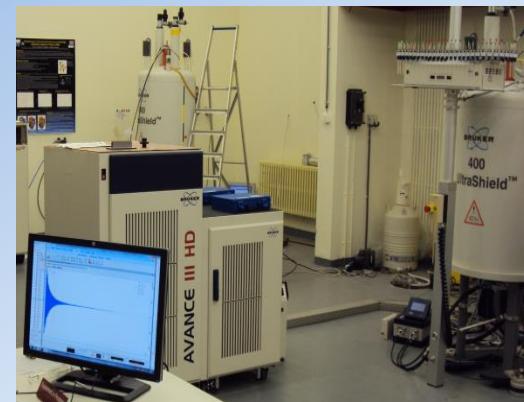
Concept centré sur l'étudiant



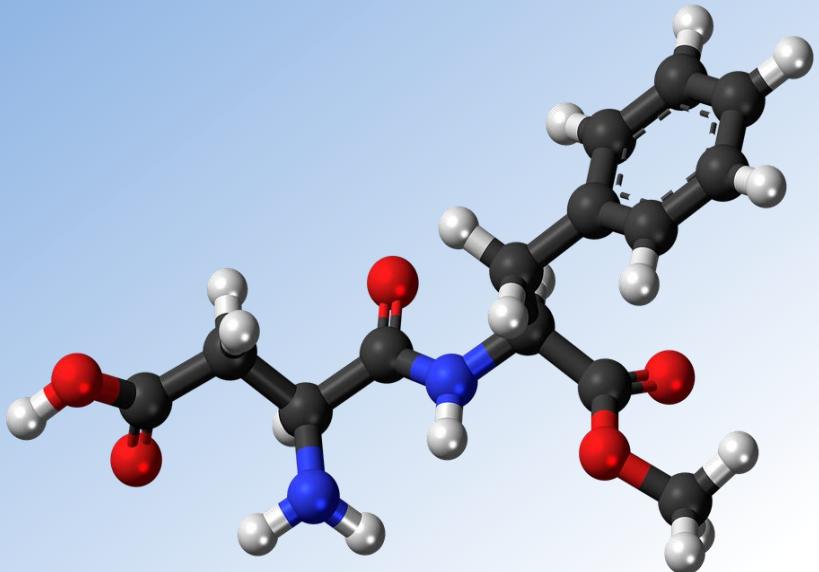
- ✓ Spectres enregistrés par les étudiants (stages)
- ✓ Logiciel développé par des étudiants (doctorat, mémoire)
- ✓ Exercices résolus par les apprenants

Spectres
authentiques ≠ parfaits





Méthodes analytiques modernes



Niveau de difficulté croissant



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](#)

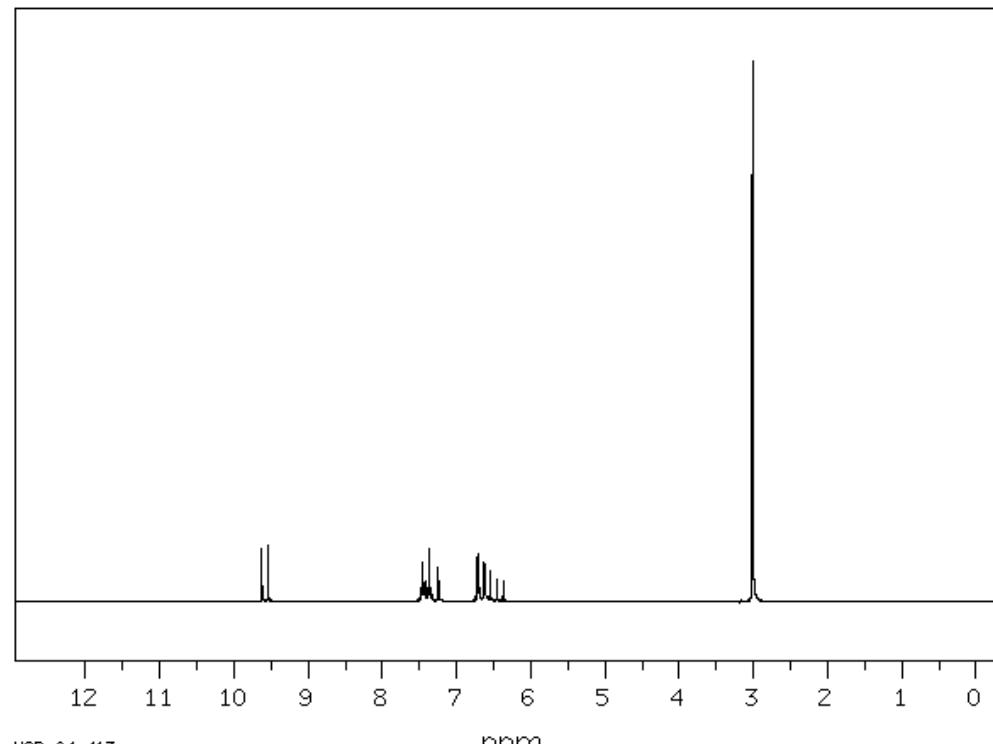
SDBS-¹H NMR SDBS No. 2192HSP-04-413

89.56 MHz

C₁₁H₁₃NO

0.041 g : 0.5 ml CDCl₃

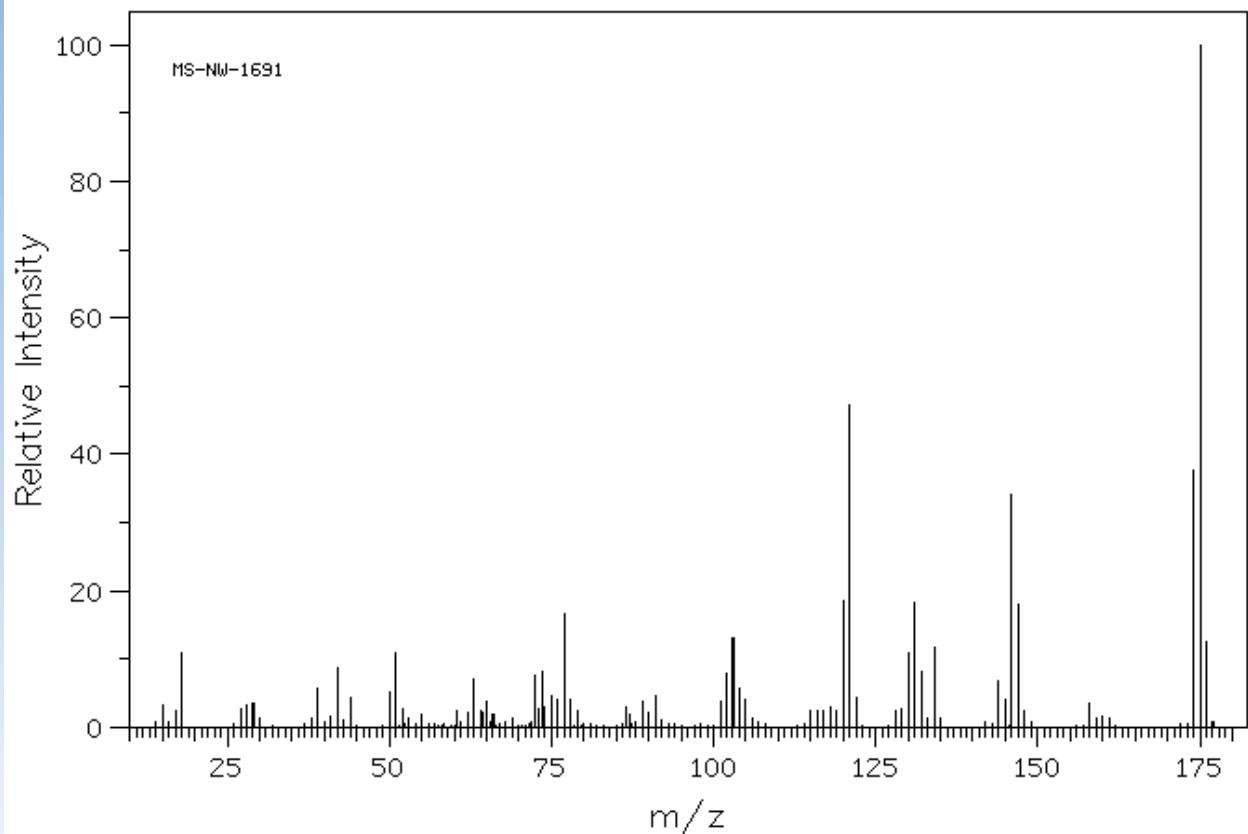
p-(dimethylamino)cinnamaldehyde



- Image fixe
- Masses peu visibles
- Interprétation malaisée

SDBS-Mass

MS-NW-1691 SDBS NO. 2192
p- (dimethylamino)cinnamaldehyde
C11H13NO (Mass of molecular ion: 175)



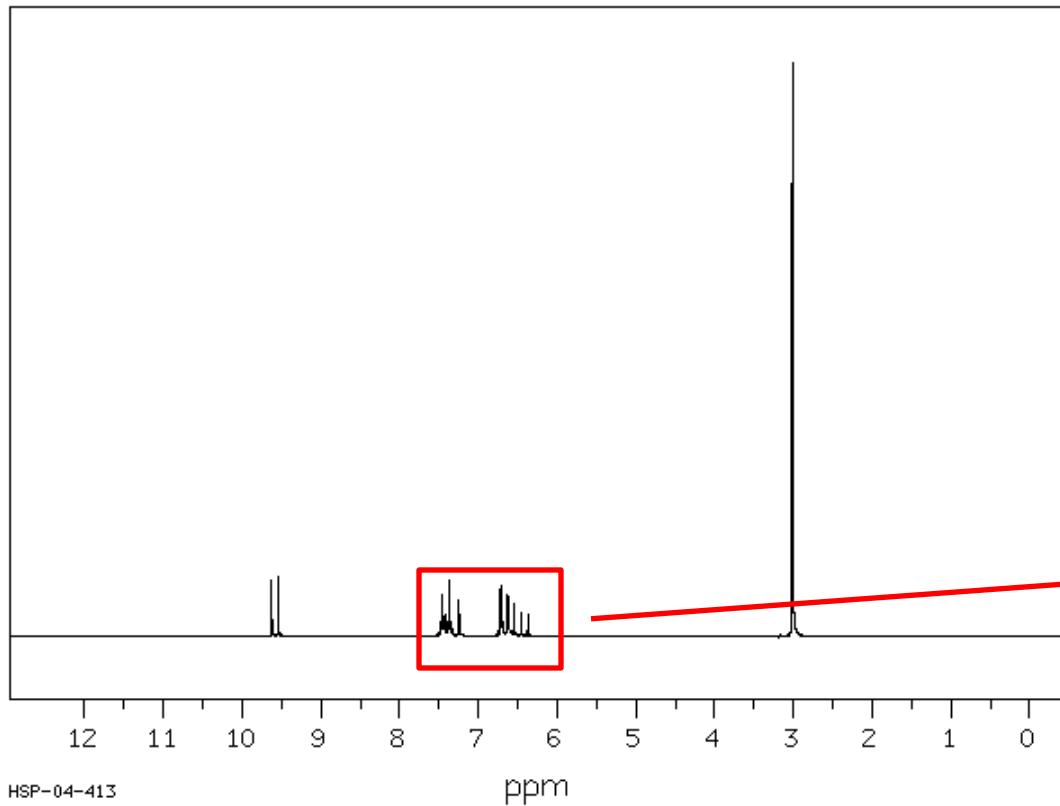
Source Temperature: 250 °C
Sample Temperature: 180 °C
RESERVOIR, 75 eV

RMN (H):

SDBS-¹H NMR SDBS No. 2192 HSP-04-413

C₁₁ H₁₃ N O

p-(dimethylamino)cinnamaldehyde



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



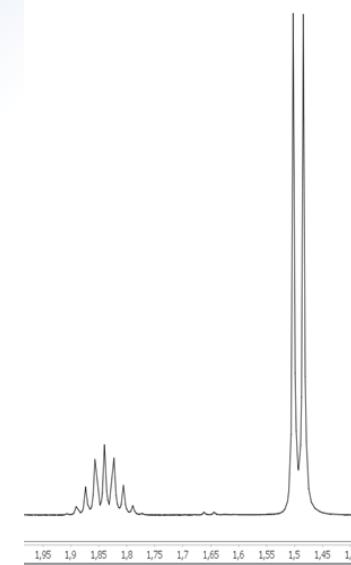
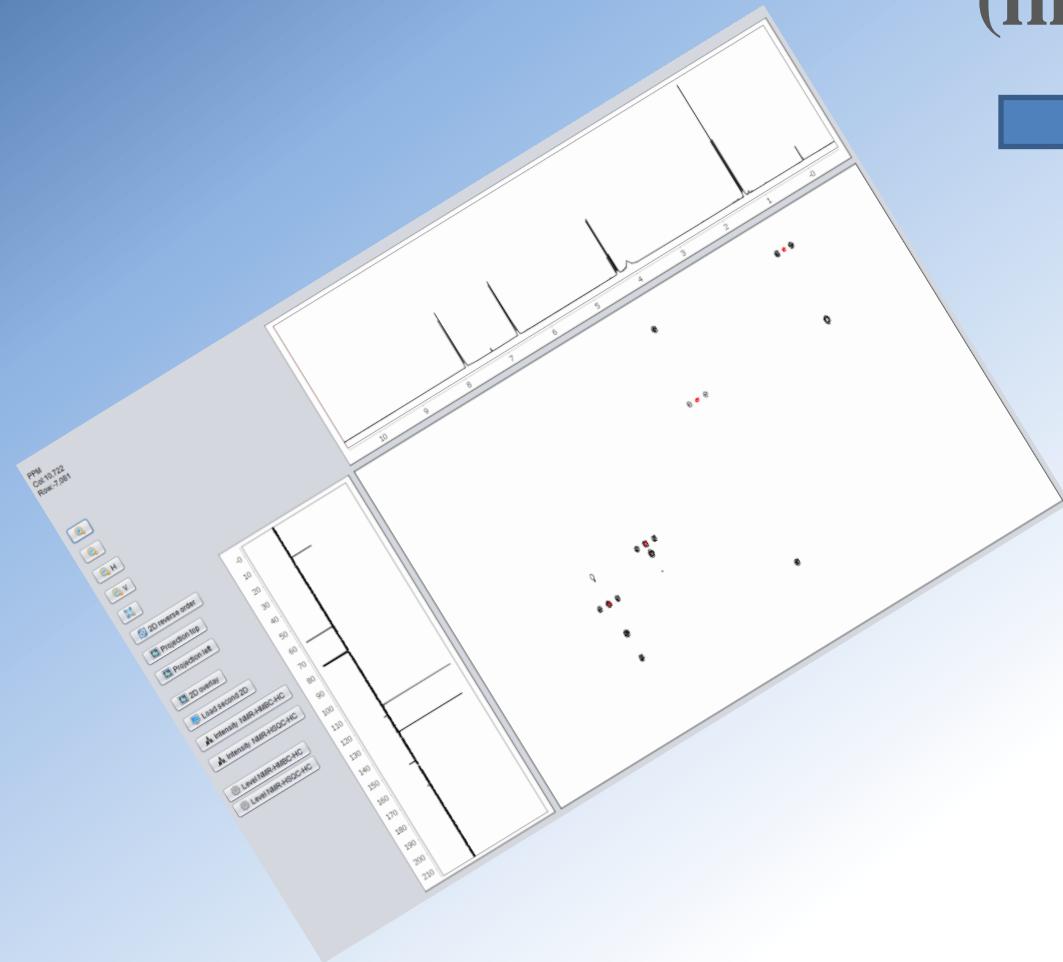
- **Pas de spectres 2D**

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



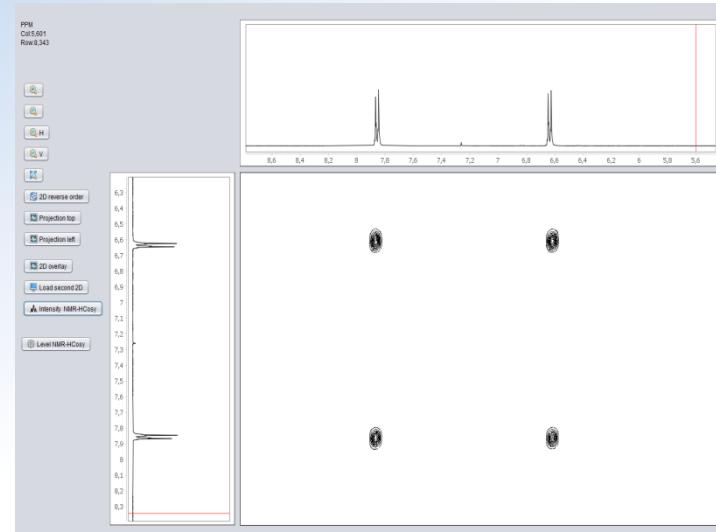
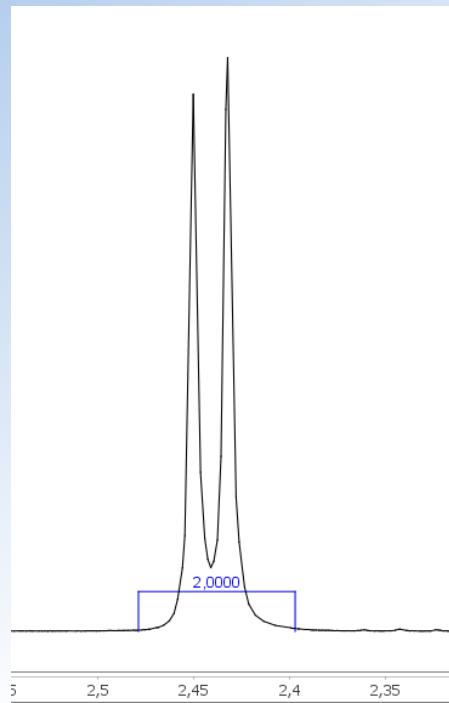
Pourquoi ?

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

Analyse statistique:

Groupe « contrôle »

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

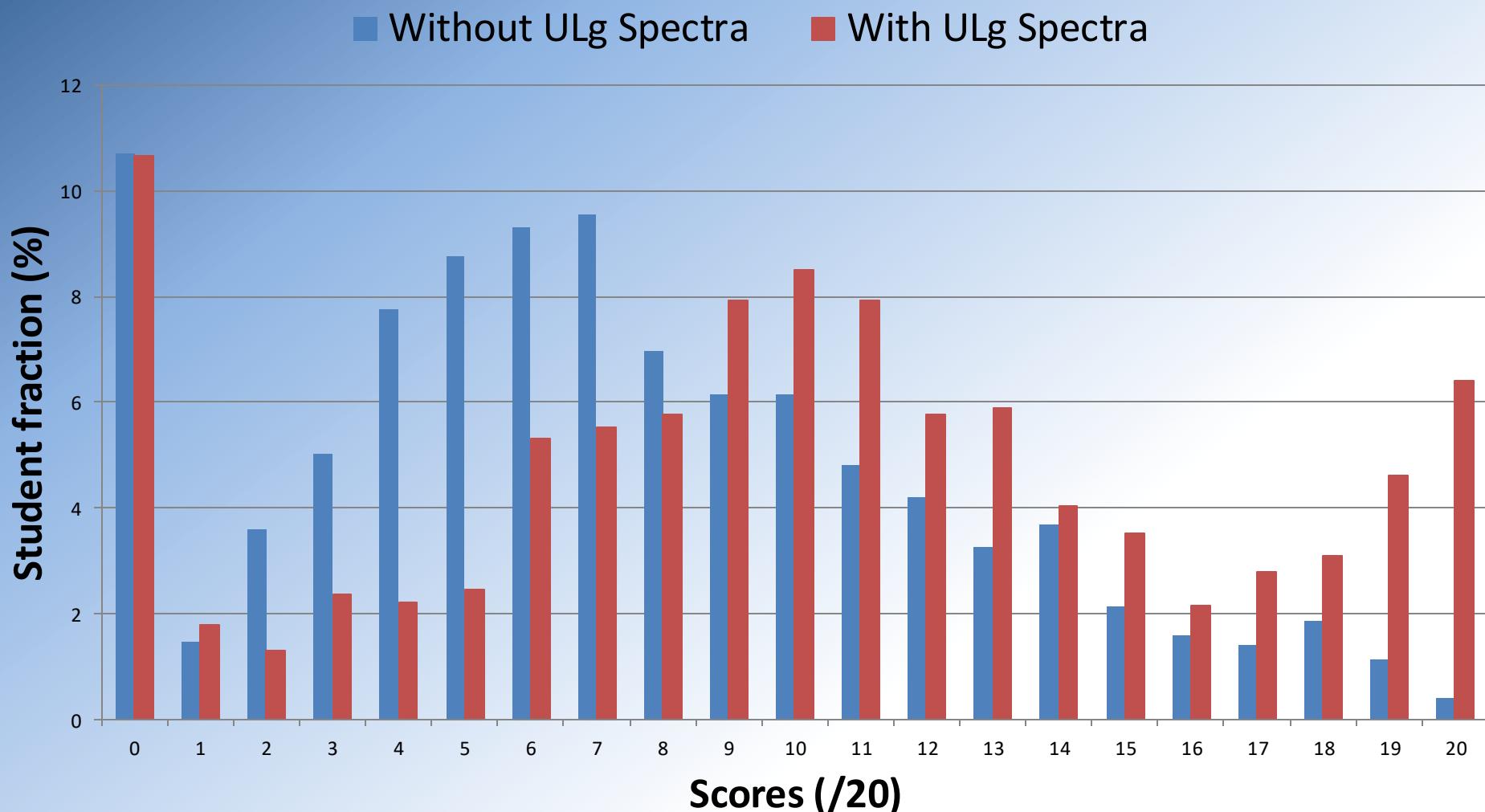
Groupe « test »

- ✓ 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:



2ème version opérationnelle



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**