iChem Edu

An Internet based Information System for synthetic lab courses

Heinz A. Krebs, J. Fröhlich, F. Untersteiner and P. Gärtner

Institute of Applied Synthetic Chemistry Vienna University of Technology

er wette stielige en waarde wijnen wetende wet

- synthetic lab courses play an important role in chemical education ("wet chemistry")
- literature procedures often do not reflect available inventory
- "expensive" lab time is wasted by losing acquired knowledge
- preparation work before experimental work normally depending on library opening hours etc.

iChemLab

 lab programs often not didactically well balanced

Starting situation & problems

The iChemEdu Concept

iChemLab iChemExam iChemLecture

- A web application for electronic teaching
- time- and location independant preparation for students
- didactically optimized lab programs
- bi-directional interfaces to other data bases or moduls



The 3 Column Model

iCľ



iChemLecture



Various moduls of iChemEdu



Referred to Org. Chemistry:

- ca. 100 students per year attending the basic lab course
- 14 syntheses + 14 compulsory examinations

actual data set:

- ca. 400 procedures
- over 7000 protocols (equiv. to ca 25-40 protocols per compound)

Current status:

General Chem., Organic, Inorg. and Macromol. Labs run with iChemLab

iChemLab - actual situation





Data Input via a web-based form

iChemLab - MainFrame - Microsoft Internet Explorer	
Datei Bearbeiten Ansicht Eavoriten Extras ?	
🌀 Zurück 🔹 💿 🕤 📓 🏠 🔎 Suchen 🌟 Favoriten 🜒 Medien 🧭 😥 🍓 🐨 🍃 🥥 🗄 🥥	
Adresse 🕘 http://www.ichemlab.at/main.asp	🔽 🋃 Wechseln zu 🛛 Links 🎽
Heinz2 Krebs logged in Logout	At a second seco
□ </td <td></td>	

25 g Tee werden zumindest 3 Stunden lang mit 100 ml Ethanol extrahiert. Der Extrakt wird in einer Porzellanschale mit 15 g Magnesiumoxid in 90 ml Wasser versetzt und am Wasserbad eingedampft. Der Rückstand wird dreimal mit je 100 ml Wasser aufgekocht und heiß filtriert. Die vereinigten Filtrate werden nach Zusatz von 15 ml Schwefelsäure (10%ig) auf ein Drittel eingeengt, filtriert und 4x mit je 25 ml Chloroform extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen werden zum Entfärben mit einigen Milliltern Natriumhydroxid-Lösung (1%ig) geschüttelt, mit wenig Wasser gewaschen, über Natriumsulfat getrocknet und eingedampft. Der Rückstand wird aus Methanol umkristallisiert.

Laufmittel für DC: Aceton : Chloroform 4 : 5

Anmerkungen: keine Anmerkungen vorhanden!

Zurück zur Übersicht - Reaktionsansatz





Compound search





Reaction equation and category



Scheidetrichter wird zur besseren Phasentrennung 20 ml Wasser zugesetzt, die organische Phase abgetrennt und die wässrige Phase 3x mit je 25ml Diethylether extrahiert. Die vereinigten organischen Phasen werden mit einem Gemisch von Natriumsulfat und Kaliumkarbonat getrocknet. Anschließend wird das Lösungsmittel am Rotationsverdampfer abgezogen und das Rohprodukt im Vakuum (24 mbar) destilliert. Benzylidenmethylamin wird bei einer Temperatur von 76-78°C rein erhalten.

Der Ansatz ist für Flüssigkeiten auf 15 g und für Feststoffe auf 10 g Ausbeute (Halbmikropräparate auf 5 g bzw. 2 g) zu dimensionieren. Es ist mit einer Ausbeute von 67% der Theorie zu rechnen.

iChemLab

Literature & procedure



Safety data & waste disposal



iChemLab – Labware via iChemThesaurus





Es ist mit einer Ausbeute von 57% der Theorie zu rechnen.



Remarks - quality control through feedback



Calculation of amounts / assistant control tool

🎒 iChemLab - MainFrame - Microso	ft Internet Explore	r					_ <u>-</u>
<u>D</u> atei <u>B</u> earbeiten <u>A</u> nsicht <u>F</u> avorite	en E <u>x</u> tras <u>?</u>					Lini	<s th="" 🎽="" 🏥<=""></s>
Heinz2 Krebs logged in Logout		i (Chenly			Steeler	Chem IT
Soche Realmin	n Vorschn	ilit Eursonquu	i Annenhonge	n Dicrembleere /	hasazz Enqel	bnisse Abqabe	
		Benz	ylidenmethyl	amin			_
		Ausbeute in 🤉	g: [
×		ausgehend von: g Benzaldehyd					
		Schmelzpunk	:t:	-			
\sim	/	Siedepunkt:	[bei [mbar		
		Brechungsind	dex:	bei 20 💌	l∘c		
DC-La	aufmittel				R _f -Wert:		
Anme	rkung:						
Numn	ner des NMF	Rs PRAKWS00.					
			Speichern				
		Rich	twerte für die N	lote:			
	N5	G4	B3	U2	S 1		
	bis 51%	51% - 62%	62% - 72%	72% - 82%	ab 82%		
		bisheria	e Praktikumser	gebnisse			
			Mittelwer	t Standardahwei	chuna		
	Aucho	ute (% Theorie	•) 67.04	12	or raining		
	Ausue Due de			10			
	Brech	ungsindex bel 2	U ~C: 1,5515	0,0012			
tundefined						Internet	-
						W mienei	

Submission of compound / assistant control tool iChemLab

nemLab - MainFram	ie - Microsoft I	nternet Explorer		×
i <u>B</u> earbeiten <u>A</u> nsid	cht <u>F</u> avoriten	E <u>x</u> tras <u>?</u>		Links 🌺 🏭
Heinz2 Kr ogged in ogget	ebs		iChenlab & ?	Chem IT
🖉 Ergebn	isse - Microsol	ft Internet Explor	er	lappe
	8,60 g	39% Th	158 - 161 °C NMR A	1
	4,80 🗿 (Chime Feedback	s - Microsoft Internet Explorer	
	5,00 5,10	ARBITRARY UNIT	1D WINNMR der	
Aus	5,20 5,20		Nucleus: ?? Frequency: 200.13473582 MHz Acquisition Mode: SEQUENTIAL	18
in F	5,20	2000000.0		18
Sie	5,20			16
Bre °C:	5,40	1000000.0		17
Miti	5,60 Aprr			
Standarda	bweic	0.0	0 -1.0 -2.0 -3.0 -4.0 -5.0 -6.0 -7.0 -8.0 -9.0 -10.0 -11.0 -12.0 -13.0 -14.0 -15.0 PPM	
Spannweit	e			
zum Siede	punkt	die V Gleid	Verte werden aufgrund einer linearen Regression der Clausius-Clapeyron- hung ermittelt	
defined			internet	

Collected results / Quality Control



The Modules of iChemEdu





	Heinz	z A. K	REDS		
			Note		
Praktikum	Präparat	Abgabedaten	Besprechung	Präparat	
TUW-154	1,4-Diphenyl-1,3-butadien	U	3 (none)		Ser on
TUW-154	<u>Triethylcarbinol</u>				
TUW-154	1,4-Diphenyl-1,3-butadien	U	3 (none)		The second second
TUW-154	<u>3-Methyl-2-butanol</u>	U			
TUW-154	<u>1-Brompropan</u>	U			
TUW-154	<u>3-(4-Methylbenzoyl)</u> propionsäure				
TUW-154	<u>Bromessigsäure</u>				
TUW-154	Acetophenonoxim			4	
TUW-154	<u>2-Chloressigsäureethylester</u>	U	2 (keine Anmerkung) 2 (keine Anmerkung)) 2 (keine Anmerkung))	
TUW-154- PRAK	Analytikprobe				
TUW-154- PRAK	Analytikprobe				
	Mittelwert		2,3	3,0	
	Schnitt im gesamten Praktiku	m	1,8	2,4	

iChemLab

The Electronic Student File Card

Overview - iChemLecture

- Part of iChemEdu providing contents to the students.
- Two lines of products:
 - HTML-based interactive teaching material
 - text-based electronic copies of books.



Electronic Media in Chemical Education

Co-Development with: Prof. Dr. Hans Lohninger Electronic Media Group at the Institute of Chemical Technologies and Analytics Vienna University of Technology

Web-Based Interactive Teaching Material: TeachMe

- Based on HTML standard
- Navigation: table of contents, browse sequences, "see also" links, various indexes
- Embedded interactive simulations support "learning by doing"
- Material can be recompiled to cover special courses
- Self-Assessment and exams
- Special client software enhances functionality and provides protection for intellectual property

Electronic Copies of Printed Books - **PixLibris**

- Scanned books available online.
- Based on pixLibris® technology (www.pixlibris.at)
- Excellent readability by antialiasing technology
 - Navigation: table of contents, browse sequences, "see also" links, various indexes
- Fast access by excellent data compression
- Encryption of documents to protect against piracy
- Available both offline (CDROM) and online

Electronic Copies of Printed Books









iChem



iChem





iChemExam

- Selfassessement accompanying lectures and lab courses
- Preparation for examinations
- 4 different examination modes
- New Technology: answer by drawing chemical structures

iChemLab

• New Chemical Structure Coding: integers via SEICO





iChemExam - question catalogues



🗿 iChemLab - MainFrame - Mi	icrosoft Internet Explorer	
<u>D</u> atei <u>B</u> earbeiten <u>A</u> nsicht <u>F</u> avi	oriten Extras ?	a () () () () () () () () () (
🌀 Zurück 🝷 🕥 🖌 📓 🕻	🗿 🏠 🔎 Suchen 🤺 Favoriten 🜒 Medien 🤣 🎯 🍓 🖬 🕞 🥥 💽 🎇 🥥 🦓	» Links
Adresse 🍯 http://www-develop.iche	emlab.at/ichemexam/	👻 🔁 Wechseln zu
	Unterkapitel Aldehydes and Ketones	<u>^</u>
	112 Frage 1	
	113 Frage 2	
	Unterkapitel Alkanes	
eingeloggt	100 <u>Frage 1</u>	
Logout	101 Frage 2	
	102 Frage 3	
Fragenkapitel:	Unterkapitel Alkenes	
Organische Chemie	103 <u>Frage 1</u>	
Allgemeine Chemie	104 Frage 2	
Naturstoffchemie	Unterkapitel aromatic substitution	
	93 <u>Frage 1</u>	
	94 <u>Frage 2</u>	
	105 <u>Frage 3</u>	
	106 <u>Frage 4</u>	
	107 Frage 5	
	Unterkapitel Derivatives of Carboxylic acids	
	92 <u>Frage 1</u>	
	114 <u>Frage 2</u>	~
ê	🖉 Vertrauens	würdige Sites

iChemExam – various chemical chapters



Multiple Choice questions



Multiple Choice questions



iChemExam – stoechometric question





NEW FEATURE: answering by structure input

Feedback zu Antwort 1:

Erstsubstituenten mit +I-Effekt dirigieren zwar den Zweitsubstituenten in orthooder para-Stellung, hier jedoch entsteht aufgrund der sterischen Hinderung vorwiegend das para-Produkt. Siehe unter Mehrfachsubstitution von Aromaten sowie Sterische Effekte bei der Substitution.

Ihre Gesamtpunkte für diese Frage sind 0.50 Punkte von 1.00 möglichen Punkten!



iChem

iChemExam – structure based questions with feedback



Results of examinations



iChemLab

Results of examinations - details

The iChemEdu Project

- Call for projects within "New Media in Teaching" by the Austrian Ministry of Science
- Pre-Application in Dec. 2000, peer-reviewed process
- 26 out of 114 applications passed the first round
- those 26 project were invited for a full application
- after a 2nd peer-reviewed process 13 projects have been selected for funding
- iChemLab passed successfully the 2nd round finally ca. 10% success rate
- FUNDING: ca. 220.000 EURO (personnel) ca. 40.000 EURO (equipment)
 Value of own staff time: ca 102.000 EURO
 Project funding period: 2 years