DETERMINATION OF THE PHYSICAL PROPERTIES OF DRUG MOLECULES

Prof Nizar Al-Zoubi

2026

Additive and constitutive properties

Additive properties

- Additive properties depend on the total contribution of the atoms in the molecules or on the sum of the properties of the constituents in a solution.
- Example: Molecular weight (because it is the sum of the masses of the constituent atoms)
- The total mass of the solution is the sum of the masses of the individual components.

يعني ما بتعتمد على ترتيب الذرات وهيك

تعتمد الخواص الجمعية على المساهمة الكلية للذرات في الجزيئات أو على مجموع خواص المكونات في المحلول.

مثال: الوزن الجزيئي (لأنه مجموع كتل الذرات المكونة)

• الكتلة الكلية للمحلول هي مجموع كتل المكونات الفردية.

Additive and constitutive properties

Constitutive properties

- Constitutive properties depend on the arrangement and to a lesser extent on the number and kind of atoms within a molecule.
- These properties give clues to the constitution of individual compounds and groups of molecules in a system.

تعتمد على ترتيب الذرات

• تعتمد الخصائص التركيبية على ترتيب الذرات، وبدرجة أقل على عددها ونوعها داخل الجزيء.

• تعطي هذه الخصائص أدلة على تركيب المركبات الفردية ومجموعات الجزيئات في النظام.

Additive and constitutive properties

- The refraction of light, electric properties, surface and interfacial characteristics, and the solubility of drugs are at least in part constitutive and in part additive properties.

يعني في حالات بتكون هيك وحالات يتكون هيك

الخصائص الإضافية والتكوينية

• انكسار الضوء، والخصائص الكهربائية، وخصائص السطح والسطح البيني، وذوبانية الأدوية هي على الأقل جزئيًا خصائص تكوينية وجزئيًا خصائص إضافية.

Additive and constitutive properties

- Refraction is the change of direction of propagation of any wave, such as an electromagnetic or sound wave, when it passes from one medium to another in which the wave velocity is different, or when there is a spatial variation in a medium's wave velocity.

يعني انه ينكسر الضوء عند انتقاله من وسط لوسط او انه نفس الوسط بس فيه تباين فراغي (يعني كل جهة ممكن تحتوي على تراتيب مختلفة من الذرات مثلا)

• الانكسار هو تغير اتجاه انتشار أي موجة، مثل الموجة الكهرومغناطيسية أو الصوتية، عند انتقالها من وسط إلى آخر تختلف فيه سرعة الموجة، أو عند وجود تباين مكاني في سرعة الموجة في وسط ما.

TABLE 4–1
ATOMIC AND GROUP CONTRIBUTIONS TO MOLAR REFRACTION*

C— (single)	2.418
—C═ (double)	1.733
—C≡ (triple)	2.398
Phenyl (C_6H_5)	25.463
H	1.100
O (C═O)	2.211
O (O—H)	1.525
O (ether, ester, C—O)	1.643
Cl	5.967
Br	8.865
L	13.900

Additive and constitutive properties

يعني بس عشان يوضحنا انه هو نفس الصيغه الكيميائيه للمركبات ولكن الاختلاف بالترتيب والروابط ادى الى اختلاف انكسار الضوء

- For the compound C2H5–CO–CH3 the molar refraction would be 19.998 while for the compound CH3–CH=CH–CH2–OH it will be 18.7.
- Thus, although these two compounds have the same number of carbon, hydrogen, and oxygen atoms, their molar refractions are not the same.
- The molar refractions of the atoms are additive, but the carbon and oxygen atoms are constitutive in refraction.
- A single-bonded carbon does not add equally as a double bonded carbon, and a carbonyl oxygen (C=O) is not the same as a hydroxyl oxygen; therefore the two compounds exhibit different molar refractions.

• بالنسبة للمركب C2H5-CO-CH3، يكون الانكسار المولي 19.998، بينما يكون 18.7 للمركب CH3-CH=CH-CH2-OH. وبالتالي، على الرغم من أن هذين المركبين يحتويان على نفس عدد ذرات الكربون والهيدروجين والأكسجين، إلا أن انكساراتهما المولية ليست متساوية.

• الانكسارات المولية للذرات جمعية، لكن الكربون و ذرات الأكسجين عنصر أساسي في الانكسار.

لا ينكسر الكربون المرتبط برابطة أحادية بنفس قوة انكسار الكربون المرتبط برابطة ثنائية، كما أن أكسجين الكربونيل (C=O) يختلف عن أكسجين الهيدروكسيل، ولذلك يُظهر المركبان انكسارات مولية مختلفة.

Dielectric constant

- To properly discuss dipoles and the effects of solvation, one must understand the concept of dielectric constant.
- Placing a molecule in an electric field is one way to induce a dipole.
- In a capacitor (condenser), there are two parallel conducting plates separated by a medium across a distance (r).

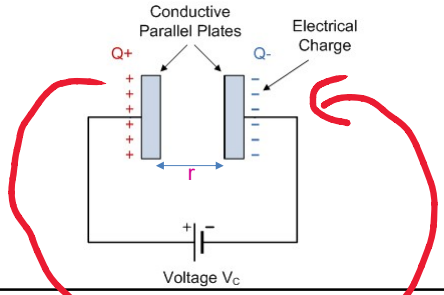
• لمناقشة ثنائيات الأقطاب وتأثيرات الذوبان بشكل صحيح، يجب فهم مفهوم ثابت العزل الكهربائي.

وضع جزيء في مجال كهربائي هو إحدى طرق توليد ثنائي قطب.

• في المكثف، يوجد لوحان موصلان متوازيان يفصل بينهما وسط عبر مسافة (r).

Dielectric constant

- Consider two parallel conducting plates, such as the plates of an electric condenser, which are separated by some medium across a distance *r* and apply a potential across the plates.
- Electricity will flow from the left plate to the right plate through the battery until the potential difference of the plates equals that of the battery supplying the initial potential difference.



من البطارية

• تخيل لوحين موصلين متوازيين، مثل لوحي مكثف كهربائي، يفصل بينهما وسط ما بمسافة r، ويُطبق فرق جهد بين اللوحين.

• سيتدفق التيار الكهربائي من اللوح الأيسر إلى اللوح الأيمن عبر البطارية حتى يصبح فرق الجهد بين اللوحين مساويًا لفرق الجهد الابتدائي للبطارية.

الفكره انه عندي لوحين مفصولين عن بعض ، وعندي بطاريه بتزودنا بالتيار الكهربائي، بما انه جهه البطاريه السالبه على اليمين فاللوح المقابل لها رح يكون بنفس شحنتها وبعدها رح يتحرك التيار من اللوح اليسار الى اللوح اليمين مارا بالبطاريه ورح يضل هذه العمليه مستمره الى ان يتساوى فرق جهد البطاريه مع فرق جهد اللوحين

Dielectric constant

- The *capacitance, C* (in farads), is equal to the quantity of electric charge, *q* (in coulombs), stored on the plates, divided by the potential difference, *V* (in volts), between the plates:

$$C = q/V$$

- The capacitance of the condenser depends on the type of medium separating the plates as well as on the thickness *r*.
- When a vacuum fills the space between the plates, the capacitance is C_0.
- This value is used as a reference to compare capacitances when other substances fill the space.

• السعة، C (بالفاراد)، تساوي كمية الشحنة الكهربائية، q (بالكولوم)، المخزنة على اللوحين، مقسومة على فرق الجهد، V (بالفولت)، بين اللوحين:

تعتمد سعة المكثف على نوع الوسط الفاصل بين الألواح وكذلك على سمكه r.

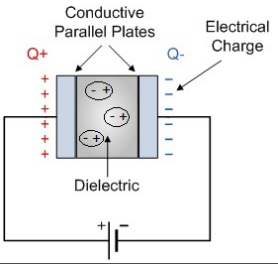
• عندما يملأ الفراغ المساحة بين الألواح، تكون السعة Co-.

تُستخدم هذه القيمة كمرجع لمقارنة السعات عند وجود مواد أخرى تملأ الفراغ.

يعني السعة بالفراغ نرمزلها ب C0 وهي القيمة المرجعية عشان المقارنة

Dielectric constant

- If water fills the space, the capacitance is increased, since the water molecule can orientate itself so that its negative end lies nearest the positive condenser plate and its positive end lies nearest the negative plate.
- This alignment provides additional movement of charge because of the increased ease with which electrons can flow between the plates.
- Thus, additional charge can be placed on the plates per unit of applied voltage.



• إذا ملأ الماء الفراغ، تزداد السعة، لأن جزيء الماء يستطيع توجيه نفسه بحيث يكون طرفه السالب أقرب إلى صفيحة المكثف الموجبة وطرفه الموجب أقرب إلى الصفيحة السالبة.

يوفر هذا التوجيه حركة إضافية للشحنة نظرًا لسهولة تدفق الإلكترونات بين الصفيحتين.

• وبالتالي، يمكن وضع شحنة إضافية على اللوحين لكل وحدة جهد مطبق.

الفكرة لما نحط مركب polar وله قدرة على الدوران مثل الماء رح تدور كل جهه مشحونه بمقابل الجهه المعاكسه لها بالشحنه من الصفائح، بالاضافه انه رح يصير انتقال الالكترونات بين الصفائح اسهل

Dielectric constant

- A molecule can maintain a separation of electric charge either through induction by an external electric field or by a permanent charge separation within a polar molecule.
- Dielectric constant (relative permittivity) of a material is its (absolute) permittivity expressed as a ratio relative to the permittivity of vacuum.

يعني ممكن نحط ك medium يا مركب nonpolar ونحته من خلال المجال الكهربائي او ماده polar

• يمكن للجزيء الحفاظ على فصل الشحنة الكهربائية إما عن طريق الحث بواسطة مجال كهربائي خارجي أو عن طريق فصل دائم للشحنة داخل جزيء قطبي.

• ثابت العزل الكهربائي (السماحية النسبية) لمادة ما هو سماحيتها (المطلقة) معبرًا عنها كنسبة إلى سماحية الفراغ.

Dielectric constant

- The capacitance of the condenser filled with some material, C_x, divided by the reference standard C_0, is referred to as the *dielectric constant*, ε:

$$\varepsilon = C_x / C_0$$

- The dielectric constant ordinarily has no dimensions, since it is the ratio of two capacitances.

Vacuum	1.0 (by definition)
Metals	Infinite
Gases	1.00xx (at one atmosphere)
Water	87.9 (0°C) to 55.5 (100°C)
Hexane	1.8865 (20°C)
Cyclohexane	2.0243 (20°C)
Benzene	2.285 (20°C)
Hydrocarbon lubrication oils	2.1 to 2.4 (room temperature)

Table 1. Dielectric Constant of Common Materials

سعة المكثف المملوء بمادة ما، C، مقسومة على المعيار المرجعي Co، تُعرف بثابت العزل الكهربائي، E.

ثابت العزل الكهربائي عادةً ليس له أبعاد، لأنه نسبة سعتين.

Polarity of molecules

- A dipole is a separation of two opposing charges over a distance r, and is generally described by a vector known as the dipole moment (μ).
- The dipole moment (μ) depends on the individual charge moments within the molecule and the distance of separation between charges. This magnitude is given by:

$$\mu = qr$$

- The unit of dipole moment is the debye, with one debye equals to 10^{-18} esu cm.
- The esu (electrostatic unit) is the measure of electrostatic charge in a vacuum that repels a like charge one centimeter away with a force of one dyne.

• ثنائي القطب هو فصل بين شحنتين متعاكستين على مسافة r، ويُوصف عمومًا بمتجه يُعرف باسم عزم ثنائي القطب (μ).

يعتمد عزم ثنائي القطب (μ) على عزم كل شحنة داخل الجزيء والمسافة الفاصلة بين الشحنات. ويُعطى هذا المقدار بالعلاقة:

وحدة عزم ثنائي القطب هي الديباي، حيث يساوي الديباي الواحد 10-18 وحدة كهروسكونية سنتيمتر.

• تُعد وحدة esu (الوحدة الكهروستاتيكية) وحدة قياس الشحنة الكهروستاتيكية في الفراغ التي تدفع شحنة مماثلة تقع على بعد سنتيمتر واحد بقوة تساوي داين واحد.

يعني لو شحنه مقدارها 1esu اذا وضعت على بعد 1cm من شحنه اخرى مثلها في الفراغ فانها تؤثر عليها بقوه مقدارها 1dyne

Polarity of molecules

- A molecule can maintain a separation of electric charge (i.e. get polarized) either:

1. By having a permanent charge separation within a polar molecule (permanent dipole moment).

2. Through induction by an external electric field or surrounding ions. Induced polarization can occur for both polar and nonpolar molecules (induced dipole moment).

• يمكن للجزيء الحفاظ على فصل الشحنة الكهربائية (أي الاستقطاب) إما:

1. من خلال وجود فصل دائم للشحنة داخل الجزيء القطبي (عزم ثنائي قطب دائم).

2. من خلال الحث بواسطة مجال كهربائي خارجي أو أيونات محيطة. يمكن أن يحدث الاستقطاب المستحث لكل من الجزيئات القطبية وغير القطبية (عزم ثنائي قطب مستحث).

Induced Polarization of nonpolar molecules

هاي كلنا بنعرفها وهي انه الالكترونات توزعها بكون غير ثابت و غير منظم فبالتالي ممكن اذا تعرض الى مجال كهربائي تدمر السحابه الالكترونيه وبصير في عندنا شحنه جزيئيه

- When nonpolar molecules are exposed to an external electric field, their electron clouds become distorted, producing a temporary separation of charge.
- This phenomenon, known as **induced polarization**, causes the molecules to develop a transient dipole moment.
- Once the electric field is removed, the electron distribution returns to its original configuration, and the induced dipole disappears.
- The polarizability of a substance influences several important physical properties, including its refractive index, dielectric constant, and optical rotation.

عندما تتعرض الجزيئات غير القطبية لمجال كهربائي خارجي، تتشوه سحبها الإلكترونية، مما ينتج عنه فصل مؤقت للشحنة.

تُعرف هذه الظاهرة بالاستقطاب المستحث، وتتسبب في تكوين الجزيئات لعزم ثنائي قطب عابر.

بمجرد إزالة المجال الكهربائي، يعود توزيع الإلكترونات إلى تكوينه الأصلي، ويختفي ثنائي القطب المستحث.

تؤثر قابلية استقطاب المادة على العديد من الخصائص الفيزيائية المهمة، بما في ذلك معامل الانكسار، وثابت العزل الكهربائي، والدوران البصري.

وطبعا زي ما قلنا هو مؤقت فاذا شلنا المجال الكهربائي رح ترجع الالكترونات كما كانت و تختفي الشحنات الجزيئيه

Induced Polarization of nonpolar molecules

- The magnitude of the induced dipole moment is directly proportional to both the applied electric field (E) and the molecular polarizability (α_p):

$$\mu_{ind} = E \times \alpha_p$$

- Induced polarizability is defined as the ease with which an ion or molecule can be polarized by an external force.
- It is an intrinsic molecular property that depends on the size and electronic structure of the molecule.
- Polarizability is commonly expressed in units of 10^{-24} cm^3 (or $Å^3$).

$1\,Å = 10^{-8}\,cm$

$1\,Å^3 = 10^{-24}\,cm^3$

يتناسب مقدار عزم ثنائي القطب المستحث تناسبًا طرديًا مع كل من المجال الكهربائي المطبق (E) والاستقطابية الجزيئية (α):

• تُعرّف الاستقطابية المستحثة بأنها سهولة استقطاب أيون أو جزيء بواسطة قوة خارجية.

وهي خاصية جزيئية جوهرية تعتمد على حجم الجزيء وبنيته الإلكترونية.

تُعبّر الاستقطابية عادةً بوحدات 10-24 سم3 (أو Å3).

كل ما زاد حجم الذره كل ما زادت الالكترونات كل ما زادت فرصه اختلاف التوزيع الالكتروني وظهور الشحنات الجزيئيه

Induced Polarization of nonpolar molecules

يمثل الاستقطاب المولي المستحث Pi عزم ثنائي القطب المستحث لكل مول من المادة غير القطبية عندما تكون شدة المجال الكهربائي للمكثف ١ فولت/متر.

- The induced molar polarization Pi represents the induced dipole moment per mole of nonpolar substance when the electric field strength of the condenser is 1 V/m.

احفظوا الوحدات ضروري

- Pi ($cm^3\ mol^{-1}$) is defined by the Clausius-Mossotti equation as:

يُعرَّف Pi (سم٣ مول-) بواسطة معادلة كلاوزيوس-موسوتي

$$P_i = \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \cdot \frac{M}{\rho}$$

- Where:
  - ε is the dielectric constant.
  - M is the molar mass (molecular weight) ($g\ mol^{-1}$).
  - ρ is the density ($g\ cm^{-3}$).

Induced Polarization of nonpolar molecules

طبعا هو بيكون معطيك dielectric constant قوم اعطيك السعه للماده والسعه للفراغ وتحسبه ، والباقي تطبيق مباشر

EXAMPLE 4–1

Polarizability of Chloroform

Chloroform has a molecular weight of 119 g/mole and a density of 1.43 g/cm^3 at 25°C. What is its induced molar polarizability? We have

$$P_i = \frac{(\varepsilon - 1)}{(\varepsilon + 2)} \times \frac{M}{\rho} = \frac{(4.8 - 1)}{(4.8 + 2)} \times \frac{119}{1.43} = 46.5\ \text{cm}^3/\text{mole}$$

Permanent dipole moment

- In a polar molecule, the separation of positively and negatively charged regions can be permanent, and the molecule will possess a **permanent dipole moment**, μ.
- Dipoles therefore don't have a net charge, but this charge separation can often create charge-like interactions and influence several physical and chemical properties.
- The dipole moment is a vector property where the symmetry of the molecules affects generally its dipole moment. For example, carbon dioxide has no net dipole.
- Another example: Benzene and p-dichlorobenzene are symmetric planar molecules and have a dipole moment of zero. Meta (*m*-) and ortho (*o*-) dichlorobenzene are not symmetrical and have significant dipole moment.

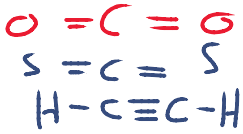
• في الجزيئات القطبية، قد يكون الفصل بين لمناطق المشحونة إيجابًا والمناطق المشحونة سلبًا دائمًا، وبالتالي يمتلك الجزيء عزم ثنائي قطب دائم، M.

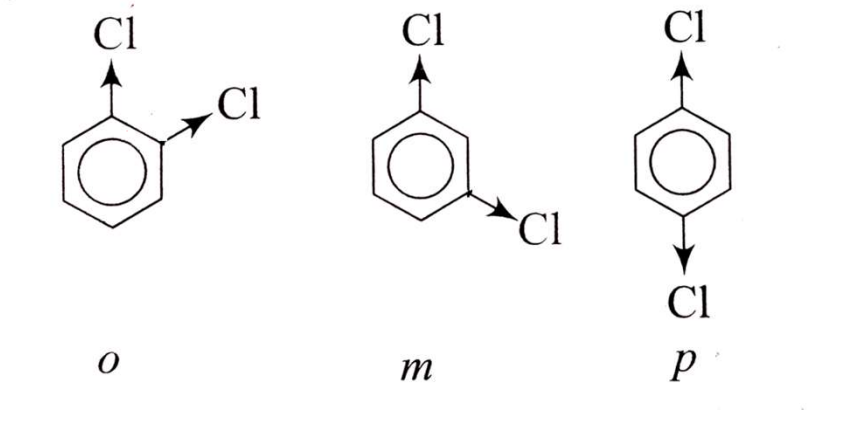
• لذلك، لا تمتلك ثنائيات الأقطاب شحنة صافية، ولكن هذا الفصل للشحنات غالبًا ما ينشئ تفاعلات شبيهة بالشحنات ويؤثر على العديد من الخصائص الفيزيائية والكيميائية.

• عزم ثنائي القطب هو خاصية متجهة حيث يؤثر تناظر الجزيئات بشكل عام على عزم ثنائي القطب الخاص بها. على سبيل المثال، لا يمتلك ثاني أكسيد الكربون عزم ثنائي قطب صافٍ.

• مثال آخر: البنزين وبارا-ثنائي كلورو بنزين جزيئات مستوية متناظرة ولها عزم ثنائي قطب يساوي صفرًا. أما ميتا (m-) وأورثو (o-) ثنائي كلورو بنزين فليسا متناظرين ولهما عزم ثنائي قطب كبير.

لا يولد dipole لانه الجهتين متساويات للكهروسلبية





بال ortho تقريبا الاثنين بنفس الاتجاه تقريبا وليس بالتمام ولذلك ال dipole هون هي الاقوى moments

ال meta مش متعاكسين وبالتالي رح يكون في dipole moment ولكم مش بقوة ال ortho لانه بال meta بضلو ابعد

ال para الجهتين متساويات بالكهرو السلبيه والاثنين رح تكون صفر لانهم متعاكسين يلغوا بعض فالمحصله رح تكون

Permanent dipole moment

- When polar liquids are exposed to an external electric field, two types of polarization occur:
  - **Induced polarization**: Similar to nonpolar liquids, the electric field distorts the electron clouds, creating an induced dipole moment.
  - The magnitude of the induced polarization is proportional to the applied electric field strength and the molecular polarizability.
  - **Orientation polarization**: The electric field also aligns the permanent dipole moments of polar molecules along the field direction.
  - The overall polarization of a polar liquid is the combined result of induced polarization and orientation polarization.

نفس الي فوق

• عند تعريض السوائل القطبية لمجال كهربائي خارجي، يحدث نوعان من الاستقطاب:

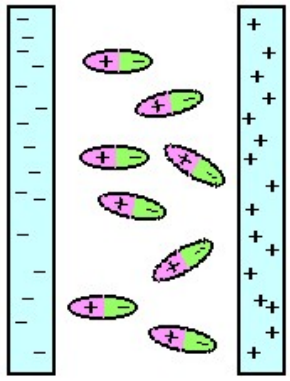
• الاستقطاب المستحث: على غرار السوائل غير القطبية، يشوه المجال الكهربائي السحب الإلكترونية، مما يخلق عزم ثنائي قطب مستحث.

• يتناسب مقدار الاستقطاب المستحث طرديًا مع شدة المجال الكهربائي المُطبق وقابلية استقطاب الجزيئات.

استقطاب التوجيه: يُرتب المجال الكهربائي أيضًا عزوم ثنائي القطب الدائمة للجزيئات القطبية على طول اتجاه المجال.

• الاستقطاب الكلي لسائل قطبي هو النتيجة المشتركة للاستقطاب المستحث واستقطاب التوجيه.

نلاحظ الترتيب الناتج عن الدوران حيث ان كل جهه مشحونه مقابله للصفيحه المعاكسه لها بالشحنه



Refractive Index

- Light passes more slowly through a substance than through a vacuum.
- As light enters a denser substance, the advancing waves at the interface are modified by being closer together owing to their slower speed and shorter wavelength.
- If the light enters a denser substance at an angle, one part of the wave slows down more quickly as it passes the interface, and this produces bending of the wave toward the interface. This phenomenon is called refraction.

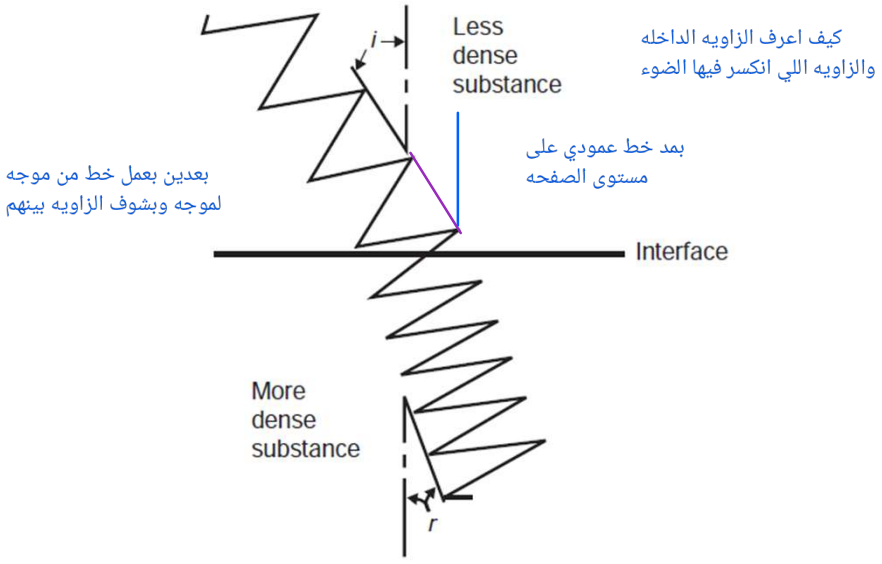
يعني كل ما زادت كثافه الماده اللي رح يدخلها الضوء كل ما قلت سرعه الضوء وكل ما قل الطول الموجي

واذا دخل الضوء برضو ماده اكثر كثافه بزاويه معينه هذا سوف يؤدي بالنهايه الى الانكسار

• يمر الضوء عبر المادة بشكل أبطأ من مروره عبر الفراغ.

• عندما يدخل الضوء مادة أكثر كثافة، تتغير الموجات المتقدمة عند السطح الفاصل بتقاربها بسبب بطء سرعتها وقصر طول موجتها.

إذا دخل الضوء مادة أكثر كثافة بزاوية، فإن جزءًا من الموجة يتباطأ بسرعة أكبر عند مروره بالسطح الفاصل، وهذا ينتج عنه انحناء الموجة نحو السطح الفاصل. تسمى هذه الظاهرة بالانكسار.



Waves of light passing an interface between two substances of different density.

Refractive Index

- The relative value of refraction or bending of light between two substances is given by the **refractive index**, n:

$$n = \frac{\sin i}{\sin r}$$

$$n = \frac{\text{velocity of light in first substance}}{\text{velocity of light in second substance}}$$

- In which sin i is the sine of the angle of the incident ray of light and sin *r* is the sine of the angle of the refracted ray.
- Normally the numerator is taken as the velocity of light in air, and the denominator is the material being investigated.

القيمة النسبية لانكسار أو انحناء الضوء بين مادتين تُعطى بمعامل الانكسار، n:

حيث sin i هو جيب زاوية سقوط شعاع الضوء، و sin r هو جيب زاوية انكساره. عادةً ما يُؤخذ البسط على أنه سرعة الضوء في الهواء، والمقام على أنه المادة قيد الدراسة.

Refractive Index

- Refraction varies with temperature and the wavelength of light; n_D^{20} is the refractive index using the D-line emission of sodium at 589 nm, at a temperature of 20°C.
- The refractive index can be used to identify a substance.
- Typically, a refractometer is used to determine refractive index.

يعني الرقم اللي فوق بيمثل درجه الحراره و الرمز اللي تحت بمثل نوع الضوء المسقط بطول موجي معين

يتغير الانكسار بتغير درجة الحرارة وطول موجة الضوء، n20 هو معامل الانكسار باستخدام خط انبعاث D للصوديوم عند 589 نانومتر، عند درجة حرارة 20 درجة مئوية.

يمكن استخدام معامل الانكسار لتحديد المادة.

عادةً، يُستخدم مقياس الانكسار لتحديد معامل الانكسار.

Refractive Index

- Molar polarization, Pi, can be considered roughly equivalent to molar refraction, Rm, and can be written as follows:

$$\varepsilon = n^2{}_\infty$$

$$P_i = \left(\frac{n_\infty^2 - 1}{n_\infty^2 + 2}\right)\frac{M}{\rho} = \frac{4}{3}\pi N \alpha_p$$

- n_∞ : refractive index for light of long wavelengths
- From this equation, the polarizability α_p of a nonpolar molecule may be obtained from a measurement of refractive index.

• يمكن اعتبار الاستقطاب المولي، Pi، مكافئًا تقريبًا للانكسار المولي، Rm، ويمكن كتابته على النحو التالي:

• ng: معامل الانكسار للضوء ذي الأطوال الموجية الطويلة •

من هذه المعادلة، يمكن الحصول على قابلية الاستقطاب α، لجزيء غير قطبي من قياس معامل الانكسار.

ELECTROMAGNETIC RADIATION

- Electromagnetic radiation is a form of energy that propagates through space as oscillating electric and magnetic fields atm right angles to each other and to the direction of the propagation.
- A form of energy that propagates through space.
- Travels as oscillating electric and magnetic fields.

• الإشعاع الكهرومغناطيسي هو شكل من أشكال الطاقة ينتشر في الفضاء على شكل مجالات كهربائية ومغناطيسية متذبذبة، متعامدة مع بعضها البعض ومع اتجاه الانتشار.

• شكل من أشكال الطاقة ينتشر في الفضاء.

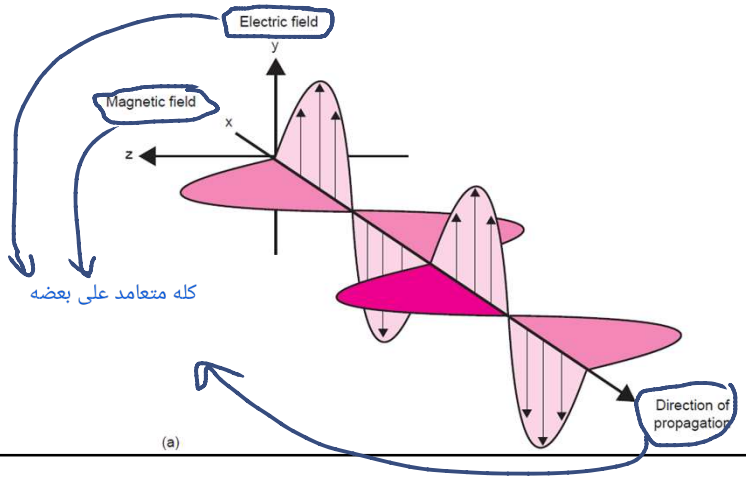
• ينتقل على هيئة مجالات كهربائية ومغناطيسية متذبذبة.

ELECTROMAGNETIC RADIATION

- Electric and magnetic fields are:
  - Perpendicular to each other.
  - Perpendicular to the direction of propagation.
- Both fields are described by **sinusoidal waves**.

المجالين الكهربائي والمغناطيسي هما:
• متعامدان على بعضهما البعض.
• متعامد على اتجاه الانتشار.

يوصف كلا المجالين بموجات جيبية.



ELECTROMAGNETIC RADIATION

Key Wave Parameters

- **Amplitude (A):** Height of the wave.
- **Frequency (ν):** Number of waves passing a fixed point each second (Hz).
- **Wavelength (λ):** Distance between two consecutive wave maxima.

السعة (A): ارتفاع الموجة.

التردد (ν): عدد الموجات التي تمر بنقطة ثابتة كل ثانية (هرتز).

الطول الموجي (λ): المسافة بين قمتين متتاليتين للموجة.

ELECTROMAGNETIC RADIATION

- The velocity of electromagnetic radiation is given by:

$$v=u\lambda$$

هذا القانون العام سواء في اي وسط كنت

where:

v = velocity of propagation
u = frequency
λ = wavelength

- In a vacuum: • في الفراغ:

$$c=2.998\times10^{8}\ m/s$$

- Therefore,

$$u=c/\lambda$$

• سرعة الإشعاع الكهرومغناطيسي تُعطى بالعلاقة: v=ud

ELECTROMAGNETIC RADIATION

Important Points

- Frequency depends on the radiation source.
- Frequency remains constant when radiation enters another medium.
- Velocity and wavelength change depending on the medium.

يعتمد التردد على مصدر الإشعاع.

ويبقى التردد ثابتًا عند دخول الإشعاع وسطًا آخر.

تتغير السرعة والطول الموجي تبعًا للوسط.

يعني ال frequency بتضل ثابته مهما كان الوسط اما ال velocity and wavelength فاذا دخل الضوء وسط اكثر كثافه فبالتالي الإثنين بقلوا

ELECTROMAGNETIC RADIATION

Wave Number

- Wave number is defined as the reciprocal of wavelength:

$$\bar{\nu} = \frac{1}{\lambda} \quad \text{Unit: } \mathbf{cm^{-1}}$$

- Represents the number of wavelengths per centimeter.
- Directly proportional to frequency and energy.

• يُعرَّف العدد الموجي بأنه مقلوب الطول الموجي:

• يمثل عدد الأطوال الموجية لكل سنتيمتر.

• يتناسب طرديًا مع التردد والطاقة.

ELECTROMAGNETIC RADIATION

Photon Energy

- According to the Planck–Einstein equation:

$$E = h\nu$$

where:

- **E** = photon energy
- **h** = Planck's constant = **6.626×10^{-34} J·s**
- **ν** = frequency

طبعا ركزوا انه هون wave number

- **Higher frequency (or wave number) → Higher energy**

لانه لو كان يحكي لنا عن ال wavelength فكل ما قل ال wavelength كل ما زادت الطاقه

• وفقًا لمعادلة بلانك-أينشتاين: $E=h\nu$ حيث:

تردد أعلى (أو عدد موجي) ← طاقة أعلى

ELECTROMAGNETIC SPECTRUM

- Classified according to **wavelength** or **wave number**.
- As wavelength decreases:
  - Frequency increases.
  - Photon energy increases.

• تُصنف حسب الطول الموجي أو العدد الموجي.

• مع انخفاض الطول الموجي:
• يزداد التردد.
• تزداد طاقة الفوتون.

Interaction of Electromagnetic Radiation with Matter

Importance in Spectroscopy

- Interaction of electromagnetic radiation with matter provides information about atomic and molecular structure.

Electric Field Component
Responsible for:

- Transmission
- Reflection
- Refraction
- Absorption
- Emission

الضوء يدخل ويخرج من المركب
تغيير اتجاه الضوء لل اتجاه المعاكس
حكينا عنه وهو الانكسار بشكل عام انه يدخل بزاويه ويخرج بزاويه اخرى
الالكترون في المدار الاخير يمتص الطاقه الضوئيه ويتحرر لل exciting level وبس يرجع يفقد طاقته على شكل حراره
الالكترون في المدار الاخير يتهيج بسبب اللهب لل exciting level وبعدها بس يرجع يفقد طاقته على شكل اطوال موجيه

❑ These phenomena form the basis of most **spectroscopic techniques**.

Magnetic Field Component
Responsible for:

- Electron Paramagnetic Resonance (EPR)
- Nuclear Magnetic Resonance (NMR)

❑ These techniques probe magnetic properties of electrons and nuclei.

• يوفر تفاعل الإشعاع الكهرومغناطيسي مع المادة معلومات حول التركيب الذري والجزيئي.

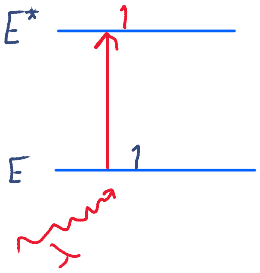
مُركّب المجال الكهربائي مسؤول عن:
النفاذية، الانعكاس، الانكسار، الامتصاص، الانبعاث

تشكل هذه الظواهر أساس معظم تقنيات التحليل الطيفي. مكون المجال المغناطيسي المسؤول عن:
• الرنين المغناطيسي الإلكتروني (EPR)،
الرنين المغناطيسي النووي (NMR)
تستكشف هذه التقنيات الخصائص المغناطيسية للإلكترونات والنوى.

UV–Visible Spectrophotometry

Principle

- UV–Visible spectroscopy measures the absorption of ultraviolet (UV) and visible (Vis) radiation by molecules and ions.
- The absorbed energy corresponds to electronic transitions between molecular energy levels.
- Electronic transitions depend on the electronic bonding within the molecule.
- Spectral region
  - UV: 200–400 nm
  - Visible: 400–700 nm



• يقيس التحليل الطيفي للأشعة فوق البنفسجية والمرئية امتصاص الأشعة فوق البنفسجية (UV) والإشعاع المرئي (Vis) بواسطة الجزيئات والأيونات.

تتوافق الطاقة الممتصة مع الانتقالات الإلكترونية بين مستويات الطاقة الجزيئية.

تعتمد الانتقالات الإلكترونية على الروابط الإلكترونية داخل الجزيء.

النطاق الطيفي: • الأشعة فوق البنفسجية: 200-400 نانومتر، • الضوء المرئي: 400-700 نانومتر

UV–Visible Spectrophotometry

Molecular Orbitals

- Covalent bonds are formed by overlapping atomic orbitals.
- Overlap produces molecular orbitals where bonding electrons are located.

Types of molecular orbitals

- **σ (sigma) orbital**
  - Associated with single covalent bonds.
- **π (pi) orbital**
  - Present in double bonds together with one σ bond.
- **n orbital**
  - Nonbonding electrons (e.g., lone pairs on oxygen or nitrogen).

تتكون الروابط التساهمية من تداخل المدارات الذرية.

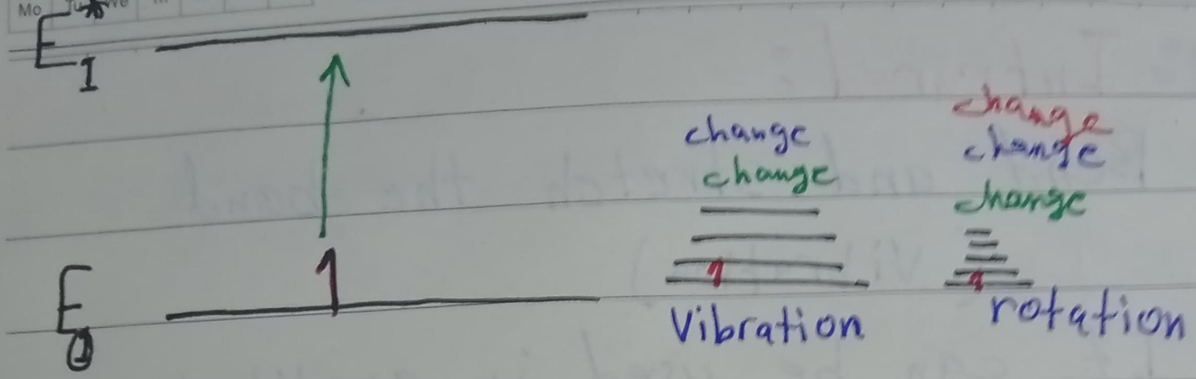
ينتج عن التداخل مدارات جزيئية تتواجد فيها إلكترونات الترابط.

أنواع المدارات الجزيئية: • مدار سيجما (σ) مرتبط بالروابط التساهمية الأحادية.

مدار π (π) • موجود في الروابط الثنائية مع رابطة سيجما واحدة. •

المدار n • إلكترونات غير رابطة (مثل الأزواج الحرة على الأكسجين أو النيتروجين).

SAMSUNG
Memo No.
Date / /
Mo Tu We Th Fr Sa Su



Uv-Visible
من e⁻ ينتقل 2/
ground state
to the next
excited level
change ∆J يحدث
Vibration + rotation

IR
change in
Vibration
+
rotation
only

Microwave
change in
rotation
only

* $E_{absorbed\ tatal} = E_{e^-} + E_{vibration} + E_{rotation}$

مكرر

UV–Visible Spectrophotometry

Molecular Orbitals

- Covalent bonds are formed by overlapping atomic orbitals.
- Overlap produces molecular orbitals where bonding electrons are located.

Types of molecular orbitals

- **σ (sigma) orbital**
  - Associated with single covalent bonds.
- **π (pi) orbital**
  - Present in double bonds together with one σ bond.
- **n orbital**
  - Nonbonding electrons (e.g., lone pairs on oxygen or nitrogen).

UV–Visible Spectrophotometry

Electronic Transitions in UV–Visible Spectroscopy

- When molecules absorb UV or visible light, electrons are promoted to higher-energy **antibonding orbitals (★).**
- Common transitions:
  - σ → σ*
  - n → σ*
  - π → π*
  - n → π*
- (* indicates an antibonding orbital.)

الانتقالات الإلكترونية في مطيافية الأشعة فوق البنفسجية والمرئية

• عندما تمتص الجزيئات الأشعة فوق البنفسجية أو الضوء المرئي، تنتقل الإلكترونات إلى مدارات مضادة للترابط ذات طاقة أعلى (*).
•

هذا مهم جدا

UV–Visible Spectrophotometry

Relative Energies of Electronic Transitions in UV–Visible Spectroscopy

الطاقات النسبية للانتقالات الإلكترونية في مطيافية الأشعة فوق البنفسجية والمرئية

رح احط صورة فيها ترتيب الانتقالات من نواحي مختلفة سواء طول موجي او طاقة او molar absorption

Transition	Relative Energy	Approximate Wavelength
σ → σ*	Highest	100–150 nm (vacuum UV)
n → σ*	High	~190 nm
n → π*	Lower	~280 nm
π → π*	Moderate	200–700 nm

UV–Visible Spectrophotometry

Relative Energies of Electronic Transitions in UV–Visible Spectroscopy – Example - Carbonyl Groups

الطاقات النسبية للانتقالات الإلكترونية في مطيافية الأشعة فوق البنفسجية والمرئية

- Carbonyl oxygen contains **nonbonding (n) electrons**, allowing:
  - n → π*
  - n → σ*
- Example: **Acetone**
  - n → π* : **280 nm**
  - n → σ* : **190 nm**
- For aldehydes and ketones:
  - Absorption around **270–290 nm** is characteristic of the carbonyl group.

يعني حتى المجموعه الوظيفيه نفسها ممكن تختلف وممكن يختلف الانتقال من مركب الى اخر فيها حسب هي بايش مرتبطه ولذلك يختلف الطول الموجي

- مثال - مجموعات الكربونيل. يحتوي أكسجين الكربونيل على إلكترونات غير رابطة (n)، مما يسمح بما يلي:

بالنسبة للالدهايد والكيتون الامتصاص حول 270-290 نانومتر هو سمة مميزة لمجموعة الكربونيل.

* رتب من أعلى طاقة إلى أقل طاقة
ثم من أكبر طول موجي إلى أقل طول موجي
ثم من ناحية ال ε (Probability) .

Energy $\sigma \to \sigma^* > n \to \sigma^* > \pi \to \pi^* > n \to \pi^*$

λ_{max} $n \to \pi^* > \pi \to \pi^* > n \to \sigma^* > \sigma \to \sigma^*$

ε probability $\pi \to \pi^* > n \to \pi^* > n \to \sigma^* > \sigma \to \sigma^*$

ليش ال probability لل $\pi \to \pi^*$ أكبر مع أنه الطاقة اللازمة لها أعلى مقارنة بـ $n \to \pi^*$ ؟

because $n \to \pi^*$ it will transilate to anthor type of orbital so it need permision.
$\pi \to \pi^*$ is the same orbital So it's much easier to ocurre

UV–Visible Spectrophotometry

Relative Energies of Electronic Transitions in UV–Visible Spectroscopy

Chromophores هي المجموعه اللي فيها انتقال

- A chromophore is the part of a molecule responsible for absorbing UV or visible light. يعني اجباري يكون عندي double bond
- Examples
  - Carbonyl (C=O)
  - Double bonds (C=C) كلهم فيهم double bond يعني فيهم انتقال
  - Aromatic rings
  - Conjugated systems
- Most UV applications involve transitions of
  - $n \rightarrow \pi^*$
  - $\pi \rightarrow \pi^*$

  بس طبعا ما في شيء ثابت كله بيختلف من مركب الى مركب — حتى الاغلب ب
- because they occur in the convenient range of 200–700 nm.

الكروموفور هو جزء من الجزيء المسؤول عن امتصاص الأشعة فوق البنفسجية أو الضوء المرئي.

أمثلة:
- الكربونيل (C=O)
- الروابط المزدوجة (C=C)
- الحلقات العطرية
- الأنظمة المترافقة

- تتضمن معظم تطبيقات الأشعة فوق البنفسجية انتقالات

لأنها تحدث في النطاق المناسب من 200 إلى 700 نانومتر.

UV–Visible Spectrophotometry

Beer–Lambert Law

$$A = -\log T = \log (I_0/I) = \varepsilon b c$$

where

هسا ال T لحالها تساوي الخارج على الداخل ولكن عشان شلنا اشاره السالب من اللوغاريتم فصار الداخل على الخارج

A = absorbance

T = transmittance

$\mathbf{I_o}$ = incident light intensity

I = transmitted light intensity

$\boldsymbol{\varepsilon}$ = molar absorptivity — هاي القيمه بتعبر عن مدى تكرار الانتقال يعني في انتقالات ممكن تكرر كثير فمعناها انه ال intensity of light عالية واذا تكرر الانتقال كثير معناها انه امتص الضوء عند هذا الطول الموجي المعين بشكل كبير جدا

b = path length (cm)

c = concentration (mol/L) — عادة بكون ثابت واللي هو واحد سم بس طبعا حسب السؤال ممكن يتغير عادي

UV–Visible Spectrophotometry

Beer–Lambert Law

Molar Absorptivity (ε)

- Characteristic constant for each absorbing species.
- Depends on:
  - Molecule
  - Solvent
  - Temperature
  - Wavelength
- Large ε values indicate strong absorption.
- Highly conjugated molecules generally possess high molar absorptivity.
- Examples include
  - Aromatic compounds
  - Conjugated dienes
  - α,β-unsaturated carbonyl compounds

ثابت مميز لكل نوع ماص. يعتمد على:
• الجزيء، المذيب، درجة الحرارة • الطول الموجي

conjugated كل ما زادت عدد
double bond رح تزيد
molar الامتصاص وراح يزيد ال
absorptivity

تشير قيم ε الكبيرة إلى امتصاص قوي.

تمتلك الجزيئات المترافقة بشكل عام
معامل امتصاص مولي عال.
تشمل الأمثلة:
• المركبات العطرية،
ثنائيات الألكين المترافقة
• مركبات الكربونيل غير المشبعة α،β

UV–Visible Spectrophotometry

مكرر

Beer–Lambert Law

Molar Absorptivity (ε)

- Characteristic constant for each absorbing species.
- Depends on:
  - Molecule
  - Solvent
  - Temperature
  - Wavelength
- Large ε values indicate strong absorption.
- Highly conjugated molecules generally possess high molar absorptivity.
- Examples include
  - Aromatic compounds
  - Conjugated dienes
  - α,β-unsaturated carbonyl compounds

هون ما بصير عندي انتقال للالكترون بس رح يصير في عندي اهتزازات ومن هذه الاهتزازات بقدر احدد انواع الروابط الموجوده في مركب معين

Infrared (IR) Spectroscopy

- Infrared (IR) spectroscopy studies the interaction of infrared radiation with molecular vibrations and rotations.
- It analyzes the stretching and bending of chemical bonds within molecules.
- The resulting spectrum provides valuable information about molecular structure and functional groups.
- Commercial IR spectrometers typically operate in the:
  - Wavelength: 2.5–50 µm
  - Wavenumber: 4000–200 cm^{-1}
- The frequency of IR absorption depends on:
  - Atomic masses
  - Bond strength
  - Molecular symmetry

تدرس مطيافية الأشعة تحت الحمراء (IR) تفاعل الأشعة تحت الحمراء مع الاهتزازات والدورانات الجزيئية.

تحلل مطيافية الأشعة تحت الحمراء تمدد وانحناء الروابط الكيميائية داخل الجزيئات.

• يوفر الطيف الناتج معلومات قيمة حول التركيب الجزيئي والمجموعات الوظيفية.

شروط عشان استخدم ال IR بالتحليل عندي شرطين:
1- covalent bond
2- polarity is not zero

تعمل أجهزة مطياف الأشعة تحت الحمراء التجارية عادةً في:
• الطول الموجي: 2.5-50 ميكرومتر، العدد الموجي: 4000-200 سم-1

• يعتمد تردد امتصاص الأشعة تحت الحمراء على: • الكتل الذرية • قوة الرابطة • التناظر الجزيئي

Infrared (IR) Spectroscopy

- Infrared absorption occurs only when a molecular vibration or rotation causes a change in the permanent dipole moment.
- Therefore:
  - Vibrations that change dipole moment → **IR active**
  - Vibrations that do not change dipole moment → **IR inactive**

• يحدث امتصاص الأشعة تحت الحمراء فقط عندما يتسبب اهتزاز أو دوران جزيئي في تغيير في عزم ثنائي القطب الدائم.

لذلك:
• الاهتزازات التي تغير عزم ثنائي القطب ← نشطة في الأشعة تحت الحمراء

• الاهتزازات التي لا تغير عزم ثنائي القطب ← غير نشطة في الأشعة تحت الحمراء.

Infrared (IR) Spectroscopy

Types of Molecular Vibrations

4000-1500cm^-1

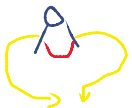
- **Stretching vibrations**
  - Symmetric stretching
  - Asymmetric stretching

الاثنين يشدوا بنفس الاتجاه فمثلا الاثنين يطولوا او الاثنين يقصروا

كل واحد يشد باتجاه مختلف فمثلا واحد يطول والثاني يقصر

1500- وما دون

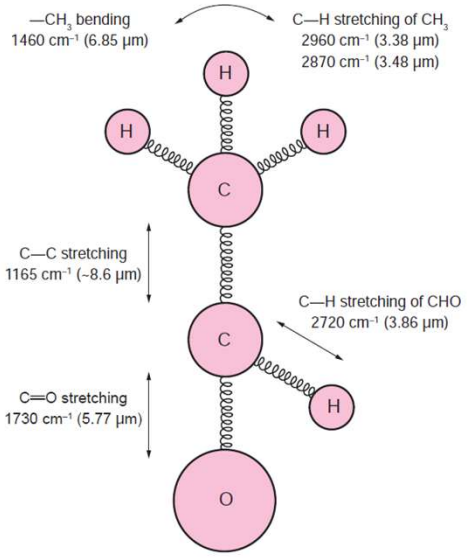
- **Bending vibrations**
  - Scissoring → يا بتزيد الزاويه يا تقصر فقط
  - Rocking → بتحركوا الاثنين يمين او يسار
  - Wagging → بتحركوا الاثنين ، يا الاثنين فوق يا الاثنين تحت
  - Twisting → بتحركوا الاثنين عكس بعض فوقوا تحت يعني واحد فوق والثاني تحت



هذول المقصودين بالحركه بال bending

- Different vibration modes absorb at characteristic infrared frequencies.

< تمتص أنماط الاهتزاز المختلفة عند ترددات الأشعة تحت الحمراء المميزة.



Bending and stretching frequencies for acetaldehyde.

Infrared (IR) Spectroscopy

- Infrared absorption frequencies correspond to specific molecular vibrations.

Example:

- Carbonyl (C=O) stretching
  - Approximately **1660 cm^{-1}** in theophylline

➢ Characteristic absorption bands allow identification of functional groups.

- Besides the fundamental absorption bands **[illegible] bands** may occur. (Overtone)
- Overtones appear at approximately **multiples of the fundamental frequency**.
- Example:
- Carbonyl stretching:
  - Fundamental = **1730 cm^{-1}**
  - Overtone ≈ **3460 cm^{-1}**

• تتوافق ترددات امتصاص الأشعة تحت الحمراء مع اهتزازات جزيئية محددة.

<تسمح نطاقات الامتصاص المميزة بتحديد المجموعات الوظيفية.

• بالإضافة إلى نطاقات الامتصاص الأساسية، قد تظهر نطاقات النغمات التوافقية.

تظهر النغمات التوافقية عند مضاعفات التردد الأساسي تقريبًا.

عشان هيك اذا صار ال Overtone رح يعطيني قراءه مختلفه تماما عن القراءه الاصليه

الفكره من ال Overtone هي انه ممكن بس يصير عندي vibration وينقل لمستوى عالي وبس يرجع الالكترون رح يوزع الطاقه اللي اخذها على الكترونات اخرى بطرق مختلفه وبالتالي رح تتكرر عندي bands مسببة ال overtone (التي لا تؤخذ بعين الاعتبار)

Infrared Fingerprint

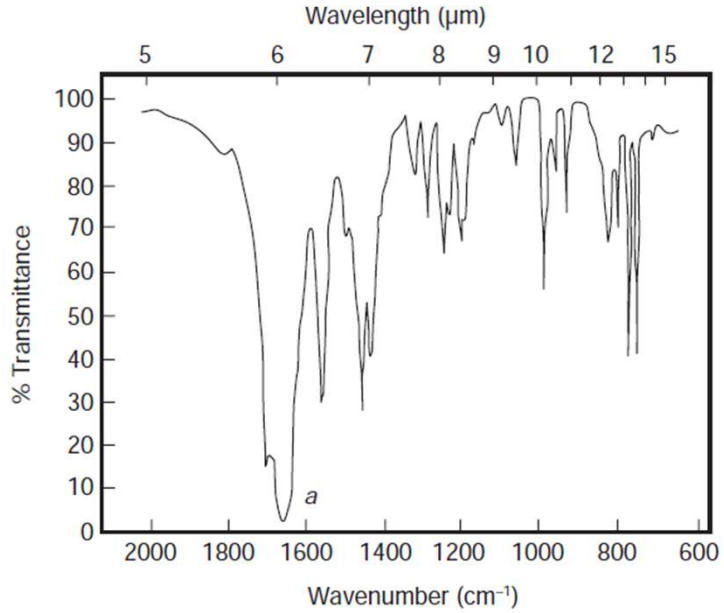
- Vibrational frequencies are characteristic of specific bonds.
- The complete IR spectrum is unique for each compound.
- IR spectra therefore serve as molecular fingerprints.
- Applications:
  - Drug identification
  - Compound verification
  - Structural characterization

تُعدّ الترددات الاهتزازية سمة مميزة لروابط محددة.

• يُعدّ طيف الأشعة تحت الحمراء الكامل فريدًا لكل مركب.

لذلك، تُستخدم أطياف الأشعة تحت الحمراء كبصمات جزيئية.

التطبيقات:
- تحديد الأدوية -
التحقق من المركبات -
توصيف البنية



Infrared spectrum of theophylline

Factors Influencing Absorption Bands

Infrared spectra may vary with:

- Hydrogen bonding
- Concentration
- Steric effects
- Neighboring functional groups
- Phase changes (e.g. solid state changes)

Example:

- Alcohol O–H stretching
- Weak hydrogen bonding:
  - Around **3600 cm^{-1}**
- Increased hydrogen bonding:
  - Band position and shape change

قد تختلف أطياف الأشعة تحت الحمراء باختلاف:
• الروابط الهيدروجينية
• التركيز
• التأثيرات الفراغية
• المجموعات الوظيفية المجاورة
• تغيرات الحالة (مثل تغيرات الحالة الصلبة)

مثال: • تمدد الرابطة O-H في الكحول
• روابط هيدروجينية ضعيفة: حوالي 3600 سم-1

زيادة الروابط الهيدروجينية:
• تغير موضع وشكل الحزمة

Infrared (IR) Spectroscopy

Applications in Pharmacy

Infrared spectroscopy is widely used for:

- Drug identification
- Compound verification
- Qualitative analysis
- Quantitative analysis
- Characterization of pharmaceutical compounds

mainly qualitative هو نادرة لانه هاي

تُستخدم مطيافية الأشعة تحت الحمراء على نطاق واسع من أجل:

- تحديد الأدوية
- التحقق من المركبات
- التحليل النوعي
- التحليل الكمي
- توصيف المركبات الصيدلانية