

Autoformation à l'analyse organique par spectrométrie d'absorption infrarouge

Daniel Cabrol-Bass* professeur (Unsa), Jean-Pierre Rabine* ingénieur, Didier Ricard** docteur (Unsa), account representative MDL, Michel Rouillard* professeur (Unsa), Claude Genty*** professeur (Cnam), Brigitte Arnaud*** responsable service enseignement (Cnam), Annick Prigent*** ingénieur

Self training in organic analysis with infrared spectrometry

This paper presents a set of computer modules developed to support self learning in organic analysis with infrared spectroscopy. It is composed of five different parts in which learners may study the role and the basic theory of infrared spectroscopy, the harmonic oscillator, the stretching vibrations, the functions and spectra interpretation. This set has been used in the courses of physico-chemical methods of analysis given at Conservatoire National des Arts et Métiers (open university for promotion of workers open to all learners during non-working hours). Results of this experiment and evaluation of the perception of this learning method are reported.

Spectrométrie infrarouge, enseignement assisté par ordinateur, didacticiel, exercices, auto ornement, évaluation
Infrared spectrometry, computer assisted learning, tutorial, exercices, self training

L'analyse d'un spectre constitue un processus complexe qui comporte des étapes d'analyse, d'hypothèses, de déductions, de vérifications et de synthèses. Il n'y a pas de méthode unique et systématique d'analyse des spectres, et ce quelle que soit la spectroscopie considérée.

Afin de favoriser l'acquisition de « l'expertise », il faut que l'étudiant puisse procéder par lui-même à de nombreuses analyses. Mais celles-ci ne peuvent être

conduites avec profit que si certaines bases théoriques sont comprises et si un grand nombre de connaissances, notamment des connaissances factuelles, sont acquises. Les enseignements correspondants sont généralement dispensés sous forme classique (cours suivis de travaux dirigés) qui s'adaptent difficilement aux besoins de la formation continue et, d'une manière plus générale, aux besoins de publics d'étudiants hétérogènes. Dans le but de favoriser une formation plus individualisée nous avons développé, en collaboration avec le Conservatoire National des Arts et Métiers (Cnam) un ensemble de modules d'autoformation à l'analyse organique par spectrométrie infrarouge. Ces modules ont été intégrés dans les enseignements de l'unité de valeur intitulée « Méthodes physico-chimiques d'analyse » du Cnam. L'expérimentation a été conduite durant le premier semestre de l'année universitaire 1992/1993. Nous donnerons une évaluation des logiciels à partir des résultats d'une enquête effectuée auprès des élèves et tenterons d'apprécier la pertinence de l'utilisation de tels outils d'après les résultats obtenus à l'examen partiel par ces mêmes élèves.

Le problème de l'apprentissage d'une méthode spectroscopique

Tous ceux qui enseignent l'identification de composés chimiques à partir des données spectrales savent que : la présentation des principes physiques sur lesquels reposent ces méthodes, la connaissance des caractéristiques spectrales des différents groupes fonctionnels par l'utilisation de tables, et l'application d'une procédure générale d'examen d'un spectre ne sont pas suffisants pour être capable d'interpréter le spectre d'un composé inconnu. Certes, tous ces éléments sont nécessaires, mais une véritable maîtrise dans ce domaine ne peut s'acquérir sans une pratique prolongée basée sur l'interprétation de nombreux spectres. L'idéal serait de pouvoir interpréter un grand nombre de spectres représentatifs en bénéficiant des conseils d'un spécialiste. En formation initiale, ceci n'est généralement pas possible, à cause de normes d'encadrement trop rigides et de programmes surchargés. En formation continue, cela paraît tout aussi difficile du fait du manque de disponibilité des spécia-

* Laboratoire de recherches sur la représentation et le traitement de l'information chimique, Université de Nice Sophia-Antipolis (Unsa), 06108 Nice Cedex 2. Tél. : 92.07.61.23. Fax : 92.07.61.25. E.mail : cabrol@unice.fr

** MDL (Molecular Design Ltd), 5, bd du Maréchal Joffre, 92340 Bourg-La-Reine. Tél. : (1) 46.65.05.05.

*** Laboratoire des méthodes physico-chimiques d'analyse, Conservatoire National des Arts & Métiers (CNAM), 292, rue Saint-Martin, 75141 Paris Cedex 03. Tél. : (1) 40.27.21.54. Fax : (1) 40.27.28.44. E.mail : genty@cnam.fr

listes. Il faut donc chercher à favoriser le travail individuel de l'étudiant en mettant à sa disposition des moyens d'autoformation qui lui permettent de se prendre en charge et développent son autonomie.

C'est pour offrir un tel environnement d'apprentissage que nous avons développé le logiciel Exp'Air [1]. Ce programme, véritable partenaire de résolution de problème [2, 3], offre un certain nombre de ressources facilitant le travail d'interprétation des spectres infrarouge tout en laissant l'utilisateur responsable de ses choix d'attributions. Mais Exp'Air n'offre pas de cours théorique structuré ni de séquences destinées à vérifier les connaissances de l'utilisateur. Il est conçu pour favoriser la pratique de l'interprétation des données infrarouge [4] et les nombreuses données factuelles, éléments méthodologiques qu'il contient, ne sont présentées qu'à la demande de l'étudiant ou à l'occasion de l'interprétation d'un spectre particulier, plutôt sous forme de rappels que d'un exposé systématique. Pour l'utiliser avec profit, il faut que l'étudiant ait préalablement appréhendé les principes physiques élémentaires sur lesquels repose la spectrométrie infrarouge, mémorisé les relations existantes entre les modes de vibration des principaux groupes fonctionnels et leurs bandes caractéristiques, et que quelques exemples d'interprétation de spectres lui aient déjà été donnés. Un programme d'aide à l'interprétation des spectres infrarouge, similaire à Exp'Air, a été mis récemment sur le marché par la société Bio-Rad Sadtler [5] ; il est plutôt destiné à un public de spécialistes qu'à des étudiants et présente les mêmes limites quant aux prérequis nécessaires à son utilisation, limites accentuées du fait qu'à l'opposé d'Exp'Air, il n'incorpore pas de système expert capable de guider l'utilisateur dans sa tâche d'interprétation. Ce produit n'est donc pas utilisable en situation d'autoformation.

S'il existe quelques produits d'enseignement assisté par ordinateur en langue française abordant certains aspects de l'infrarouge [6, 7], aucun ne permet une formation générale et complète. Le module infrarouge de la série Acol [8], en langue anglaise, est de conception assez ancienne et suit une structure linéaire relativement rigide. De notre point de vue, il ne comporte pas assez d'exemples et d'exercices permet-

tant à l'étudiant de renforcer ses acquisitions et de s'évaluer.

Contraintes liées au public et objectifs didactiques

Le public visé concerne aussi bien des techniciens analystes ou des chimistes de laboratoire en formation professionnelle continue que des étudiants du niveau baccalauréat ou d'un niveau supérieur. Il faut donc tenir compte :

- d'une part, de l'existence de grandes différences dans le niveau de connaissances des étudiants potentiels,
- et, d'autre part, des impératifs psychopédagogiques liés à la formation professionnelle des adultes.

Il faudra donc illustrer le cours d'un maximum d'exemples et d'applications et éviter de reproduire des situations par trop scolaires, en particulier il faudra veiller à ce que les erreurs commises par les étudiants ne soient pas perçues comme pénalisantes.

Nous nous sommes déjà heurtés à ce type de contraintes lors de la réalisation d'un ensemble d'autoformation à la résonance magnétique nucléaire du proton [9]. Nous avons choisi alors une méthode d'exposition pragmatique et une approche systématique simple qui ne nécessitent pas de connaissances importantes en chimie moléculaire. Une telle approche est également retenue ici pour la spectrométrie infrarouge. Mettant à profit les ressources offertes par le système auteur utilisé [10], nous avons cherché à mettre le logiciel sous le contrôle de l'étudiant, ce qui permet de répondre au problème posé par l'hétérogénéité du public.

L'utilisation de cet ensemble doit permettre à l'utilisateur d'atteindre les deux objectifs suivants :

- être capable d'établir la présence ou l'absence des 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.

On n'étudiera donc que des spectres de composés purs, réalisés en film. L'utilisation des tables de corrélations classiques par fréquences ou par groupes fonctionnels est autorisée.

Architecture générale du logiciel

L'ensemble se compose de cinq modules indépendants traitant de :

1. l'intérêt et la place de l'infrarouge parmi les autres spectrométries,
2. les bases théoriques de la spectrométrie infrarouge, l'oscillateur harmonique,
3. les vibrations d'élongation,
4. les fonctions,
5. l'interprétation des spectres.

L'utilisation des modules se fait généralement en suivant cet ordre recommandé, mais il est toujours possible de sauter des modules, d'utiliser et même de réutiliser des modules, sans respecter cet ordre. Dans chaque module la session d'enseignement se déroule suivant un scénario semblable visant à atteindre un ou des sous-objectifs clairement identifiés dans chacun des thèmes développés. On distingue pour chaque thème trois activités principales : acquisition des connaissances (phase tutorielle), exercices d'application (phase d'entraînement), évaluation (phase d'auto-contrôle).

Acquisition de connaissances

Les parties tutorielles de chaque module sont constituées de microséquences d'enseignement d'un concept, d'un fait, d'une capacité. Le choix du parcours de l'utilisateur dépend (ou peut dépendre) de son travail antérieur. Chaque séquence d'enseignement se compose également de contrôles portant sur des acquisitions des connaissances qui se font par des sollicitations de l'utilisateur. Chaque question se veut claire, précise, sans ambiguïté et appelle une réponse également claire et précise de l'utilisateur. L'étudiant 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 raccourcis et des détours sont souvent prévus pour rompre la linéarité de la séquence d'exposition. Cette phase tutorielle terminée, l'étudiant a accès à un menu lui présentant les principaux concepts exposés. Il peut alors décider de parcourir à nouveau l'une ou l'autre des présentations et revoir ainsi « à la carte » l'une des parties exposées.

Les exercices d'application

La séquence des exercices proposés est toujours identique. Par contre, les données sont sélectionnées ou générées aléatoirement de façon telle que deux utilisateurs qui se trouvent côte à côte aient le même type d'exercice mais portant sur 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'utilisateur résout 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. La ligne de consignes rappelle à tout moment les possibilités offertes.

En ce qui concerne le traitement des réponses, tout est fait pour que les commentaires soient pertinents et circonstanciés de manière à remédier aux erreurs éventuellement détectées. L'erreur à une question donnée est un moyen de fournir de nouvelles explications sur un concept mal 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 soucis d'une quelconque notation.

Selon les modules et les thèmes abordés, le nombre d'exercices proposés est variable. Un effort particulier a été fait dans les derniers modules traitant des fonctions et de l'interprétation des spectres (plus de 150 spectres sont proposés dans le module traitant de l'interprétation). Dans certaines séries d'exercices, l'étudiant peut choisir le nombre d'exercices à traiter. Dans d'autres séries, le système propose des exercices tant que l'étudiant n'indique pas son désir d'arrêter la séquence. Les exercices effectués sont comptabilisés avec une indication des performances réalisées : nombre d'exercices résolus correctement et nombre d'erreurs commises. 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.

L'évaluation

L'évaluation sur un thème donné consiste en quatre exercices tirés aléatoirement parmi les exercices de la collection qui n'ont pas encore été traités par l'étudiant au cours de la phase précédente. Il est à noter que si certains cas litigieux sont abordés lors des exercices (en effet, un spectre infrarouge n'est pas toujours facile à interpréter et certaines ambiguïtés peuvent subsister lors de l'interprétation... et ces facteurs ne doivent pas être dissimulés à l'étudiant !), ces cas ont été écartés pour la phase d'évaluation.

Le bilan global 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'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.

La grille d'activité (tableau de bord pédagogique)

Comme nous ne voulons pas contraindre l'étudiant au niveau de l'utilisation du module, le parcours se présente sous deux modes distincts, le mode

« Guidé » et le mode « Choix » :

- le premier (mode « Guidé ») permet de parcourir séquentiellement toutes les activités offertes,
- le second (mode « Choix ») laisse l'étudiant libre d'effectuer l'activité qu'il désire dans la mesure où celle-ci est autorisée.

En fait, le choix de l'utilisateur d'effectuer telle ou telle séquence n'est pas aléatoire, il peut s'appuyer sur une grille d'activité (figure 1) qui est affichée et actualisée à l'issue de chaque phase avec quelques conseils.

Dans cette grille de gestion des activités, on présente les titres des thèmes abordés dans le module et des cases correspondant aux trois types d'activités qui les accompagnent : la partie tutorielle, la partie exercices et la partie évaluation. Le fonctionnement de ce tableau est simple. A partir du moment où l'utilisateur a effectué une séquence, le module le reconduit directement à ce tableau qui est actualisé. Un symbolisme de couleurs et de trame permet alors de visualiser ce qu'il est recommandé de faire à un moment donné. 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.

La modularité du cours réalisé permet une utilisation autonome de chaque module pendant une durée variable de 2 à 6 heures selon le module. Comme il est matériellement impossible de tout

Figure 1 - Grille d'activités.

Infra Rouge : Module 2 THEME 1 : Tutoriel	Tutoriel	Exercices	Evaluation
L'oscillateur harmonique .			
Application aux vibrations moléculaires.			
Les mouvements moléculaires : degrés de liberté.			
Les modes de vibration en spectroscopie Infra Rouge.			

acquis
 conseillé
 à faire ensuite
 déconseillé maintenant

Entrez la lettre correspondant à la séquence que vous désirez parcourir. Votre choix : -

F1: SOS F2: THEMES F18: FIN

parcourir en une seule session de travail, un système permet la reprise du travail dans le module au point précis où il a été abandonné.

Contenu des modules

On est parti de l'hypothèse que le programme de physique chimie des classes terminales constituait le prérequis de base à cette étude. Il a donc été nécessaire de faire des digressions pour expliquer certaines notions (celles sur l'hybridation par exemple). Par contre, on a demandé à l'étudiant d'admettre certains résultats (ceux de la chimie quantique par exemple) qui auraient été trop longs à développer. Nous n'aborderons pas en détail le contenu de chacun des modules et nous nous limiterons à une présentation des thèmes principaux.

Module 1 : Intérêts et fondements de la spectrométrie infrarouge

Ce module sert d'introduction à l'ensemble ; il développe trois thèmes :

- place et intérêts de l'infrarouge parmi les autres spectrométries,
 - nature complexe de la lumière, le spectre électromagnétique,
 - mécanique quantique et spectrométrie.
- Ce dernier thème permet de situer le niveau théorique auquel on se place et contribue à « rassurer » les utilisateurs n'ayant pas un bagage mathématique élevé.

Module 2 : Bases théoriques de l'infrarouge

Le spectre infrarouge d'une molécule résulte de transitions entre ses différents états vibrationnels. Parmi ces vibrations, les oscillations associant les mouvements relatifs de deux atomes séparés par une liaison sont parmi les plus significatives. Le module comporte quatre thèmes :

- le modèle physique de 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 spectrométrie infrarouge.

L'ensemble de ce module est riche en animations diverses pour montrer à l'étu-

diant ces différents modes de mouvements, de vibrations, d'énergie.

Module 3 : Les vibrations d'élongation

Ce module traite uniquement des vibrations d'élongation. Il permet également d'analyser les différents effets d'environnement observables en spectrométrie infrarouge. Trois thèmes sont développés :

- Liaisons impliquant l'hydrogène : c'est-à-dire les vibrations de forte énergie, C-H, O-H et N-H. L'attention de l'étudiant est attirée sur les formes typiques des spectres de certaines catégories de fonctions chimiques pour lesquelles la partie haute du spectre constitue une empreinte caractéristique et sans ambiguïté de la fonction. Cette analyse de la partie du spectre, comprise entre 3 800 et 3 000 cm^{-1} , s'apparente beaucoup plus à un apprentissage de « reconnaissance de formes » qu'à une étude systématique des fréquences de vibration.

- Les vibrations d'élongation des liaisons multiples, principalement $\text{-C}\equiv\text{C-}$, $\text{-C}\equiv\text{N-}$, >C=O , >C=N- et >C=C< . Dans cette partie, il est montré que la présence ou l'absence de bandes dans certaines régions bien précises du spectre peut correspondre à la présence ou à l'absence d'un type de liaison, mais que l'absence de bande peut aussi résulter d'une substitution particulière. On essaye ainsi d'instaurer un réflexe de vigilance dans le raisonnement de l'étudiant. On y développe également les différents effets de l'environnement sur la fréquence observée d'une liaison, le glissement de la fréquence par conjugaison, etc.

- Les vibrations d'élongation des liaisons simples, C-C, C-O, C-N, C-X. Bien que certaines de ces bandes soient peu exploitables, l'étudiant aura compris le parti que l'on peut tirer de leur analyse pour déterminer par exemple la classe d'un alcool en fonction de la position de la bande C-O lors de l'analyse de différents spectres d'alcools.

Un résumé sur les vibrations d'élongation est accessible à la fin de l'étude de ces trois thèmes.

Module 4 : Les fonctions

Ce module traite de toutes les vibrations moléculaires observées pour les principales fonctions rencontrées en

chimie organique. Les fonctions retenues dans cette étude sont classées en trois groupes :

- les hydrocarbures saturés (alcane, groupes aliphatiques) et insaturés (alcènes, aromatiques, alcynes),
- les composés oxygénés (alcools, phénols, éthers, anhydrides, esters, acides, aldéhydes, cétones),
- les composés azotés (amines, amides, nitriles).

Étant donné l'importance du premier thème, son étude conditionne l'accès aux autres.

Pour chaque thème, 36 exercices sont prévus. Chaque exercice consiste soit à trouver la fonction chimique correspondant au spectre affiché d'un composé monofonctionnel, soit à attribuer un spectre à l'une des six formules développées qui sont présentées. Toutes les ressources nécessaires pour effectuer ce choix sont présentes à l'écran. Les différentes plages de fréquences des bandes potentiellement observables pour les composés proposés sont affichées en bas du spectre et un texte descriptif est également présenté. En cas d'erreur d'attribution, une correction est donnée.

Module 5 : Interprétation des spectres

Ce module est le plus important en volume, il s'appuie sur les connaissances théoriques et factuelles acquises par l'étude des autres modules pour développer une méthode d'interprétation des spectres. Or il n'y a pas de méthode systématique unique pour interpréter les spectres infrarouge, ce qui explique la grande difficulté de mettre au point des programmes d'interprétation automatique. Ceci ne signifie pas pour autant que l'on doive procéder sans méthode. Il faut apprendre à regarder un spectre pour en tirer un maximum d'informations sur les fonctions du composé tant par la présence de certaines bandes que par l'absence de bande dans des régions significatives et dont l'attribution est sans ambiguïté. Dans la pratique, deux situations peuvent se présenter selon que l'on dispose ou non d'informations sur la composition chimique (formule brute) de la substance étudiée.

1. Le premier cas est le plus favorable puisqu'il permet de restreindre les hypothèses à examiner pour parvenir (parfois) à la détermination de la formule développée du composé.

2. Le second est plus délicat car si l'infrarouge permet d'obtenir une empreinte des fonctions chimiques du composé, il est parfois difficile de trancher entre telle ou telle fonction. La difficulté est encore plus grande dans le cas de composés polyfonctionnels.

Ces deux cas sont traités, mais le premier thème du module est consacré à la reconnaissance des bandes et à leur attribution à des groupes fonctionnels. 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, l'étudiant 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...

- De caractériser une fonction par un certain nombre de bandes... Chaque fonction peut être caractérisée par la présence d'un nombre minimum de bandes ; il s'agit de savoir où elles se trouvent (figure 2).

- D'apprendre comment trouver une fonction par éliminations successives (figure 3). Si on n'observe pas de bande à tel endroit cela indique qu'il ne peut s'agir de telle fonction. Par ailleurs, quand on ne « voit » pas tout de suite une attribution de fonction, il est nécessaire de travailler par éliminations successives pour aboutir le plus souvent à l'attribution cherchée.

Dans la série d'exercices, un lot de 48 spectres à attribuer est mis à la disposition de l'étudiant.

L'**objectif du deuxième thème** est de rendre l'étudiant capable d'exploiter des données relatives à la formule brute du composé parallèlement au spectre infrarouge... Deux cas se présentent : soit on connaît la formule brute, soit on dispose d'informations partielles. Si l'étudiant dispose d'informations partielles relatives à la présence ou à l'absence d'un élément dans la molécule, il doit exploiter ces données avant toute tentative d'interprétation. S'il dispose de la formule brute, on lui montre comment utiliser cette donnée.

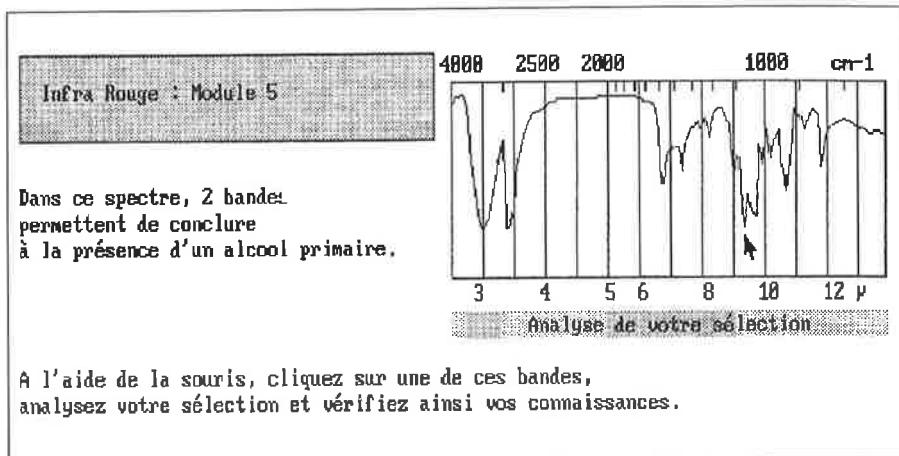


Figure 2 - Où se situent les bandes attribuables à un alcool ?

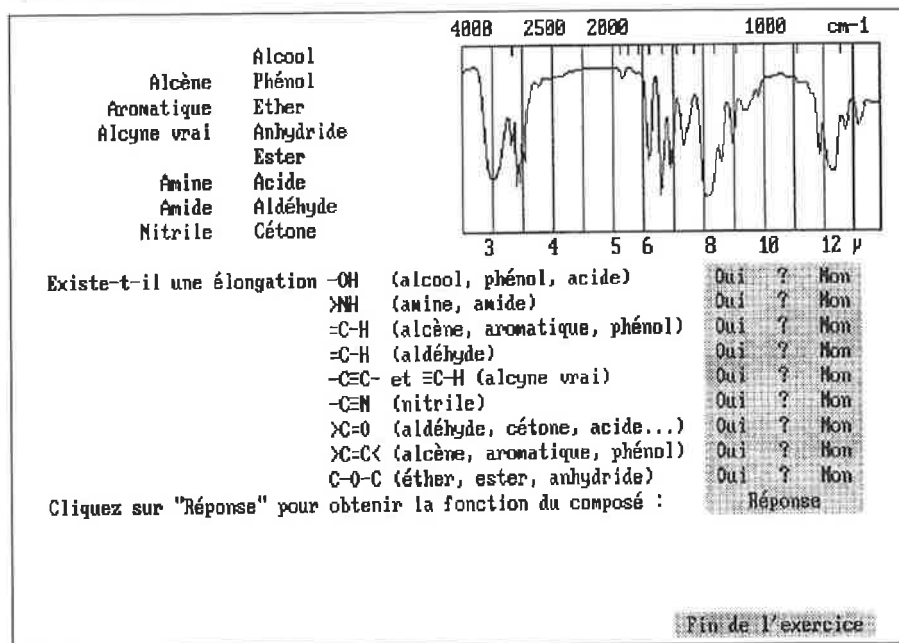


Figure 3 - Faites des déductions successives... Posez-vous ces questions !

Non seulement la formule brute indique la présence de tel et tel élément dans le composé, et on peut faire le même type de déduction que précédemment mais, en plus, un calcul effectué à partir des données de la formule permet de déterminer le nombre de centres (ou degrés) d'insaturation et donc de savoir s'il s'agit d'un composé insaturé ou non.

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 48 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.

Le **troisième thème du module** illustre le choix entre des isomères. Dans

la mesure où la formule brute du composé dont le spectre est 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, par exemple distinguer entre alcool, éther ou cétone. Il suffit de voir les fonctions concernées sur le spectre infrarouge. Mais ce choix peut être plus délicat quand il s'agit d'isomères de configuration, par exemple distinguer entre un alcène (E) et (Z), ou bien reconnaître les positions des substituants sur un noyau aromatique (*ortho*, *méta* ou *para*). Il faut raisonner par déductions successives et par éliminations en analysant le plus souvent les bandes de déformations. Une série de dix problèmes sont proposés. Chaque fois, on présente un spectre et les formules de 6 isomères, isomères de constitution 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. Il n'est d'ailleurs pas toujours possible de trancher entre plusieurs hypothèses. Quand l'isomère correspondant au spectre a été trouvé, le système demande si on désire voir les spectres des autres isomères afin de comparer le spectre étudié et les spectres des autres isomères proposés. Pour chaque spectre présenté, un texte détaille les critères qui ont permis de faire l'attribution du spectre. Cette phase permet à l'étudiant de mieux comprendre la logique du raisonnement déductif qui a été appliqué.

Enfin, pour terminer le module, on met en garde l'étudiant sur les limites de la technique qui ne permet généralement pas l'élucidation structurale complète de la formule d'un composé. Cette dernière partie attire l'attention de l'étudiant sur la nécessité de tirer partie de chaque spectrométrie, IR, résonance magnétique nucléaire, masse...

Expérimentation et évaluation

La spectrométrie d'absorption infrarouge est une des techniques enseignées aux élèves de cycle B (bac + 2) dans l'unité de valeur intitulée « Méthodes physico-chimiques d'analyse » au Conservatoire National des Arts et Métiers (Cnam). Cette formation se décompose en 8 heures de cours en amphithéâtre et en 5 heures d'exercices dirigés (ED) ; elle est assurée une année sur deux. Avant leur adoption définitive, les modules ont été expérimentés durant le premier semestre de l'année universitaire 1992/1993. Pour les cours magistraux en amphithéâtre, l'enseignant a illustré ses cours par des extraits des parties tutorielles de ces didacticiels (principalement formules, graphiques, animations, spectres) projetés sur grand écran. Durant toutes les séances d'exercices dirigés, les élèves ont travaillé sur les didacticiels de spectrométrie infrarouge.

Nous donnerons une évaluation des

logiciels à partir des résultats d'une enquête effectuée auprès des élèves et tenterons d'apprécier la pertinence de l'utilisation de tels outils d'après les résultats obtenus à l'examen partiel par ces mêmes élèves.

Conditions de l'expérimentation

Le nombre d'inscrits à l'unité de valeur de cycle B MPCA se chiffrait cette année-là à 180. Pour les séances d'exercices dirigés, les élèves ont été répartis en 4 groupes. Les cinq séances, d'une heure chacune, ont été effectuées dans deux salles contiguës « Informatique Pour Tous » (IPT) équipées d'un parc total de 40 micro-ordinateurs. Les élèves ont travaillé seuls ou en binômes en présence d'un ou deux tuteurs. Nous estimons à environ 120 le nombre d'élèves ayant participé régulièrement à ces séances. La totalité des heures d'exercices dirigés ont été consacrées au travail sur les didacticiels. Le temps imparti aux exercices dirigés étant très limité, l'enseignant a demandé aux élèves de faire les parties exercices et évaluation correspondant aux chapitres suivants :

- l'oscillateur harmonique (module 2) pendant une heure,
- les vibrations d'élongation (module 3) pendant une heure,
- l'interprétation des spectres (module 5) pendant trois heures.

Le nombre d'exercices à exécuter était souvent limité au minimum (6 au lieu de 36 par exemple) car le temps imparti était trop juste. Les élèves, travaillant à leur propre rythme, pouvaient, pour les plus rapides, choisir de faire une nouvelle série d'exercices.

Jusqu'à l'examen, les didacticiels sont restés en libre service à la disposition des élèves dans les salles IPT ouvertes de 9 heures à 21 heures tous les jours à l'exception du dimanche. Ils n'ont été utilisés que par une dizaine d'entre eux de façon assidue, alors que les autres n'ont pu y travailler faute de temps (la grande majorité de nos élèves travaillent et n'ont pas leur domicile à proximité des locaux du Cnam).

Consécutivement à cet enseignement, la validation des acquis s'est effectuée en mars 1993 par un examen partiel portant sur l'ensemble des techniques étudiées pendant le premier semestre. L'épreuve

sur la spectrométrie infrarouge était notée sur 5 points, dont 2 pour une question de cours et 3 pour l'interprétation du spectre d'absorption infrarouge du composé $C_{11}H_{20}O$ pour lequel il fallait trouver les fonctions caractéristiques et la formule développée.

Résultats de l'enquête

À l'issue des séances, nous avons demandé aux élèves de remplir un questionnaire que nous avons préparé sur le didacticiel infrarouge lui-même et de façon plus générale sur l'enseignement assisté par ordinateur. Quatre-vingt quinze ont bien voulu remplir le questionnaire proposé de façon anonyme.

Bien que les étudiants n'aient pas travaillé sur l'ensemble du didacticiel, qui représente plus de 60 heures d'apprentissage, la perception qu'ils ont de ce produit est tout à fait favorable puisque 95 % d'entre eux en retirent une impression positive (3 % négatif, 2 % sans opinion). De plus, 94 % des élèves ayant répondu au questionnaire jugent l'apprentissage progressif (1 % pas progressif, 5 % sans opinion) et 87 % le jugent efficace (3 % inefficace, 9 % sans opinion, 1 % oui et non).

Le didacticiel étant destiné à l'autoformation, nous avons demandé aux élèves si la présence d'un enseignant leur paraissait souhaitable lors des séances d'exercices dirigés. Un tiers de la population estime pouvoir se passer d'un enseignant et cela nous paraît satisfaisant pour l'enseignement assisté par ordinateur mis à disposition. Néanmoins, plus de la moitié (56 %) en attendent une assistance pédagogique ou (52 %) une assistance technique (mise en route de l'ordinateur, bon déroulement du logiciel...).

Ces résultats s'expliquent par la crainte, dans un enseignement traditionnel, de voir disparaître le tuteur à qui l'on peut poser toutes les questions et d'être obligé d'agir...

Cependant, les enseignants qui ont encadré ces exercices dirigés n'ont pas ressenti les besoins exprimés par les élèves d'une assistance pédagogique ni technique. En effet, les questions posées aux enseignants pour une aide ou un complément d'explication sont restées extrêmement rares, les étudiants étaient même agréablement

surpris par la convivialité du logiciel et les commentaires pertinents qu'il leur fournissait. Le seul exercice sur lequel certains ont passé beaucoup de temps se situe dans l'évaluation du chapitre « oscillateur harmonique » et exige un calcul de masse réduite pour obtenir un oscillateur dont la fréquence est un facteur entier d'un oscillateur témoin.

Quant à l'assistance technique, les enseignants n'ont pas eu à intervenir en ce qui concerne le bon déroulement du logiciel. Les seules et rares interventions se sont faites auprès d'élèves qui, n'ayant pas lu les consignes, naviguaient dans certaines parties du logiciel qui n'étaient pas celles sur lesquelles on leur avait demandé de travailler (les parties tutorielles en particulier).

D'une façon générale, 81 % des élèves interrogés préfèrent les exercices dirigés (ED) sous forme d'enseignement assisté par ordinateur (EAO) aux exercices dirigés traditionnels en salle de classe (19 % sans opinion). Les raisons de leur choix, citées spontanément, sont rassemblées dans le *tableau I* et représentées sous forme d'histogramme sur la *figure 4*. Retenons que 75 % des réponses sont liées à la qualité du travail personnel, 47 % à l'attrait de l'outil informatique et 31 % à la qualité du contenu du didacticiel.

93 % des élèves sont favorables à la possibilité d'utiliser cet outil de formation en libre service au sein du Cnam (hors temps ouvrable) (3 % contre, 4 sans opinion), il est à noter que le pourcentage d'élèves favorables tombe à 44 % pour une utilisation dans leur entreprise (en temps ouvrable) proportion pratiquement égale à ceux qui sont contre (41 contre, 15 % sans opinion) (*figure 5*).

En conclusion, l'ensemble des cinq modules didacticiels de spectrométrie infrarouge a reçu un accueil très favorable de la part des étudiants du Cnam qui les ont utilisés seul ou en binôme pendant les séances d'exercices dirigés. De façon plus générale, l'utilisation de didacticiels de grande qualité est souhaitée dans la formation dispensée par le Cnam.

Résultats de l'examen partiel

Le nombre d'élèves ayant composé est de 165 sur les 180 inscrits. L'épreuve est constituée de plusieurs parties portant respectivement sur la spectrométrie de

masse (une question de cours), la spectrométrie de masse et la résonance magnétique nucléaire (un problème), l'absorption ultraviolette (une question de cours) et la spectrométrie infrarouge (une question de cours et un problème). L'ensemble est noté sur 20, la spectrométrie infrarouge représente 5 points sur les 20. Les différentes parties sont voulues de difficulté identique.

La moyenne des notes obtenues à la partie infrarouge (9,13/20) est significativement meilleure que la moyenne des notes globales (7,98/20) bien que les questions concernant l'infrarouge soient les dernières posées et qu'un grand nombre d'élèves n'aient pas eu le temps de traiter cette partie (*tableau II*). Près de la moitié (78 sur 165 élèves soit 47,3 %) ont obtenu une note supérieure à la moyenne pour la partie infrarouge alors qu'un peu moins d'un tiers (48 sur 165 élèves soit 29 %) a eu une note globale au-dessus de la moyenne.

Selon l'ordre dans lequel la partie infrarouge a été traitée par les élèves, les résultats obtenus sont assez significatifs. Rappelons que les questions portant sur l'infrarouge étaient les dernières posées.

Presque la moitié de la population (77 élèves sur les 165 qui ont composé) a traité l'infrarouge en dernier. Parmi ceux-ci, un tiers environ a obtenu la moyenne dans cette partie, la moyenne globale étant inférieure à la moyenne générale. En sortant de l'épreuve, beaucoup nous ont avoué ne pas avoir eu le temps de tout faire. Vingt sept élèves (soit 16 % environ) ont choisi de commencer par traiter l'in-

Tableau I - Raisons citées spontanément.

Qualité du travail personnel

à son rythme, plus actif, beaucoup d'exercices, plus rapide, erreur = source d'apprentissage, personnalisation, évaluation, meilleure mémorisation...

Attrait de l'outil

approche visuelle, vivant, ludique, convivial, performant, efficace, rapide, facilité d'apprentissage...

Qualité du contenu

clair, explicite, bonne progression, aide toujours disponible, rigoureux, plus intéressant, favorise la pratique, commentaires argumentés...

frarouge. Ce sont probablement ceux qui avaient le mieux appris et qui étaient confiants dans ce domaine. Les résultats montrent que sur cette partie, 78 % ont obtenu la moyenne en infrarouge ; ils ne sont plus que 36 % à avoir obtenu la moyenne générale. Ceux qui ont choisi de traiter l'infrarouge en position intermédiaire (37 % de la population) savent aussi assez bien. En effet, ils sont 59 % à avoir obtenu la moyenne.

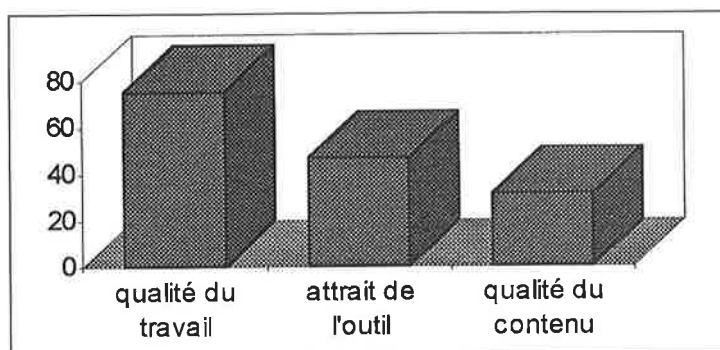


Figure 4 - Raisons citées spontanément par ceux qui sont favorables aux ED par EAO (en %).

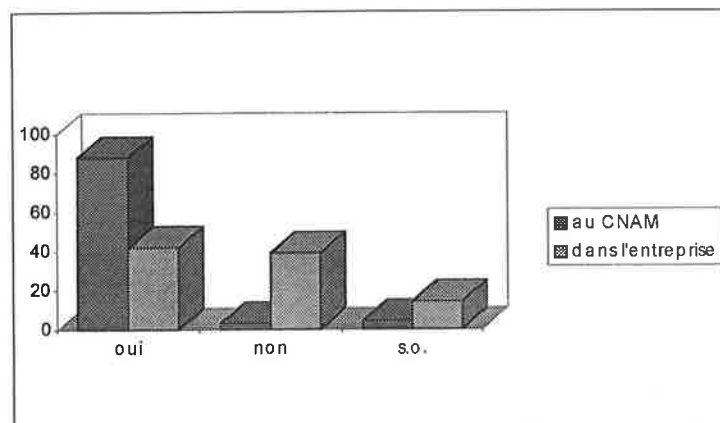


Figure 5 - Pourcentage d'étudiants favorables à l'utilisation du logiciel en libre service au Cnam et dans leur entreprise.

Tableau II - Résultats de l'épreuve consacrée à l'infrarouge.

élèves ayant	nombre d'élèves	élèves ayant la moyenne en IR		élèves ayant la moyenne générale		moyenne obtenue par ces populations	
						en IR	générale
commencé par l'IR	27	21	78 %	6	22 %	12,3	7,09
poursuivi par l'IR	61	36	59 %	22	36 %	10,15	8,4
terminé par l'IR	77	23	30 %	20	26 %	7,21	7,96
nombre total	165	80		48			

Alors que la moyenne générale ne varie pas beaucoup entre ces populations, la moyenne en infrarouge est significativement différente. Il semble bien qu'une grande majorité de ceux qui ont choisi de traiter les questions dans l'ordre dans lequel elles étaient posées n'ont pas eu le temps nécessaire pour traiter correctement cette question.

Ces résultats tendent à montrer que l'apprentissage de l'infrarouge, seule technique enseignée avec un didacticiel, a été meilleur, plus efficace et plus performant qu'un apprentissage uniquement traditionnel.

Conclusion

Cet ensemble d'autoformation à la spectrométrie d'absorption infrarouge, par sa conception, est utilisable à plusieurs niveaux, d'une part en formation initiale de base pour les étudiants d'université, d'IUT, d'écoles d'ingénieurs, etc., d'autre part pour un enseignement de complément ou sur mesure dans divers contextes de formation. Cette formation complète incluant un cours, des exercices et des exercices d'évaluation, d'une durée de plus de 60 heures, permettra à l'étudiant d'étudier à son propre rythme plus de 250 spectres et d'acquérir ainsi les bases nécessaires et suffisantes pour pouvoir interpréter un spectre infrarouge. La modularité de l'ensemble permet à la fois une découverte étape par étape du contenu et ensuite un accès direct au renseignement désiré. Cette modularité, le choix entre plusieurs modes de parcours, la possibilité de reprendre le travail au point précis où il a été interrompu, autorisent plusieurs modes d'intégration dans des organisations d'enseignement qui peuvent être très différentes.

L'expérimentation du didacticiel par les élèves du Cnam dans le cadre de l'enseignement des méthodes physico-chimiques d'analyse montre que cette nouvelle technologie d'apprentissage a

été très favorablement accueillie. Ils ont jugé le logiciel performant, efficace, clair et agréable. Ils pensent avoir mieux appris avec cet outil ; les résultats obtenus à l'examen partiel montrent qu'effectivement leur apprentissage a été meilleur que dans les autres techniques d'analyse pour lesquelles ils avaient appris de façon traditionnelle.

L'utilisation en salle de ressources du logiciel complet à l'Unsa par des élèves de licence de chimie depuis deux années universitaires, préalablement à l'exploitation du programme Exp'Air, n'a pas soulevé de problèmes particuliers, mais aucune évaluation de son efficacité n'a pu être encore entreprise.

Aspects techniques

L'ensemble des modules a été développé à l'aide du système-auteur DruiD [10] sur ordinateur IBM-PC compatibles sous MS-Dos, équipé de 640 K de mémoire vive et une carte graphique EGA/VGA, il nécessite un espace disque dur de 5 méga-octets comprenant également l'interpréteur DruiD.

L'ensemble des didacticiels, volume 1, *Spectrométrie infrarouge* (comprenant les quatre premiers modules) et volume 2, *Interprétation des spectres infrarouge*, est distribué par les Editions Jériko [11].

Un support de cours est fourni à l'étudiant. La lecture préalable du support de cours n'est pas indispensable à l'utilisation de l'ensemble des logiciels. De même, il n'est pas indispensable d'utiliser les logiciels pour poursuivre la lecture du support de cours. Ce support de cours contient toutes les informations théoriques indispensables à l'étude d'un spectre infrarouge ainsi que des indications relatives aux principales bandes observées pour telles ou telles fonctions chimiques.

Références

[1] Exp'Air version 3, Programme distribué par le Centre Documentaire Informatique Enseignement Chimie (CDIEC), université de Nice

Sophia-Antipolis, 06108 Nice Cedex 2, ISBN n° 2-908156-03-2.

- [2] Cabrol D., Rabine J.-P., Forrest T.P., An educational problem solving partner in Prolog for learning infrared spectroscopic analysis, *Computers and Education*, **1988**, 12, 1, p. 241.
- [3] Cabrol D., Rabine J.P., Rouillard M., Forrest T., Ricard D., Exp'Air : L'expert assistant infrarouge, in *Informatique et pédagogie des sciences physiques*, (M. Schwob éd.), INRP-UDP, Paris, **1988**, p.83.
- [4] Cabrol D., Rabine J.-P., Ricard D., Rouillard M., Forrest T.P., Exp'Air : un logiciel pour l'apprentissage de l'interprétation des données de spectroscopie infrarouge. in *Systèmes Experts et EAO* (M. Querré éd.), Orphys, Paris, **1991**, p. 123-148, ISBN 2-7080-0648-7.
- [5] IR-Mentor, Sadler Research Laboratories Ltd., **1992**.
- [6] Martelli J., Utjes M., université de Rennes, IRG1 : Révision de cours et liaison avec une étude pratique d'un spectre IR d'une molécule diatomique, voir le Catalogue des applications pédagogiques de l'ordinateur en chimie, édition **1994**, catalogue distribué par le CDIEC, université de Nice Sophia-Antipolis.
- [7] Dalibart M., université de Bordeaux I (Talence), *Formation assistée par ordinateur à la spectrométrie IRFT*, volume I : *Instrumentation*, séminaire FTIR-UNICAM, Paris, février **1993**.
- [8] Acol : Analytical Chemistry by Open Learning, Infrared Spectroscopy. Bill George and Peter McIntyre, Editor David J. Mowhorpe, published on behalf of Acol, Thames Polytechnic, London and John Wileys & Sons, Chichester, ISBN 0 471 91383 9. Infrared Spectrometry in Chemical Analysis. An interactive software package, David Kealey, Kingston Polytechnic, London, John Wileys & Sons, Chichester, United Kingdom, **1987**, part 1 - Introduction, ISBN 417 9159 X ; Part 2 - Sample Handling, ISBN 0 471 91260 3 ; Part 3 - Instrumentation, ISBN 0 471 91582 3.
- [9] Rabine J-P., Rouillard M., Cabrol D., Luft R., Initiation pragmatique à la RMN du proton. Une expérience d'autoformation basée sur des techniques audiovisuelles et informatiques. *L'Actualité Chimique*, **1984**, mars, p. 23-28.
- [10] Système-auteur DruiD, Développement et recherches sur les utilisations de l'informatique en didactique, Laboratoire d'ingénierie didactique, université Denis Diderot, Paris VII, tour 45-46, 1er étage, 75251 Paris Cedex 05. Tél : (1) 44.27.61.32. Fax (1) 44.27.57.40. E.mail : dubreuil@lid.jussieu.fr
- [11] Collection Cnam Média, Éditions Jériko, 13, rue Vernier, 75017 Paris. Tél. : (1) 53.81.88.20, Fax : (1) 53.81.88.21.