لجان الصيدلة

PHARMACEUTICAL ANALYSIS

MORPHINE ACADEMY

By:Dana AlHroub

شرح الدكتور هذه المحاضرة الاثنين 3/8/2026 م

- مراجعة بنزوما الظهور بالـ IR
- يكون covalent
- يكون تولد dipole

مصطلحات المحاضرة الماضية

بشكل عام شو الحركات اللي بولدها الـ IR؟

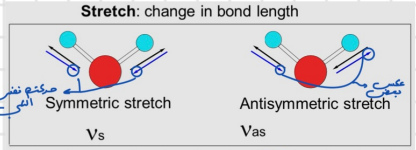
- Stretching
- Bending

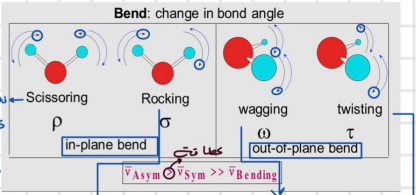
Stretching:
- Symmetric stretching: كلهم بطولوا/بقصروا مع بعض (الجزيء ما بتحرك لبعض كبير)
- Anti-symmetric stretching: واحده بتطول والثانية بتقصر (هاد اللي بولد ضغط داخل الجزيء) ← لهيك هاي الحركة بتحتاج طاقة أكبر

Bending: تغيير بالزاوية Bond Angle

ولأننا نغير زاوية فقط وليس طول الرابطة،فإن الطاقة المطلوبة أقل بكثير.ولهذا قال:جميع حركات الـBending أضعف من جميع حركات الـStretching

أعلى حركة تحتاج طاقة هي:
Asymmetric Stretching
ثم بعدها مباشرة:
Symmetric Stretching
والسبب كما شرحه:
لأن واحدة تطول والثانية تقصر، فيكون الضغط داخل الجزيء أكبر، وبالتالي تحتاج طاقة أكبر





- Scissoring: يعني حركة المقص كل الذرات بتضل بالـ In-plane داخل نفس المستوى الذي بتغير هو الزاوية فقط
- Rocking: يعني حركة البندول مركتة ذي شخص بحرك جسمه يمين ويسار الذرات بتبقى بالـ plane حتى في الـRocking الزاوية ليست ثابتة،هي تتغير أثناء الحركة.لكن الأهم أنها تبقى كلها داخل نفس المستوى.وقال بالحرف تقريبًا:لا تقولوا الزاوية ثابتة 90°
- wagging: الذرة المركزية رح تضل جوا المستوى بس الذرات الخارجية بتطلع لفوق ونازل يعني Out of plane
- twisting: Out of plane برضو هاي لكن فرقها عن الـ wagging انو الذرتين بتتحرك باتجاهات متعاكسين وجه تطلع والثانية تنزل

كيف أميز الحركات؟الدكتور ركز كثيرًا على هذه النقطة لأنها قد تأتي بالامتحان.
الحركات التي تبقى داخل المستوى (In-plane)
* Scissoring
* Rocking
الحركات التي تخرج خارج المستوى (Out-of-plane)
* Wagging
* Twisting
وقال:ممكن يعطيك رسم بالامتحان ويسألك: أي حركة خرجت خارج الـPlane؟
فلازم تميز مباشرة بين الأربع حركات.

احنا بنعرف انو هو الـ IR هو Wavenumber (cm⁻¹) وبنعرف انو علاقة طردية مع الطاقة

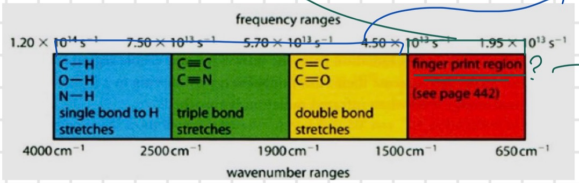
ولذلك بداية الطيف (4000 cm⁻¹) تمثل طاقة أعلى، ثم تقل الطاقة كلما اتجهنا نحو 600 أو 500 cm⁻¹

طيب تبعًا لهاد الكلي وبين موقع الحركات؟

منطقة الـStretching
منطقة:
4000 → 1500 cm⁻¹
تعتبر منطقة:
Stretching Region
لأن الحركات الموجودة فيها هي:
* Symmetric Stretching.
* Asymmetric Stretching.
وهذه الحركات تحتاج طاقة عالي

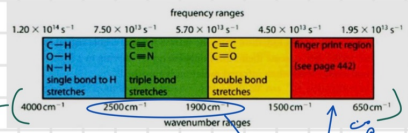
منطقة الـBending
ثم قال:
من:
1500 → 600 cm⁻¹
(وأضاف أن بعض الأجهزة تصل إلى 500 cm⁻¹)
هذه المنطقة هي:
Bending Region
لأن الحركات الموجودة فيها هي حركات الـBending.
ولأنها تحتاج طاقة أقل

لذلك تظهر لي الجزء العالي من الـ wavenumber



ليش سميناها Fingerprint Region؟
في منطقة الـStretching يحصل عندي مشكلة.

إذا ظهر عندي Peak في منطقة معينة،لا أستطيع مباشرة أن أقول:هذه C–H.
لأن ممكن تكون:
* O–H.
* N–H.
* C–H.
وجميعها تظهر في مناطق متقاربة



لأن هذه المنطقة تعطي مكانًا مميزًا لكل مركب ولكل رابطة.فإذا وجدت الرابطة في منطقة الـStretching،ثم وجدتها أيضًا في المكان المميز لها داخل الـFingerprint،أستطيع أن

لو ظهر عندي احتمال أن يكون عندي C–H في منطقة الـStretching،هذا وحده لا يكفي.أذهب إلى منطقة الـFingerprint.إذا ظهرت C–H أيضًا في مكانها الصحيح هناك،أقول:نعم، هذه فعلًا C–H.أما إذا لم تتطابق،فقد يكون الـPeak الذي رأيته في الأعلى يعود لرابطة أخرى.ثم أكد:الـFingerprint هي التي تثبت لي وجود الرابطة.وليست منطقة الـStretching وحدها.

قد يعطيكم قيمًا بالـWavenumber،
ولا يكتب اسم الحركة.
هنا أنتم لازم تعرفوا:
إذا القيمة فوق 1500 فهي ضمن منطقة الـStretching.
وإذا كانت تحت 1500 فهي ضمن الـBending

- الـ CO_2 ← Covalent ← نظريًا دي اكتيف كل الحركات تتولد لكن لأ؟ لأنه كل الحركات تولد dipole؟

1. Symmetric Stretching ← لن تظهر
linear
O=C=O
180°
الجهة اليمنى تطول...والجهة اليسرى تطول بنفس المقدار.أو الاثنتان تقصران معًا.لأن الجزيء متماثل:
القوة من اليمين تساوي القوة من اليسار.فالنتيجة:
.صفر = Dipole
لذلك قال:هذه الحركة لا تظهر في الـIR.وليس لأن الحركة لم تحدث.
بل لأنها:لم تغير الـDipole Moment.وهذه نقطة كررها أكثر من مرة

2. Asymmetric Stretching ← تظهر
جهة تطول...والجهة الثانية تقصر.هنا التماثل اختفى.وبالتالي:
يتولد Dipole.إذن:هذه

3 Bending ← تظهر
سواء انحنى بهذا الاتجاه...أو بهذا الاتجاه.طالما الزاوية تغيرت،فإن الـDipole يتغير.وبالتالي:
حركات الـBending أيضًا تظهر في الـIR

في كتب عندها هاي الادوات
غير لكن احنا دي نعتمد على الادوات
اي احطا ما اياها الدكتور

بعطي المنطقة
صفن يظهر C–H او C≡N
بعين ما بتغير
اميز اي رابط
مين

طيب كيف اميز؟
منطقة الـFingerprint Region
ليه

ذي بصمة الاصبع تميز الشخص عن بعض

يعني الـ CO_2 في الـ 3 حركات لكن اي بتسرب باكجان الـ Bending + Asym

الـ Asym ما بتسبب dipole ولا تولد [الحركات اي ما بتولد dipole موجوده لكن ما تظهر بالـ spectrum]

حركة تهتز لكن حركاتها لا تولد dipole ولا يدل بالـ IR

لـ H_2O الـ 3 حركات بتغير الـ dipole ← لذلك دي تظهر كل الحركات بالـ IR

الـIR هو تحليل نوعي (Qualitative Analysis)، وليس تحليلًا كميًا (Quantitative Analysis).يعني وظيفة جهاز الـIR ليست أن يخبرني كمية المادة أو تركيزها.وظيفته الأساسية:
التعرف على نوع الروابط (Functional Groups) الموجودة في المركب.
يعني عندما يظهر لي Spectrum، أنا أبحث عن:
* هل يوجد O–H؟
* هل يوجد C=O؟
* هل يوجد N–H؟
* هل يوجد C–H؟
إذن الجهاز يخبرني ما الروابط الموجودة، وليس كم تركيزها

هناك روابط عندما تراها في الطيف تعطيك انطباعًا مباشرًا.

1- O–H

قال:

إذا رأيت Peak تقريبًا بين 3200–3600 cm^{-1} وكان شكله Broad (عريض).

فأول شيء يخطر ببالك:

O–H Bond.

ثم أضاف:

إذا كانت Water، تكون أيضًا Broad، بل تكون أعرض من المعتاد.

2- N–H

قال:

الـN–H غالبًا يكون شكله:

Double Peak (قمتان متقاربتان).

وقال إنكم لستم مطالبين الآن بكل التفاصيل الدقيقة، وإنما فقط تأخذون فكرة عامة.

3- Carbonyl (C=O)

قال:

إذا رأيت Peak تقريبًا في منطقة 1600–1700 cm^{-1} وكان Sharp (حادًا).

فهذا يعطي انطباعًا بوجود:

Carbonyl Group (C=O).

هنا الدكتور لم يقل:

"احفظوا هذه الأرقام."

بل قال:

خذوا عنها نظرة عامة فقط.

لأن الجدول سيكون موجودًا معكم في الامتحان.

إذن المطلوب:

- تعرف شكل الـPeak (Broad أو Sharp).
- تعرف كيف تستدل على نوع الرابطة باستخدام الجدول.

ولا تحفظ كل القيم الرقمية.

Fingerprint region (600 - 1500 cm^{-1})- low energy single bond stretching and bending modes. The fingerprint region is unique for any given organic compound. However, there are few diagnostic absorptions.

Double-bond regions (1500 - 2000 cm^{-1})
C=C 1620 - 1680 cm^{-1}
C=O 1680 - 1790 cm^{-1}

Triple-bond region: (2000 - 2500 cm^{-1})
C≡C 2100 - 2200 cm^{-1} (weak, often not observed)
C≡N 2240 - 2280 cm^{-1}

X-H Single-bond region (2500 - 4000 cm^{-1})
O-H 3200 - 3600 cm^{-1} (broad)
C-O-H 2500-3500 cm^{-1} (very broad)
N-H 3350 - 3500 cm^{-1}
C-H 2800 - 3300 cm^{-1}
sp^3 -C-H 2850 - 2950 cm^{-1}
sp^2 =C-H 3000 - 3100 cm^{-1}
sp ≡C-H 3310 - 3320 cm^{-1}

هاد الجدول موضوعا رح يجينا بالامتحان لكن لازم نفهمه لانو رح نعمل عليه اسئلة

حسب الدكتور

(Experimental) صح هاي القيم عمليًا

بعني حطوا عليها يا بتاخا جهاز الـIR

لكن برضو نقدر نحسبها نظريًا (Theoretically)

مثل ما كنا نحسب λmax نظريًا في الـUV، ثم نقارنها بالقيمة العملية من الجهاز، نفس الفكرة هنا.
أي أننا نستطيع حساب الـWavenumber نظريًا، ثم نقارنه بما يظهر على الجهاز

ليه بنحتاج القانون؟

عشان

نعرف الروابط

عشان الذرات

بقدر اتوقع عشاني wavenumber بتظهر الروابط

"القانون سيمكني بحساب موقع الـpeak قبل ابتخاا الجهاز"

تفسير/اشتقاق القانون

Frequency $\nu_m = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{K}{m}}$

Reduced Mass (μ)

$\mu = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}$

Force constant → Bond strength الـ K تمثل

رابطة اقوى ← طاقة اكثر ← تحتاج

$\bar{\nu}, \nu$ ↑

عدد الـK على حسب نوع الرابطة

عشاني 3 انواع

1-single Bonds 2-double Bond (C=C)

3-Triple Bond (C≡C)

كلما زاد عدد الروابط بين الذرتين،فإن الذرتين:تقتربان أكثر من بعض.لذلك يصبح طول الرابطة أقصر.يعني:

Single > double > Triple

رابطة اقصر اقوى ← تحتاج طاقة

عادة قوة الرابطة تختلف

بعضها تعطيك K مختلفة لكل شي

عقوة للرابطة

Triple > double > single

Single Bond ≈ 5×10^2 N/m

double Bond ≈ 1×10^3 N/m

Triple Bond ≈ 1.5×10^3 N/m

تقريبًا الضعف

اقوى شعف

كل ما الـK زادت الـ ν والـ $\bar{\nu}$ زادت الرابطة بدها طاقة اقوى للاهتزاز وهاد يفسر الـ كفاية عند $\bar{\nu}$ اعلى من الـ-

اصلًا الرابطة يترتبط ذرتين لذلك لازم اصل كتلة الذرتين معًا

قالوا:لماذا لا نأخذ كتلة الذرتين معًا؟
ومن هنا ظهر مفهوم:
Reduced Mass (μ)
أي:كتلة مختزلة تمثل تأثير الذرتين معًا.وليس ذرة واحدة فقط.وقال:هذا جعل النتائج النظرية أقرب بكثير إلى العملية

حل المشكلة؟

في البداية،العلماء ارتكبوا خطأ.كانوا يحسبون باستخدام كتلة ذرة واحدة فقط.مثلًا:يثبتون الذرة A.ويحسبون اعتمادًا على كتلة الذرة B فقط.لكن عندما قارنوا النتائج النظرية بالعملية،وجدوا فرقًا كبيرًا.

سواء اشتغلنا بالتردد أو بالـWavenumber، النتيجة نفسها.

$\Delta E = h\nu$ يعتمد على المتغير

$\nu = \frac{c}{\lambda}$ $\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda}$

العلماء بالبداية افترضوا ان الرابطة بين A – B هي زنبرك الـ Spring

إذا سحبنا الرابطة،ثم تركناها،لن ترجع مرة واحدة.بل تبدأ تتحرك:رايح... وجاي...إلى أن تفقد الطاقة التي اكتسبتها.وقال:هذه الحركة هي التي يولدها سقوط أشعة الـIR.ثم مع الوقت تتحول الطاقة إلى حرارة ويستقر الجزيء من جديد.

بالبداية حكوا انو تشبث Pendulum تشبث وانو الحركة تشبث نص دائرة أثناء الاهتزاز نص

اذن اي ظهور 2π

إذا كانت الرابطة C=C أو C=O، هل تختلف قيمة k؟
لا.
وفي الامتحان،
أي Double Bond
اعتبروها:
$k = 10^3$
بغض النظر:
* C=C
* C=O
* أو أي Double Bond آخر.

السؤال دخ يعطينا
١. نوع الرابطة
٢. كتلة الذرة
واحنا نضارب قيمتها K الحسابية

$\Delta E = h\nu$
$\Delta E = h\frac{c}{\lambda}$
$\Delta E = hc\bar{\nu}$
٤ نواحنا بالـ IR بنستخدمها Wavenumber

سواء استخدمت Frequency أو Wavenumber، فكلما زادت القيمة زادت الطاقة، لأن العلاقة طردية في الحالتين

علشان اربط الطاقة مع الـ

$\nu_m = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}}$
ثابت
بصير 5.3×10^{-12}
Mg بالـ g/mol

هذا القانون ٤
متغيرات
الباقي بعد واحد ثابت دخ
يظهر

حل الدكتور هاد المثال ٤

شو معي؟ ف بعرف ٤
١. نوع الرابطة ← double و 10^3 N/m ٤ k
٢. الكتل الذرية للذرتين ← mass ٤ Carbon and oxygen

Example:
Calculate the approximate wavenumber and wavelength of the fundamental absorption peak due to the stretching vibration of a carbonyl group C=O.
Solution:
Mass of C is m1 = 12 x 10^{-3} kg/mol / 6 x 10^{23} atom/mol = 2 x 10^{-26} kg
Mass of O is m2 = 16 x 10^{-3} / 6 x 10^{23} = 2.7 x 10^{-26} kg
And the reduced mass μ is given by:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = (2 \times 10^{-26}) \times (2.7 \times 10^{-26}) / (2 + 2.7) \times 10^{-26} = 1.1 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

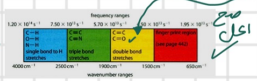
As noted earlier, the force constant for the typical double bond is about 1 x 10^3 N/m. substituting this value and μ into

$$\text{wavenumber} = \overline{\nu_m} = \frac{1}{2\pi c}\sqrt{\frac{k}{\mu}} = 5.3 \times 10^{-12}\sqrt{\frac{k}{\mu}} = 1.6 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$$

And the stretching band is found experimentally to be in the region of 1600 to 1800 cm^{-1}

لا نوحد الوحدة بالـ g/mol لأنها احدهم
القيمة هي
صح اعلى

العتبة النظرية مزبوطة حدا للعملية



لماذا يوجد Range؟وهنا ذكر نقطة مهمة.قال:لا تتوقع أن كل:
C=O
بالعالم تظهر عند رقم واحد.لأن:
الرابطة قد تكون مرتبطة بمجموعات مختلفة.
وكل مجموعة تؤثر قليلًا على مكان الامتصاص.
لذلك نعطي:
Range
وليس رقمًا ثابتًا

هاد السؤال عنا في Wavenumber دخ تظهر الروابط؟

كم صورة اهتزازية Vibrational modes بتملكها الجزيء؟

بنطبق قانون والقانون بعتمد على شكل الجزيء

1: linear molecule — 3N-5

2: nonlinear molecule — 3N-6

للأسف احنا كالنا لازم نعرف شكل الجزيء

من وين أرمّ القانون؟

3 - لأن لكل جزيء حركات دورانية حول 3 محاور

اخدنا قبل انواعين 3Translation / 3Rotation ← وصل ماشي

اما هون فعطان صيت -6

طيب ليش الـ linear -5

هناك واحدة من الحركات الدورانية:لا يكون لها تأثير حقيقي.لأن الجزيء أصلاً مستقيم.والدوران حول محوره لا يولد حركة مميزة.إذن بدل أن أطرح:

3 Rotations.

أطرح:2 فقط.

فتصبح:

Translation = 3

Rotation = 2

المجموع:

5

و N عدد الذرات

الـ H_2O

linear؟ ← 3N-6

$N_e = 2N+10 = 3$

$3*3-6 = 3V$

الـ Vibration Modes المتوقعة نظريًا

تطابق العملية

الـ3 حركات موجودة

هل دايمًا النتيجة النظرية تطابق العملية؟

يعني

اي حركات بحسبط القانون هل كلها تظهر بالـ IR؟

أنا قاعد أحسب:كم حركة ممكن تتولد نظريًا.

أي:كم حركة يستطيع الجزيء أن يعملها إذا سقط عليه IR.وهذا لا يعني أن الجهاز سيرى جميع هذه الحركات

لماذا؟

لأننا رجعنا لنفس الشرط الأول.

قال:

كل الحركات تتولد.

لكن بعدها نسأل:

هل غيرت الـDipole أم لا؟

إذا غيرت:

✓ تظهر.

إذا لم تغير:

✗ لا تظهر

← الـ CO_2 ما نحسب على القانون هو linear ← 3N-5 ← 3*3-5 = 4 حركات نظريًا

هل بالعملي الـ4 كلهم ظاهرين؟ لأ لأنو في منهم مارح يغيروا الـ dipole ← ما بظهر بالجهاز

ماذا يرى الجهاز؟قال:الجهاز يرى فقط:

الحركات التي أصبحت:

IR Active. ← اي بتعتبر الـ dipole

أما الحركات:

IR Inactive

فهي لا تظهر.

لأ تضربط بين عدد الحركات النظري وعدد الـ peak اي رح تظهر بالـ spectrum

أنا بالحسابات:

لا أستطيع أعرف عمليًا أي Peak سيظهر.

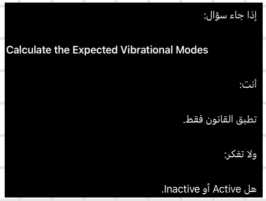
هذا أعرفه:

بعد الجهاز.

أما القانون:

فهو فقط:

يعطيني العدد المتوقع



لأ نسى انو النظري بأغلب الأوقات لا يطابق العملي

مش لأنو القانون غلط بس لأنو بعض الحركات بتكون IR Inactive