

Formation à la détermination des structures chimiques¹

par Jean-Pierre RABINE, Michel ROUILLARD
et Daniel CABROL-BASS

Laboratoire de Recherches sur la Représentation et
le Traitement de l'Information Chimique (LARTIC)
Université de Nice Sophia-Antipolis - 06108 Nice Cedex 02

2 - Spectroscopie infrarouge

S'agissant de la spectroscopie infrarouge, il est précisé dans le nouveau programme chimie des classes préparatoires que l'on étudiera les notions qualitatives sur les modes normaux de vibration moléculaire et que les bandes caractéristiques des principaux groupes seront présentées. Bien évidemment, l'utilisation des tables de fréquences infrarouge pour la détermination de structures simples est autorisée.

C'est dans les années 1985 que notre centre s'est particulièrement intéressé aux possibilités de création de partenaires de résolutions de problèmes en spectrométrie infrarouge à partir d'une base générale de règles de déduction établies à la fois sur les tables de fréquences mais aussi sur la forme des bandes et leur intensité. La spectroscopie infrarouge était un domaine qui nous semblait plus accessible à cette méthodologie que la résonance magnétique nucléaire.

Nous avons ainsi créé le logiciel *Exp'AIR* [1 et 2]. Ce programme, véritable partenaire de résolution de problèmes, offre un certain nombre de ressources facilitant le travail d'interprétation des spectres IR tout en laissant l'étudiant responsable de ses choix d'attributions. Bien que ce programme comporte un système-expert qui incorpore un nombre important de connaissances sur la spectroscopie infrarouge, son rôle n'est pas d'effectuer l'interprétation du spectre à la place de l'utilisateur en fonctionnant comme une sorte de boîte noire. Bien au contraire, en

1. *N.D.L.R.* : Suite de la première partie «*Formation à la détermination des structures chimiques, 1 - Spectroscopie de Résonance Magnétique Nucléaire du Proton*» déjà paru dans le B.U.P. n° 788.

commentant chaque étape de la détermination structurale, il contribue plus à l'apprentissage de la méthode d'interprétation qu'à l'interprétation elle-même.

Mais attention, de par sa conception, *Exp'AIR* n'offre aucune formation théorique à la spectroscopie infrarouge, aucun cours sur les différentes notions nécessaires à l'appréhension globale du processus complexe d'interprétation d'un spectre. *Exp'AIR* favorise «seulement» la maîtrise de l'interprétation des données de spectroscopie infrarouge [3], mais son utilisation présuppose la connaissance préalable des principes physiques élémentaires sur lesquels repose la spectroscopie infrarouge et que quelques exemples d'interprétation de spectres aient déjà été présentés à l'étudiant.

De la même manière, *IR-MENTOR* [4], produit très voisin récemment mis sur le marché, n'apparaît pas comme un produit d'auto-formation à la spectroscopie infrarouge mais bien comme une aide à l'interprétation des spectres infrarouge. Il existe bien quelques produits d'enseignement assisté par ordinateur concernant l'infrarouge [5 et 6], mais aucun ne permet une formation suffisamment générale et complète. Le seul produit, à notre connaissance, qui pouvait satisfaire cette formation est un produit anglophone [7] au demeurant assez ancien et difficilement utilisable pour l'enseignement en langue française.

Pour tenter de pallier cette carence nous avons développé, suite à une demande du Conservatoire National des Arts et Métiers (Chaire des Méthodes Physico-Chimiques d'Analyse, Professeur Claude GENTY, PARIS), un ensemble complet d'auto-formation à la spectroscopie infrarouge [8].

1. UN EXPert ASSISTANT EN INFRAROUGE : *Exp'AIR*

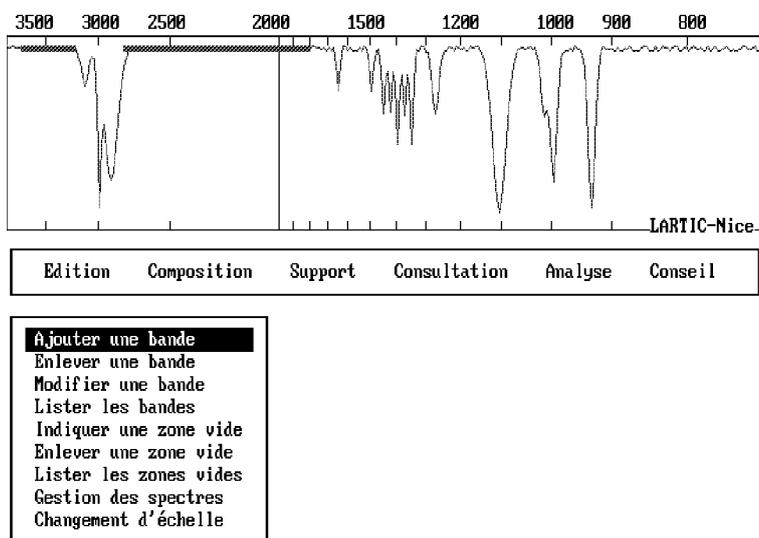
Dans un premier temps nous avons essayé de développer une interface homme-machine conviviale qui permettait d'interpréter les messages des étudiants. Ce prototype, réalisé avec un langage (Prolog) adapté à la réalisation de système-experts, nous a également montré combien il était difficile de cerner efficacement le comportement de l'élève. De ce fait, dans notre développement ultérieur, nous avons dû nous restreindre à une interface de communication plus directive. Nous avons donc limité le choix de l'utilisateur à un choix dans des menus déroulants. Ces menus peuvent s'enrichir au fur et à mesure du

développement du travail de l'étudiant comme c'est le cas par exemple pour le menu Edition.

1.1. Fonctionnement d'Exp'AIR

Exp'AIR agit comme un «partenaire» pour l'interprétation d'un spectre qui doit être décrit par l'utilisateur. Le programme ne comporte aucun exercice résolu ou à résoudre, il constitue un outil qui peut aider l'utilisateur dans l'interprétation du spectre expérimental qu'il a en main.

Au vu de ce spectre IR, la première tâche que l'étudiant aura à accomplir est de décrire quelles sont les bandes du spectre qui sont significatives, mais aussi les zones du spectre qui ne comportent aucune bande significative (figure 1).



Fi: Aide Choisissez une option (Up ou Down) et validez Esc: Abandon

Figure 1 : Exp'AIR.

Cette saisie du spectre s'effectue à partir du menu édition. Ce menu s'enrichit au fur et à mesure de la saisie. Chaque bande du spectre sera décrite en fonction de trois critères : fréquence, intensité et forme de la bande. Dès qu'ils sont entrés, le système affiche la bande telle qu'elle a été décrite.

Il est possible de modifier directement l'un des critères pour atteindre une «meilleure ressemblance» avec la bande que l'on peut voir sur le spectre expérimental. On procède ainsi pour toutes bandes qui sont jugées importantes. Il s'agit en fait de suivre une «lecture du spectre». Cette démarche n'est pas unique mais elle doit recouvrir plusieurs impératifs d'une bonne interprétation comme l'absence ou la présence de certaines bandes significatives en ne limitant pas cette reconnaissance à la seule fréquence de la bande qui est nécessaire mais non suffisante.

Le spectre étant décrit, l'étudiant peut donner des indications sur la composition du composé s'il désire que ces données soient prises en compte dans l'analyse du spectre. Ce peuvent être des informations partielles : présence d'oxygène, d'azote, nombre de centres d'insaturation dans la molécule ou complètes : formule brute du composé, le système se chargeant de calculer le nombre de centres d'insaturation. Le système étant limité aux composés présentant du carbone, de l'hydrogène, de l'oxygène, de l'azote et des halogènes, l'examen de la composition du composé et le calcul du nombre de centres d'insaturation permet de tirer des conclusions sur la présence ou non de certaines fonctions chimiques. Bien entendu, l'analyse du spectre pourra s'effectuer en tenant compte ou pas des données introduites au niveau de la composition. Dans la négative, le système cherchera toutes les possibilités d'attribution des bandes sans prendre en compte la présence ou l'absence de tel ou tel élément dans la composition. L'analyse sera donc parfois entaché d'un bruit de fond important. L'analyse pourra indiquer par exemple la possibilité d'avoir des fonctions azotées alors que la formule du composé ne comporte pas d'azote. Si par contre, l'on demande une analyse qui tient compte de la composition, toutes les fonctions chimiques azotées seront alors éliminées.

Le support d'analyse du spectre (film, solvant) peut également être précisé. L'interprétation d'un spectre réalisé dans un solvant ne sera pas abordée de la même façon que celle d'un échantillon réalisé en film. Si le spectre est fait dans un solvant, il faut faire la part entre les bandes du composé et celles du solvant... Si le spectre est réalisé en film, toutes les bandes sont attribuables au composé. Cette option permet donc d'indiquer au système les conditions d'enregistrement du spectre et dans le cas où ce dernier a été fait dans un solvant, EXP' AIR affiche en superposition au spectre saisi les principales bandes que l'on peut attendre pour ce solvant. L'étudiant peut donc, grâce à cet affichage en superposition, déduire facilement quelles sont les bandes attribuables à

la fois au solvant et celles qui sont plus spécifiques du composé analysé. Reste bien entendu à gérer la simultanéité, c'est-à-dire la superposition de bandes liées à des groupements communs au solvant et au composé étudié !

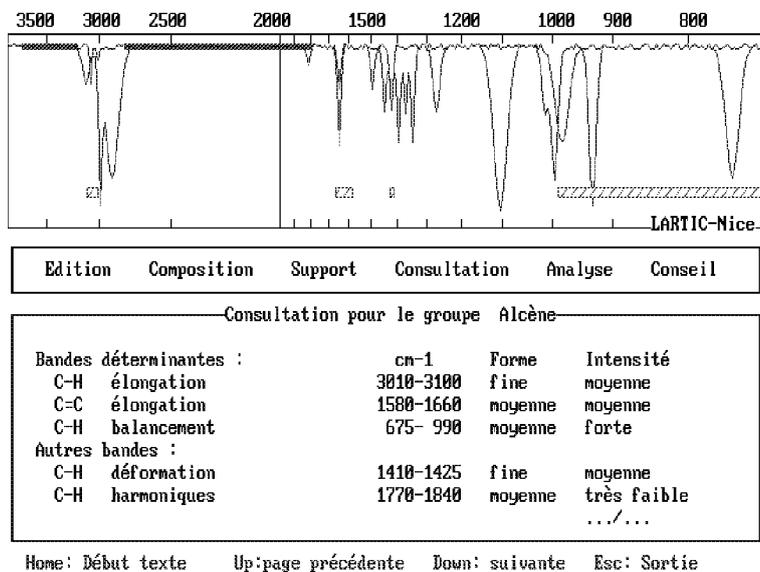


Figure 2 : Exp'AIR - Consultation pour le groupe alcène.

L'étudiant peut alors essayer d'interpréter lui-même le spectre sans utiliser l'option analyse. Pour l'aider dans cette tâche, il peut consulter la base de donnée infrarouge et l'exploiter de différentes manières pour tenter cette interprétation du spectre. Il peut consulter la base de données en examinant quelles sont les bandes généralement attendues pour telle ou telle fréquence, quelles sont les bandes attendues pour tel ou tel groupement fonctionnel, quel serait le spectre théorique d'un composé comportant tel ou tel groupement fonctionnel, ou encore explorer l'une des dix-huit spectrothèques qui sont offertes à sa consultation, etc.

L'analyse du spectre s'effectue par la mise en coïncidence des données introduites (bandes, zones vides, composition) avec les informations figurant dans la base de données. Cette analyse conduit à la liste des groupes fonctionnels qui présentent des fréquences d'absorption par-

tiellement ou totalement en coïncidence avec celles décrites dans le spectre. Le travail du module d'analyse peut être assimilé à un système de trois filtres successifs :

- *tri sur la composition* : comparaison des informations sur la composition introduite avec celles de la base de données. Seuls sont retenus les groupes fonctionnels dont la composition (hétéroatomes et centres d'insaturation) est compatible avec les données introduites avec l'option «composition». Ce filtre peut être désactivé lors du choix des modalités d'analyse ;
- *comparaison des bandes de la base avec celles introduites* : selon le mode d'analyse choisi (standard ou strict), la comparaison sera plus ou moins stricte... ;
- *tri dans les zones vides* : le système vérifie qu'aucune bande des groupes retenus n'est comprise dans une zone déclarée vide. Si c'est le cas, le groupe fonctionnel correspondant sera éliminé des résultats de l'analyse.

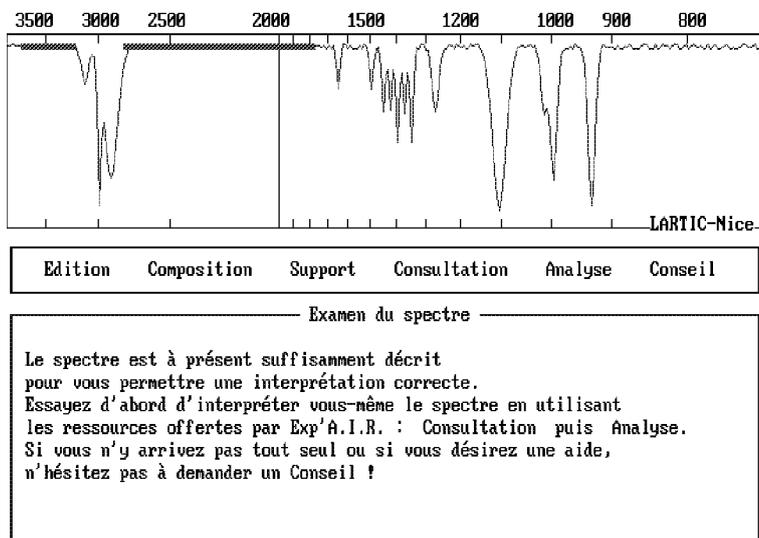
A tout moment de son travail, l'étudiant a également accès au module de conseils qui a pour tâche de sélectionner le ou les conseils les plus adaptés à la situation existante au moment de l'appel. Le module de conseil a deux tâches essentielles qui sont :

- guider l'étudiant pour la description du spectre du composé étudié et détecter d'éventuelles incohérences dans la description,
- fournir des conseils d'ordre méthodologique, mais néanmoins spécifiques, ayant pour but d'aider l'étudiant à interpréter le spectre qu'il a décrit.

Ce module a été conçu à partir d'un système-expert qui utilise des règles de déduction du type :

- **SI** (ensemble de conditions),
- **ALORS** (ensemble de conséquences).

L'activation d'une règle se faisant lorsque l'ensemble de ses conditions est réalisé. Les conséquences correspondantes sont soit des conclusions internes au système, soit des avis destinés à l'étudiant. Le système peut même être amené à poser des questions complémentaires à l'étudiant et/ou lui demander de prendre des décisions.



F1: Aide Autre touche: Continuer

Figure 3 : Exp'AIR - Avis donné par le module de conseils.

1.2. Contenu d'Exp'AIR

Exp'AIR comprend :

- un éditeur de spectres qui permet la description du spectre étudié ;
- un module de simulation graphique qui permet d'afficher une esquisse du spectre étudié ;
- un gestionnaire de spectres qui autorise l'archivage des spectres à interpréter ;
- une base de données spectrales qui peut être consultée par fréquence, région ou groupe fonctionnel ;
- une librairie de spectres expérimentaux. Plus de trois cents spectres classés dans dix-huit spectrothèques spécialisées sont maintenant en accès direct ;
- un module d'analyse qui compare les données du spectre décrit avec celles de la base de données, et qui propose ensuite des attributions de bandes ;
- un expert-conseil capable d'aider l'étudiant dans sa démarche en donnant des conseils qui tiennent compte à la fois du problème

spécifique à résoudre et des choix antérieurs. Ce module de conseils a deux tâches essentielles :

- guider l'étudiant pour la description du spectre du composé étudié et détecter d'éventuelles incohérences dans la description,
- fournir des conseils d'ordre méthodologique, mais néanmoins spécifiques, ayant pour but d'aider l'étudiant à interpréter le spectre qu'il a décrit.

Exp'AIR comprend également un autre programme CONVERT

CONVERT permet de récupérer des spectres provenant de spectrothèques informatisées (sur compatibles PC) en convertissant les fichiers de format JCAMP.DX au format utilisé par Exp'AIR. Il permet également la saisie de la formule développée, son positionnement sur le spectre pour l'affichage et permet aussi la modification du nom du composé (pour une traduction éventuelle).

Les spectres convertis ne sont pas exploitables directement par Exp'AIR. Un autre programme SPECTRO permet la création des spectrothèques particulières à partir de ces fichiers convertis. Seule la spectrothèque ainsi créée est exploitable par Exp'AIR. Ces outils peuvent donc permettre d'enrichir, selon les besoins, la spectrothèque.

2. SPECTROMÉTRIE INFRAROUGE INTERPRÉTATION DES SPECTRES INFRAROUGE

A l'opposé du programme Exp'AIR qui se veut être un «partenaire de résolution» de problème et qui s'adresse principalement aux étudiants qui connaissent déjà la spectroscopie infrarouge, l'utilisation de cet ensemble «spectrométrie infrarouge et interprétation des spectres infrarouge» doit permettre à l'étudiant d'atteindre les deux objectifs suivants :

- être capable d'établir les principales fonctions chimiques d'un composé organique au vu de son spectre infrarouge,
- être capable de prévoir les bandes IR principales d'un composé organique à partir de sa formule développée.

Cet ensemble d'auto-formation à la spectrométrie d'absorption infrarouge, par sa conception, est utilisable à plusieurs niveaux ; d'une part en auto-formation pour les personnes désirant se former à cette technique spectroscopique, mais également en renforcement de con-

naissances pour les personnes désirant compléter leur formation à cette technique. La modularité de l'ensemble permet à la fois une découverte étape par étape du contenu, ou un accès direct au renseignement désiré. Cette formation complète incluant un cours, des exercices et des auto-évaluations, d'une durée approximative de près de cent heures, permettra à l'étudiant d'étudier à son propre rythme plus de deux cent cinquante spectres et ainsi d'acquérir les bases nécessaires et suffisantes pour pouvoir interpréter un spectre infrarouge.

Cet ensemble a été mis en expérimentation au conservatoire national des arts & métiers (CNAM) de Paris au cours des deux années passées. Les résultats observés sont très positifs. L'enseignant qui ne dispose que d'un nombre limité d'heures d'enseignement pour cette technique de spectrométrie infrarouge utilise des images d'écran des différents modules pour illustrer son cours. Les modules sont installés et mis en libre service dans une salle «informatique pour tous» ouverte et accessible tous les jours de la semaine.

L'ensemble a été également utilisé cette année pour un stage de formation professionnel organisé par le CACEMI (Centre d'Actualisation des Connaissances et de l'Étude des Matériaux Industriels) du CNAM de Paris. Ce stage de dix-huit heures (répartis sur trois jours) a permis à des adultes en formation d'acquérir les principes nécessaires à l'interprétation des spectres infrarouge. Comme il était impossible de parcourir l'intégralité des modules pendant la durée de ce stage, l'ensemble des modules a été fourni aux stagiaires pour qu'ils puissent approfondir leur apprentissage chez eux ou sur leur lieu de travail. L'évaluation de cette formation a été extrêmement positive et le stage sera certainement renouvelé l'année prochaine.

Tout comme Exp'AIR, cet ensemble est mis à la disposition des étudiants de licence de chimie de l'Université de Nice Sophia-Antipolis. L'enseignant responsable a organisé une séance de présentation des logiciels lors d'une session de travaux dirigés et les logiciels ont été installés dans une salle «informatique pour tous» accessible aux heures d'ouvertures du campus, dans la salle de ressources du département de chimie et à la bibliothèque universitaire.

2.1. Fonctionnement des modules

On distingue pour chaque thème trois activités principales :

- acquisition des connaissances (phase tutorielle),

- exercices d'application (phase d'entraînement),
- évaluation (phase d'auto-contrôle).

Comme nous ne voulons pas contraindre l'étudiant au niveau de l'utilisation des modules, leur parcours se présente sous deux modes de fonctionnement, le mode «guidé» et le mode «choix» : le premier mode permet de parcourir séquentiellement toutes les activités offertes. Le second («choix») laisse l'étudiant libre d'effectuer l'activité qu'il désire dans la mesure où cette activité est autorisée. En fait le choix d'effectuer telle ou telle séquence n'est pas aléatoire ; on peut décider en s'appuyant sur une grille d'activité qui est affichée (figure 4) et actualisée à l'issue de chaque phase avec quelques conseils à l'aide d'un symbolisme de couleurs. Notons que l'accès à une séquence peut être déconseillé, parfois être interdit. Par contre si la séquence a déjà été parcourue, son accès n'est jamais interdit.

Après chaque séquence,
le retour à cette grille indique
que vous travaillez en mode CHOIX.

Vous parcourez le module librement.

Néanmoins, un symbolisme de couleur
a été adopté pour vous conseiller :

 est une partie acquise,
 est conseillé maintenant,
 est à faire plus tard,

F4:GUIDE F10:FIN

IR : Module ...	Tut.	Exe.	Eva.
Titre du thème 1			
Titre du thème 2			F
Titre du thème 3			
Titre du thème 4			
 ...	 ...	 ...	
Lettre de la séquence retenue : Ligne de requêtes et d'options.			

Vous pouvez passer du mode CHOIX au mode GUIDE à la fin de chaque séquence avec la touche de fonction F4 affichée dans la ligne de requêtes et d'options.

Cette ligne présente toutes les ressources dont vous pouvez disposer. Au niveau de cette grille, la touche F10 permet de quitter le module.

41

Figure 4 : Grille d'activité.

2.1.1. La partie tutorielle

Elle est organisée en graphes que l'étudiant parcourt en suivant des chemins prédéterminés. Chaque chemin correspond à une micro séquence d'enseignement. Le chemin peut être plus ou moins détaillé et dépend des réponses fournies aux questions posées lors de son parcours. D'un point de vue conceptuel, chaque chemin ou séquence d'enseignement se compose d'une ou de plusieurs phases d'enseignement d'un concept, d'un fait ou d'une capacité, et de contrôles portant

sur les sous-acquisitions des connaissances. Ce contrôle se fait par des sollicitations de l'étudiant. Celui-ci n'est jamais contraint de devoir répondre à ces sollicitations, il peut décider de «survoler» le cours en demandant les réponses correctes à chaque question. Des aides, des retours en arrière, des raccourcis et des détours sont souvent prévus pour rompre la linéarité de la séquence d'exposition. En fonction de la réponse, une séquence particulière peut ou non être déclenchée de façon à ce que cette acquisition de connaissances s'adapte au mieux au profil de l'étudiant. Cette phase tutorielle terminée, l'étudiant a accès à un menu lui présentant les principaux concepts exposés. Il peut alors reparcourir chacune des présentations et revoir «à la carte» l'une des parties exposées.

2.1.2. La séquence des exercices

Elle est toujours identique. Par contre, les données sont générées aléatoirement de telle façon que deux étudiants qui se trouvent côte à côte aient le même thème d'exercice mais des données différentes. Ces exercices ont pour objet de consolider les acquisitions de la partie tutorielle et de montrer un nombre élevé d'exemples complémentaires. L'étudiant fait les exercices pour s'entraîner et de ce fait la séquence d'exercices n'est pas contraignante. Des aides et des requêtes sont mises à sa disposition pour lui permettre de ne pas rester «bloqué» sur la recherche d'une réponse.

En ce qui concerne le traitement des réponses, tout est fait pour que les commentaires soient pertinents et circonstanciés de manière à remédier à l'erreur détectée. L'erreur à une question donnée est un moyen de donner de nouvelles explications sur un concept qui a mal été assimilé. A partir de ce principe, l'étudiant se rend vite compte que l'erreur n'est pas sanctionnée mais qu'elle est également pour lui un moyen efficace de consolider ses connaissances et/ou de les parfaire... Cette constatation amène l'étudiant à se sentir libre de s'exprimer sans crainte d'une quelconque notation.

Selon les modules et les thèmes abordés, le nombre des exercices proposés est variable. Un effort particulier a été fait dans les derniers modules traitant des fonctions et celui sur l'interprétation des spectres (plus de cent cinquante spectres sont proposés dans «interprétation des spectres IR»).

Dans certaines séries d'exercices, l'étudiant peut choisir le nombre d'exercices à traiter. Dans d'autres séries, le système «tire» les

exercices tant que l'étudiant n'indique pas son désir d'arrêter la séquence. Un comptage des exercices est effectué avec une indication des performances réalisées, le nombre d'exercices effectués, le nombre d'exercices faits justes et le nombre d'exercices faits faux. Cette indication n'a aucune conséquence sur le déroulement de la session d'exercices. Il s'agit simplement d'un repère offert à l'étudiant pour son entraînement.

2.1.3. L'évaluation

L'évaluation sur un thème donné consiste en quatre exercices tirés aléatoirement dans la collection des exercices précédents...

Un bilan final de l'évaluation est affiché. En cas d'échec, l'étudiant peut recommencer cette évaluation. Il lui sera soumis quatre nouveaux exercices. La réussite à l'auto-évaluation sur un thème permet d'accéder à de nouveaux thèmes. En effet, des indicateurs sont mis en place pour marquer tel ou tel événement (réussite à un test, etc.). Un contrôle systématique sur l'état des indicateurs est effectué et, en fonction de l'analyse de ce tableau de bord pédagogique, certains chemins du module deviennent autorisés. Cette gestion est faite à partir de la grille d'activité.

2.2. Contenu de l'ensemble des modules

Cet ensemble est diffusé en deux parties :

- **Spectrométrie infrarouge :**

- *l'intérêt de l'infrarouge, la place de la spectroscopie infrarouge*
 - la nature complexe de la lumière, le spectre électromagnétique,
 - mécanique quantique et spectroscopie ;
- *les bases théoriques de la spectroscopie infrarouge,*
 - l'oscillateur harmonique,
 - les aspects dynamique et énergétique,
 - les applications aux vibrations moléculaires,
 - la courbe de potentiel de Morse,
 - les mouvements moléculaires : degrés de liberté, translation, rotation, vibration,
 - les modes de vibration en spectroscopie infrarouge ;

- les vibrations d'élongation des liaisons impliquant l'hydrogène,
 - les vibrations de forte énergie, C-H, O-H, N-H,
 - les vibrations d'élongation des liaisons multiples, $-C\equiv C-$, $-C\equiv N$, $>C=O$, $>C=N-$, $>C=C<$,
 - et les vibrations d'élongation des liaisons simples, C-C, C-O, C-N, C-X ;
- les fonctions,
 - hydrocarbures : alcanes, groupes aliphatiques saturés et insaturés, alcènes, aromatiques, alcynes,
 - composés oxygénés : alcools, phénols, éthers, anhydrides, esters, acides, aldéhydes, cétones,
 - et composés azotés : amines, amides, nitriles.

• **Interprétation des spectres infrarouge**

Le module «interprétation des spectres infrarouge» est le plus important. Comme chacun sait, il n'y a pas de méthodologie unique pour interpréter les spectres infrarouge. Tel spectroscopiste procédera d'une façon, tel autre d'une autre... Il faut simplement savoir regarder un spectre pour tirer un maximum d'informations sur les fonctions du composé, tant par la *présence* de certaines bandes que par l'*absence* de bandes dans des régions significatives et dont l'attribution est sans ambiguïté.

2.2.1. Le premier thème du module

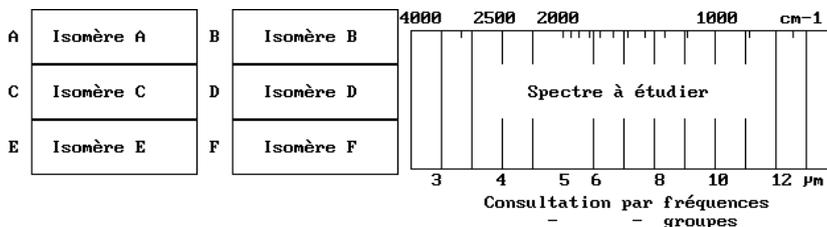
Il est consacré à la reconnaissance des bandes et à leur attribution à des groupes fonctionnels. Il faut habituer l'étudiant à analyser un spectre IR et à regarder dans un premier temps certaines régions du spectre qui sont significatives. C'est l'objectif du premier thème de ce module qui permet :

- de voir les grandes régions du spectre et d'explorer librement la base de données infrarouge... A l'aide de la souris, on peut pointer un endroit du spectre et, après validation, le système affiche toutes les attributions de bandes possibles pour la fréquence pointée ;
- de voir quelques empreintes caractéristiques de début de spectre... il s'agit là d'approfondir la reconnaissance de formes spectrales typiques de certaines fonctions chimiques pour lesquelles une vision du début du spectre est significative : cas des alcools, acides, alcynes, amines... ;

Dans le tutoriel, de nombreux exercices permettent de s'entraîner au calcul du nombre de centres d'insaturation et à l'exploitation du spectre infrarouge. Dans la série d'exercices, l'étudiant dispose d'un lot de quarante-huit spectres à attribuer pour lesquels la formule brute du composé est donnée. A chaque fois que l'on fait ces exercices, la collection des spectres est présentée dans un ordre différent.

2.2.3. Le troisième thème du module

Il illustre le choix entre des isomères (figure 6). Dans la mesure où la formule brute du composé dont le spectre à analyser est connue, on est souvent amené à choisir entre plusieurs isomères. Ce choix peut être facile quand il s'agit de faire un tri parmi des isomères de constitution qui présentent diverses fonctions : alcool ou éther ou cétone ? Il suffit de voir les fonctions concernées sur le spectre IR... mais ce choix peut être plus délicat quand il s'agit d'isomères de configuration. Est-ce un alcène (E) ou un alcène (Z), est-ce un aromatique disubstitué en position ortho, méta ou para ? Pour trouver, il faut raisonner simplement par déductions successives et par éliminations en analysant le plus souvent les bandes de déformations...



Trouvez à quel isomère (A, B, C... ou F) correspond le spectre affiché.

Vous pouvez consulter la base de données
soit par fréquence,
soit par groupe fonctionnel.

Fin de la série ↵

Figure 6 : Interprétation IR - choix entre isomères.

Dix problèmes sont proposés. A chaque fois, un spectre est présenté avec les formules de six isomères : isomères de fonction et/ou isomères de configuration. L'objectif est de trouver à quel isomère correspond le spectre. En cas d'erreur, le système montre le spectre correspondant à

l'isomère choisi ; ce spectre est affiché en dessous du spectre étudié de telle sorte qu'une comparaison visuelle entre les deux spectres permette de voir les différences. Lorsque l'isomère correspondant au spectre a été trouvé, le système demande à l'étudiant s'il désire voir les spectres des autres isomères afin de comparer le spectre étudié aux spectres des autres isomères qui étaient proposés. Pour chaque spectre présenté, un texte d'accompagnement détaille les critères qui ont permis de faire l'attribution du spectre à l'isomère correspondant. Cette phase permet ainsi à l'étudiant de mieux comprendre la logique du raisonnement qui a été appliquée.

On peut ensuite passer à l'attribution d'un nouveau spectre pour un jeu de six nouveaux isomères et ainsi de suite... Au total, l'étudiant peut donc faire les soixante exercices sélectionnés mais il peut également s'arrêter quand il le désire.

Enfin, pour clore ce module sur l'interprétation des spectres, l'étudiant est sensibilisé sur les limites de la technique qui n'a pas, a priori, l'objectif d'aboutir à une élucidation structurale complète de la formule d'un composé chimique. L'infrarouge permet essentiellement de reconnaître les principales fonctions chimiques présentes. Ainsi, cette dernière partie permet d'élargir la perspective et permet d'introduire les autres types de méthodes spectroscopiques usuellement employées (RMN du ^1H et/ou du ^{13}C , Spectrométrie de Masse, ...) tout en insistant sur la nécessité de tirer partie au mieux de chacune d'elles.

3. ASPECTS TECHNIQUES ET DISPONIBILITÉ

Tous les programmes Exp'AIR, spectrométrie IR, interprétation des spectres IR sont des programmes uniquement disponibles pour compatibles PC en version DOS. Ils sont néanmoins utilisables (en mode DOS) sous Windows, que ce soit Windows 3.x ou Windows 95. Ils sont également utilisables avec des anciens appareils équipés de processeurs 286. L'installation se fait uniquement sur disque dur. L'occupation du disque dépend du programme et est au maximum de deux Mégaoctets.

Les programmes ne disposent pas de fonction pré-programmée permettant l'impression d'images d'écran. Néanmoins, il est possible de capter l'image d'écran à l'aide d'utilitaires tels que Pizazz Plus, PaintshopPro ou autres, pour procéder ensuite à l'impression de la page écran au format désiré. Les images d'écran qui illustrent ces articles ont été ainsi captées à l'aide de Pizazz Plus.

Exp'AIR est exclusivement distribué par le centre documentaire informatique enseignement chimie (CDIEC²). Le programme (version DOS) est livré sur disquette dans un classeur contenant un manuel d'utilisation. Exp'AIR est diffusé en version «établissement». Cette version (dédiée à l'usage exclusif de l'établissement acquéreur) permet l'installation du logiciel sur un nombre illimité d'appareils de l'établissement. A cette version est jointe une version «étudiant» et nous autorisons et encourageons la copie de cette version pour une distribution gratuite auprès des étudiants de l'établissement.

Dans le cas des versions «établissement», les programmes peuvent être utilisés en réseau.

Une version de démonstration du programme Exp'AIR est disponible. Vous pouvez la télécharger gratuitement sur le réseau Internet à partir du serveur CDIEC à l'adresse <http://www.unice.fr/cdiiec/> ou obtenir cette disquette de démonstration en envoyant un carnet de timbres au tarif lettre en vigueur ainsi que vos coordonnées au CDIEC.

Les deux ensembles «spectrométrie infrarouge et interprétation des spectres infrarouge» **ne sont pas distribués par le CDIEC**. Ils sont exclusivement distribués par les Éditions Jériko³. Chaque ensemble est livré sur disquette trois pouces avec un mode d'emploi. Pour chacun des deux ensembles, il est possible d'acquérir soit une version monoposte, soit une version douze postes. Il n'existe pas de version de démonstration pour ces deux ensembles.

4. CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Les projets que nous avons développés démontrent la faisabilité de notre approche d'apprentissage des techniques spectroscopiques infrarouge et de résonance magnétique nucléaire du proton à l'aide de produits d'enseignement assistés par ordinateur.

-
2. Centre Documentaire Informatique Enseignement Chimie (CDIEC) - Université de Nice Sophia-Antipolis - F 06108 Nice Cedex 2 - Tél. : 04 92 07 61 23 - Fax : 04 92 07 61 25 - email:rabine@unice.fr - <http://www.unice.fr/cdiiec/>
 3. Éditions Jériko - 13, rue Vernier - 75017 PARIS - Tél. : 01 53 81 88 20 - Fax : 01 53 81 88 21.

Selon l'activité développée, acquisition de connaissances, exercices, résolutions de problème, diverses approches ont été envisagées. Elles montrent toutes qu'il est possible de créer maintenant des environnements non-directifs qui laissent l'étudiant libre d'aborder sa formation de la manière qu'il souhaite, tout en le guidant si nécessaire dans son apprentissage.

Dans la mesure où les nouveaux programmes des classes préparatoires imposent l'enseignement de ces méthodes spectroscopiques dans certaines filières et que le volume horaire accordé pour cet enseignement est restreint, il est donc indispensable de mettre des outils d'autoformation à la disposition des étudiants pour qu'ils puissent acquérir ces techniques en faisant de nombreux exercices de façon conviviale.

Sans résoudre totalement le problème de l'acquisition de l'expertise qui nécessite un long apprentissage, les outils que nous avons développés, s'ils sont utilisés à propos par les enseignants, peuvent aider les élèves dans leur apprentissage et être un début de réponse à leur demande de formation.

Note

Les personnes intéressées par l'utilisation de l'informatique dans l'enseignement de la chimie peuvent se procurer le catalogue inventaire des Applications Pédagogiques de l'Ordinateur (APO96) dans l'enseignement de la chimie et de la biochimie, disponible au CDIEC.

Cette édition 1996 regroupe la description de deux cent quatre applications. Ce catalogue est diffusé uniquement sur disquette sous forme d'une base de données et d'un nouveau programme de consultation utilisable sur PC compatibles dans l'environnement Windows. Il n'y a pas d'édition papier du catalogue dans la mesure où le programme de consultation permet la sortie du catalogue sur imprimante. Il est possible de se procurer cette disquette au CDIEC contre un carnet de timbres (tarif lettre en vigueur). Son envoi est gratuit pour l'étranger. La copie/duplication de cette disquette est fortement encouragée pour favoriser la circulation de l'information.

Vous pouvez également obtenir directement ce catalogue par téléchargement (gratuit) du fichier compressé APO96.ZIP sur Internet à partir de notre serveur à l'adresse <http://www.unice.fr/cdiec/>

La consultation est aussi possible sur le serveur. Un programme de recherche par mot conduit à toutes les descriptions des applications contenant le mot pour lequel la recherche a été demandée. Ce mot peut être un titre, un nom, un mot clef, un nom d'éditeur, etc.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **Exp'AIR Version 3.**
Programme distribué par le Centre Documentaire Informatique Enseignement Chimie (C.D.I.E.C.), Université de Nice Sophia-Antipolis - F 06108 NICE Cedex 2 - ISBN n° 2-908156-03-2.
- [2] **Irexpert, an Infrared interpretation assistant** par D. CABROL-BASS, J.-P. RABINE, D. RICARD, M. ROUILLARD et T.-P. FORREST, *J. Chem. Ed.*, 1993, 70, 2, 120-125.
- [3] **Exp'AIR : un logiciel pour l'apprentissage de l'interprétation des données de spectroscopie infrarouge** par D. CABROL, J.-P. RABINE, D. RICARD, M. ROUILLARD et T.-P. FORREST. «Systèmes Experts et EAO». M. Quéré (Ed.), Orphys, Paris, 1991, ISBN n° 2-7080-0648-7.
- [4] **IR-MENTOR** (1992).
Sadtler Research Laboratories Ltd. 3316 Spring Garden Street, Philadelphia, Pennsylvania 19104 - USA.
- [5] **IRG1**
(Révision de cours et liaison avec une étude pratique d'un spectre IR d'une molécule diatomique) par J. MARTELLI et M. UTJES, Université de Rennes, «Catalogue des Applications Pédagogiques de l'Ordinateur en Chimie», édition 1992. Distribué par le CDIEC, Université de Nice Sophia-Antipolis.
- [6] **Formation assistée par ordinateur à la spectrométrie IRFT. Volume I : Instrumentation** par M. DALIBART, Université de Bordeaux I (Talence), Séminaire FTIR - UNICAM, Paris, février 1993.
- [7] **Infrared Spectroscopy in Chemical Analysis. An interactive Software Package.** D. Kealey. John Wiley Software. 1985, Chichester. ISBN 471 9159X, ISBN 0 471 91260 3, ISBN 0 471 91582 3.
- [8] **Auto-formation à l'analyse organique par spectrométrie d'absorption infrarouge** par D. CABROL-BASS, J.-P. RABINE, D. RICARD et M. ROUILLARD, C. GENTY, B. ARNAUD et A. PRIGENT. *Actualité Chimique*, juin-juillet 1996, vol. 4, pp. 43-50.