Near-Infrared Spectroscopy

- Near-infrared (**NIR**) spectroscopy is increasingly valuable for **pharmaceutical analysis**.
- NIR region:
- 10,000–4,000 cm^{-1} NIR spectra arise mainly from:
  - **Overtones**
  - **Combination bands**
- These originate primarily from stretching vibrations involving:
  - O–H
  - C–H
  - N–H bonds

NIR is therefore particularly useful for analyzing:
- Water
- Alcohols
- Amines

• يُعدّ التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء القريبة (NIR) ذا قيمة متزايدة في التحليل الصيدلاني. •

نطاق الأشعة تحت الحمراء القريبة: 10000-4000 سم-1 تنشأ أطياف الأشعة تحت الحمراء القريبة بشكل رئيسي من:
• النغمات التوافقية
• نطاقات الاقتران

تنشأ هذه في المقام الأول من اهتزازات التمدد التي تشمل:

لذلك، فإن الأشعة تحت الحمراء القريبة مفيدة بشكل خاص لتحليل: الماء • الكحولات •الأمينات

الكترونين ينتقلوا ل extra بسبب exciting levels الطاقه الزائده بس يرجعوا ويحرروا الطاقه بنفس الوقت رح يعطوها الالكترون ثالث هذا بسميه combination

Near-Infrared Spectroscopy

- **Why Use NIR?** advantages
- **Very rapid analysis**
- **Nondestructive** يعني بقدر استرجع العينه
- Little or **no sample preparation** خطوات تحضير قليله ومرات ما في داعي للتحضير
- Provides:
  - Qualitative information
  - Quantitative information
- Allows **multicomponent analysis**

يعني بقدر احلل mixtures

لماذا نستخدم الأشعة تحت الحمراء القريبة؟
• تحليل سريع جدًا
• غير مُتلف
تحضير بسيط أو معدوم للعينة
• يوفر:
معلومات نوعية
• معلومات كمية

يسمح بتحليل متعدد المكونات

Near-Infrared Spectroscopy

- **Applications of NIR**
- NIR spectroscopy can be used for:
  - Polymorph identification بقدر افرقهم عن بعض
  - Water content determination بقدر احدد وجود ال water بسبب الرابطه المميزه ما بين ال o&H
  - Identification of active pharmaceutical ingredients (APIs)
  - Monitoring API content within:
    - Tablets
    - Other solid dosage forms

• تطبيقات الأشعة تحت الحمراء القريبة
يمكن استخدام مطيافية الأشعة تحت الحمراء القريبة في:
• تحديد الأشكال البلورية المتعددة
• تحديد محتوى الماء
• تحديد المكونات الصيدلانية الفعالة
• مراقبة محتوى المكونات الصيدلانية الفعالة في:
• الأقراص
أشكال الجرعات الصلبة الأخرى

Near-Infrared Spectroscopy

مقارنه مهمه بين ال mid and near

Feature	Mid-IR	Near-IR
Region	~4000–400 cm^{-1}	10,000–4000 cm^{-1}
Main bands	Fundamental vibrations	Overtones & combinations
Band intensity	Stronger	Weaker
Sample preparation	May be required	Often minimal/none
Analysis	Qualitative & quantitative	Qualitative & quantitative
Process monitoring	Possible	Particularly advantageous

معناها مفيد بشكل خاص يعني لها فائده لنواحي معينه من التحليل

OPTICAL ROTATION

Plane-Polarized Light

- Ordinary light contains waves with **randomly distributed orientations**.
- A **polarizing prism**, such as a Nicol prism, selectively transmits vibrations occurring in a **single plane**.
- **Result:**
- Ordinary light → Polarizer → **Plane-polarized light**

الضوء الطبيعي بكون بمستويات مختلفه واتجاهات مختلفه ومتغيره وعشوائيه فعشان هيك انا بستخدم اللي polarizing prism بيخليلي الضوء بمستوى واحد فقط عشان استعمله في التحليل

يحتوي الضوء العادي على موجات ذات اتجاهات موزعة عشوائياً.

يقوم الموشور المستقطب، مثل موشور نيكول، بنقل الاهتزازات التي تحدث في مستوى واحد بشكل انتقائي.

• النتيجة:
الضوء العادي ← مستقطب ← ضوء مستقطب مستوياً

OPTICAL ROTATION

Plane-Polarized Light Interaction with Optically Active Substances

- Plane-polarized light can be rotated when it passes through an **optically active substance**.
- The interaction of polarized radiation with molecular electrons produces **electronic polarization**.
- This interaction alters the electric field and rotates the direction of vibration of the radiation.
- **Optical Activity**
  - **Chiral molecules** → optically active
  - **Achiral/symmetric molecules** → optically inactive

يعني عشان احكي عن مركب لازم يكون optically active نتيجه هذا التفاعل اللي Chiral هو الضوء بمستوى واحد مع هاي الماده النشطه بصريا راح يعمل لي استقطاب للالكترونات وبالتالي رح يعمل لي دوران اتجاه الاهتزازات بالاضافه الى تغيير المجال الكهربائي

تفاعل الضوء المستقطب مستوياً مع المواد النشطة بصرياً

يمكن تدوير الضوء المستقطب عند مروره عبر مادة نشطة بصريًا.

ينتج عن تفاعل الإشعاع المستقطب مع الإلكترونات الجزيئية استقطاب إلكتروني.

يغير هذا التفاعل المجال الكهربائي ويدير اتجاه اهتزاز الإشعاع.

النشاط البصري
الجزيئات الكيرالية ← نشطة بصرياً
الجزيئات غير الكيرالية/المتماثلة ← غير نشطة بصرياً

OPTICAL ROTATION

Direction of Optical Rotation

- **Dextrorotatory (+)**
- Rotates the plane of polarized light **clockwise**.
- Angle of rotation, **α**, is positive.
- **Levorotatory (–)**
- Rotates the plane of polarized light **counterclockwise**.
- Angle of rotation, **α**, is negative.
  - **Important:** The +/– designation describes the **direction of optical rotation** and does not by itself indicate the absolute configuration of a molecule.

هذا الدوران اللي حكينا عنه ممكن يكون بجهه اليمين (مع عقارب الساعه) او اليسار (عكس عقارب الساعه)

اتجاه الدوران البصري:
يميني (+)
• يدور مستوى الضوء المستقطب باتجاه عقارب الساعة. زاوية الدوران، θ، موجبة.

يساري (-)
يُدير مستوى الضوء المستقطب عكس اتجاه عقارب الساعة. زاوية الدوران، α، سالبة.

هام: يُشير الرمز +/- إلى اتجاه الدوران البصري، ولا يُحدد بحد ذاته التكوين المطلق للجزيء.

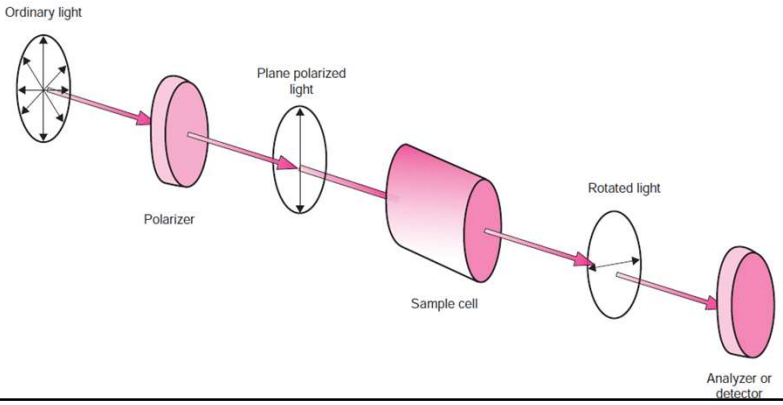
هذا الدوران بس بيعطيني اتجاه الدوران البصري له ولكن ما بنقدر نعرف التركيب تبع المركب بالضبط والروابط اللي شكلها بالضبط من خلاله

OPTICAL ROTATION

Measuring Optical Rotation

Polarimeter

- A **polarimeter** is used to measure optical activity.
- The instrument measures the **angle of rotation (α)** produced by the sample.



قياس الدوران البصري باستخدام جهاز الاستقطاب

يُستخدم جهاز الاستقطاب لقياس النشاط البصري.

يقيس الجهاز زاوية الدوران (α) الناتجة عن العينة.

OPTICAL ROTATION

Dependence on Amount of Optically Active Substance

- Each molecule contributes a small amount to the total rotation.
- Therefore, optical rotation **α depends on the density/concentration** of the optically active substance.
- The observed rotation also depends on the **length of the optical path**.

Specific Rotation

- Specific rotation is a characteristic property of a pure optically active substance under specified conditions:

$$[\alpha]_{\lambda}^{t} = \frac{\alpha V}{lg}$$

α = observed optical rotation
V = volume of solution (mL)
l = path length (dm)
g = mass of optically active substance (g)
t = temperature
λ = wavelength

اعتماد الدوران البصري على كمية المادة الفعالة بصريًا

• تساهم كل جزيئة بمقدار صغير في الدوران الكلي.

لذلك، يعتمد الدوران البصري α على كثافة/تركيز المادة النشطة بصريًا.

كما يعتمد الدوران المرصود على طول المسار البصري.

الدوران النوعي
الدوران النوعي هو خاصية مميزة لمادة نقية نشطة بصريًا في ظل ظروف محددة:

نفس القانون اللي اخذناه بلاب التحليل
الفكره بس انه عوض ال concentration عشان يطلع هذا القانون بهذا الشكل وركزوا على الوحدات

الطول الموجي والحراره مش للحساب ولكن بس لتوضيح انه تم قياسه على هذا الطول الموجي وعلى هذه الحراره لانه باختلافهم ممكن تختلف القيمه

OPTICAL ROTATION

Reporting Specific Rotation

- Conditions Must Be Specified
- Specific rotation should be reported together with:
  - **Temperature**
  - **Wavelength**
  - **Concentration**
  - **Solvent**
- For example:
  - $[\alpha]_D^t$: The subscript **D** indicates measurement using the 589-nm sodium D line.

Why are conditions important?

- Specific rotation can vary with experimental conditions; therefore, values without temperature, concentration, or solvent information should be interpreted cautiously.

الإبلاغ عن الدوران النوعي

• يجب تحديد الظروف

يجب الإبلاغ عن الدوران النوعي مع: درجة الحرارة، الطول الموجي، التركيز ، المذيب.

على سبيل المثال:
[a]t: إلى القياس D يشير الرمز السفلي
بطول موجي D باستخدام خط الصوديوم نانومتر589 .

لماذا تُعد الظروف مهمة؟
يمكن أن يختلف الدوران النوعي باختلاف الظروف التجريبية، لذلك، يجب تفسير القيم التي لا تحتوي على معلومات عن درجة الحرارة أو التركيز أو المذيب بحذر.

بقول لك انه لازم احدد هاي العوامل لانه ب اختلاف هذه العوامل ممكن تختلف القيمه

OPTICAL ROTATION

Pharmaceutical Applications of Optical Rotation

- Specific rotation can be used for:
  - Identification of optically active compounds
  - Confirmation of the identity of synthesized compounds
  - Assessment of purity
  - Characterization of:
    - Steroids
    - Carbohydrates
    - Amino acids
    - Other biologically important compounds

Key concept:

- Specific rotation provides information related to molecular structure.

التطبيقات الصيدلانية للدوران البصري

يمكن استخدام الدوران النوعي من أجل:
• تحديد المركبات النشطة بصريًا
تأكيد هوية المركبات المصنعة
• تقييم النقاء.
توصيف:
• الستيرويدات • الكربوهيدرات
• الأحماض الأمينية ،• مركبات أخرى ذات أهمية بيولوجية.

المفهوم الأساسي:
يوفر الدوران النوعي معلومات تتعلق بالبنية الجزيئية.