لجان الدفعات

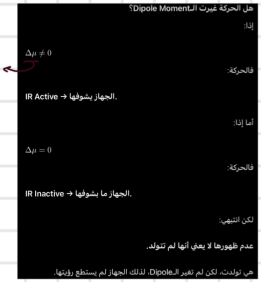
PHARMACEUTICAL ANALYSIS

MORPHINE ACADEMY

By:Dana AlHroub

إذا سقطت أشعة IR على molecule فيها Covalent bonds، فإن الـvibrational motions تتولد.وهذا الكلام بغض النظر عن كون الحركة بالنهاية:
IR Active أو IR Inactive.
يعني عندنا مرحلتين منفصلتين، ولازم ما نخلط بينهم.

يعني الحركات تتولد ما دام سقطت IR على covalent
هذا السؤال الأهم هل الجهاز بشوف جميع الحركات؟
بنسأل



dipole الـ ما دام

إذا جاك سؤال وقال لك "احسبلي كم حركة Theoretically"، ما إلك دخل إذا المركب Active أو مش Active.
يعني لو السؤال قال:
Calculate the theoretical/expected number of vibrational modes
مباشرة تحددي:
Linear ولا Nonlinear
لـ $3N-5$ ولا $3N-6$

هاي دخل بالـdipole
كثير من الطلاب قاعد يقع في هاي المشكلة.
الطالب يشوف molecule غير فعالة بالـIR، فيفكر إنه عدد حركاتها النظري صفر.
والدكتور قال إن هذا غلط.
لأنه السؤال لما يطلب:
Theoretical number of vibrations
هو يسأل:كم حركة تتولد/متوقعة نظريًا؟
وليس:كم حركة سيشاهدها جهاز الـIR

• Theoretical vibrations هي كل الحركات المتوقع ان تتولد
بحسبها من $3N-5$ / $3N-6$

• Observed/pratical vibration هي الحركات اللي الـ IR قدر يشوفها
بعتمد الـ dipole تغير او لا

• مادخله بالـ dipole

لو عندي molecule وحسبت بالقانون وطلع:
9\ Vibrational\ Modes
هذا يعني:نظريًا عندي 9 حركات.
حتى لو بسبب الـSymmetry ما ظهر منهم شيء عمليًا، ما بغير جوابي للسؤال النظري.
يعني ممكن يكون:
Theoretical = 9
لكن:
عمليًا أقل بكثير، أو حتى لا تظهر الحركات المطلوبة Observed.
وهذا بالضبط اللي رح يبدأ الدكتور يطبقه بعد شوي على أمثلة مثل CS_2 وCCl_4

امثلة

CS_2 كم حركة متوقعة؟
لازم اتذكر انها linear حتى يجي $3N-5$
بالامتحان هي بيك الـ $O=C=O$ CO_2
$4 = 3N-5$ ← linear ← $S=C=S$
1c, 2s
4 Theoretical vibrational modes

CCl_4
5 ← $3N-6$ ← nonlinear
$= 9$
الـ CCl_4 ← متماثل والحجم موزع بالتساوي حول الـ C لذلك بيتعدم كمثال على فكرة الـ symmetry وعدم وجود dipole
لكن هاد اللي حالك دخل بحركي نظريتي عنا

H_2CO
$3N-6$ ← nonlinear
6

H_2 ← $H-H$ ← linear
$3N-5 = 1$
هو مطلوب بغرف اكثر من هيك
Bending او Stretching

H_2O ← Bent
$3N-6$ ← nonlinear
3

فعليًا إحنا شفنا للماء
1. Symmetric Stretching
2. Asymmetric Stretching
3. Bending
فالنظري أعطانا:{3}
وفي حالة الماء، قال إن النظري والعملي تطابقوا.

إحنا حسبنا Theoretical number of vibrations، لكن لما نروح فعليًا على جهاز الـIR، هل لازم عدد الـpeaks اللي نشوفها يساوي

لا مش بالضرورة

بحالة الـH_2O تطابق النظري مع العملي لكن مثلاً بحالات الـCO_2

نظري 4 حركات / عملي 2 → مودل الحركات رح تظهر بالـIR

ليه؟

الحركة تتولد، لكن حتى أشوفها لازم تعمل change in dipole moment.

أعاد مثال Symmetric Stretching في CO_2.

هما الطرفان يتحركان بطريقة متماثلة، اليمين يكافئ اليسار، وبالتالي ما بصير تغير المطلوب في الـDipole.

إذن الحركة:

موجودة نظريًا وتولدت، لكن لا تظهر كـIR-active vibration.

وهذا أحد الأسباب اللي تجعل:

Practical < Theoretical

تصنيف الـIntensity

الدكتور أشار إلى أن الـpeaks ممكن نصنفها حسب شدتها إلى:

* Strong (S)
* Medium (M)
* Weak (W)

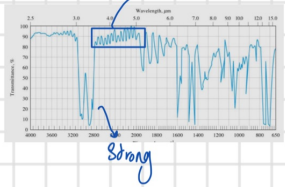
وقال عن الـWeak:هي موجودة.يعني لا تفهمي إنه ما حصل vibration.

بالعكس:الحركة موجودة، وتولدت، وحتى أعطت absorption.

لكن:Intensity\ منخفضة

فممكن ما تدخل بالحساب العملي أو تُهمل أثناء تفسير الطيف

تُهمل عمليًا



هسا ممكن يكون عندي

Practical < Theoretical

ليه العملي اقل من النظري؟

السبب الأول: Symmetry

هذا أول سبب:

إذا كان عندي molecule فيها Symmetry عالية، بعض الـvibrations لا تغير الـDipole Moment.

وبالتالي:

الحركة محسوبة نظريًا ✓

الحركة تتولد ✓

لكن الجهاز لا يراها ✗

فنقل الـobserved peaks.

نوع مثل CH_4

السبب الثاني: Same Energy / تراكب الحركات فوق بعضها

هذا السبب مختلف تمامًا:

هون ممكن تكون الحركات:

- تتولدت ✓
- وتغيرت Dipole ✓
- والجهاز يستطيع رؤيتها ✓

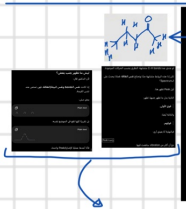
ومع ذلك عدد الـpeaks الظاهر أقل!

ليش؟

لأن أكثر من vibration ممكن يكون لها:

نفس الطاقة.

فتظهر فوق بعضها.



نظريًا ممكن أكون حسبت عدة حركات.لكن عمليًا تراكبت الحركات المتساوية بالطاقة.فأصبح:
{Observed<Theoretical}
وهذا السبب متعلق بـ:
{Same energy / overlapping (degenerate) vibrations}}

السبب الثالث: Weak Intensity

بعدها قال في سبب ثالث.

ممكن الحركة:

- تتولد ✓
- وتغير الـDipole ✓
- ويظهر إلها absorption ✓

لكن الـPeak تكون:

Weak

ضعيفة جدًا.

فأثناء تحليل الـSpectrum: ممكن نهملها.

وربطها الدكتور بالتركيز

ذكر أيضًا أن انخفاض Concentration للمركب في العينة يمكن أن يجعل الـabsorption ضعيفًا.

يعني إذا كانت الإشارة أصلًا ضعيفة ومعي كمية/تركيز قليل، قد تصبح الـPeak صغيرة جدًا.

فقال عن Peak صغيرة كان يشير لها:

هاي موجودة... بس بالحسابات تعتبر ضعيفة ونهملها.

إذن مرة أخرى:

نظريًا محسوبة ✓

لكن عمليًا:

فنكون النتيجة:

قد لا تعرفها

Practical < Theoretical

Practical > Theoretical

ليه النظري اقل من العملي؟

عندنا 3 أسباب

Difference band • Combination band • Overtone •

بس بدنا نذكركم بشغلات

1. أولًا: إحنا بالـIR بنتعامل مع Vibrational Levels

الدكتور رجع ذكّرنا إن الطاقة اللي تعطيها في الـIR ليست مثل الطاقة اللازمة للـElectronic transition.

يعني هنا نتعامل مع:

$v_0, v_1, v_2, v_3, \ldots$

وهاي:

Vibrational levels

وليست Electronic levels.

وأشار تقريبًا لرسم بالشكل:

Plain text

v_3
v_2
v_1
v_0

والانتقال الطبيعي اللي إحنا متوقعينه يكون من:

$v_0 \rightarrow v_1$

هاد الانتقال الطبيعي اسمه Fundamental

انتقال أساسي أو طبيعي

وهاد المتوقع بالحساب النظري

يعني أعطيته الطاقة المناسبة ← انتقل للـnext

لكن مستويات الـVibration قريبة من بعضها هون الدكتور وضح ليش أصلًا ممكن تظهر أشياء إضافية.
قال إن الـVibrational levels قريبة نسبيًا من بعضها.
والـIR عنده range من الطاقات.
وذكر أثناء الشرح نطاقًا واسعًا تقريبًا من: $4000 \rightarrow 200\ cm^{-1}$

جهازنا: 400

وقال إن الأجهزة كلما تطورت وأصبحت تستطيع الوصول إلى طاقات أقل، يصير التحليل أفضل، خصوصًا لأن المنطقة المنخفضة مهمة في Fingerprint region

يعني المقصود

المفروض
$v_0 \rightarrow v_1$
لكن احيانًا الطاقة المتصة
تسمح بانتقال الى مستوى اعلى
$v_0 \rightarrow v_2$
بدل ما يوقف على v_1
هاد
احنا
Overtone

ليش الـOvertone مهم إلنا؟
لأنه يولد لي Band إضافية ما كنت حاسبها بالطريقة النظرية البسيطة.
يعني بدل ما أشوف فقط الـFundamental band، صار ممكن أشوف معها Band ثانية ناتجة عن الـOvertone.
وهذا واحد من الأسباب اللي يخلي:
{Practical>Theoretical}

زي الواحد لما يرفع صوته فوق الطبيعي Overtone.

يعني بدل الانتقال العادي إلى المستوى التالي، صار الانتقال إلى مستوى أعلى.

إذن:

$$v_0 \rightarrow v_1 = Fundamental$$

بينما مثلًا:

$$v_0 \rightarrow v_2 = Overtone$$

وقد يكون الانتقال إلى مستوى أعلى أيضًا.

1ـ Combination Band

ممكن يكون عندي أكثر من انتقال "اهتزاز" وتصير طاقتهم تجمع طاقة انتقالين تجمع

$E_1 + E_2 = E_{combination}$

قال تخيلي عندي انتقالين.
واحد أخذ طاقة مرتبطة بمستوى معين، والثاني أخذ طاقة مرتبطة بمستوى آخر.وعندما ترجع الحالات وتتحرر الطاقة، ممكن تتجمع الطاقتان ويظهر انتقال/امتصاص إضافي مرتبط بمجموعهما.
فبدل ما يكون عندي فقط الـbands الأصلية المتوقعة، ظهر عندي:{Additional band}بسبب جمع

إذن Combination = جمع

هاي أهم طريقة تحفظي فيها كلامه:

$$Combination \Rightarrow Sum$$

يعني بصورة عامة:

$$\nu_{combination} \approx \nu_1 + \nu_2$$

أو بالـWavenumber:

$$\tilde{\nu}_{combination} \approx \tilde{\nu}_1 + \tilde{\nu}_2$$

2ـ difference Band

زي الـcombination لكن بدل جمع الطاقة صيير عندي difference (فرق بين طاقتين)

$\nu_{difference} = |\nu_1 - \nu_2|$

7. ليش Combination وDifferences يخلو العملي أكبر من النظري؟

هاي أهم نقطة.

لنفترض إن الحساب النظري الأساسي متوقع عددًا معينًا من الـfundamental vibrations.

لكن عمليًا صار عندي بالإضافة إليهم:

- Overtone.
- Combination band.
- Difference band.

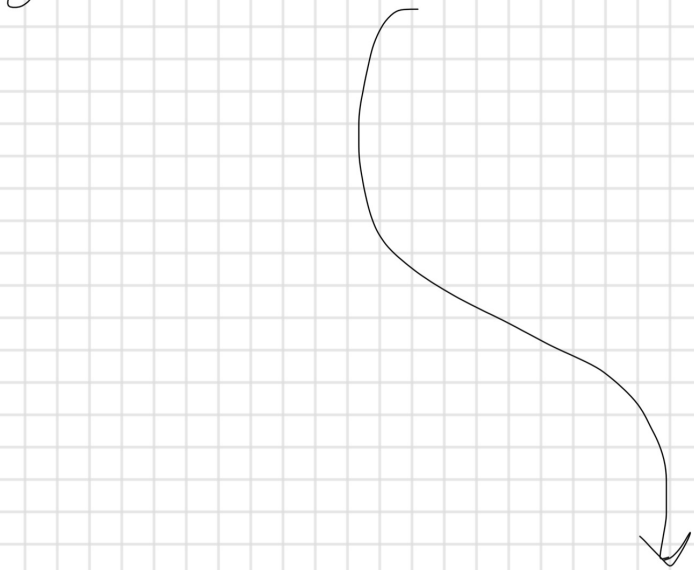
فالجهاز صار يشوف **bands إضافية** لم تكن داخلة بالحساب النظري البسيط.

وبالتالي:

$$Observed/Practical > Theoretical$$

وهذا هو الهدف من كل هذا الجزء.

أسئلت بالمحاضرة صارت لهاد الموضوع



8. الطالب سأله: هل لازم كل الجزيئات تمتص بنفس اللحظة؟

وهون الدكتور وضح نقطة ثانية.

قال:

لا.

مش شرط كل الجزيئات أو كل الحالات تمتص وتتحرك **بنفس اللحظة وبنفس الطريقة تمامًا**.

لأن الموضوع مرتبط أيضًا بالـmolecular structure والوضع الفراغي والطاقات المتاحة.

وقال إنه لو كل شيء حصل بالطريقة الأساسية نفسها تمامًا، ممكن يكون العملي أقرب جدًا للنظري.

وضرب مرة ثانية مثال:

$$H_2O$$

حيث كان:

$$Theoretical = 3$$

والعملي أيضًا أعطى تقريبًا:

$$Practical = 3$$

لكن توجد حالات استثنائية تجعل العدد:

- أقل من النظري.
- أو أعلى من النظري.

9. ماذا يحدث للطاقة عند الرجوع؟

أحد الطلاب رجع سأله عن المعلومة من المحاضرة السابقة:

> مش حكينا إنه لما يرجع، الطاقة تتحول إلى Heat؟

الدكتور قال:

نعم، جزء/حالات من الطاقة عند الـrelaxation والفقد تتحول إلى:

$$Heat$$

وربطها مرة ثانية بمستويات الطاقة والحركات.

وكان الهدف إنه ما تفهموا من الـCombination/Difference إنه قاعدة كل الطاقة دائمًا لازم تعمل انتقال إضافي؛ هو يشرح **الحالات اللي تنتج فيها bands إضافية**.

10. هل الـOvertone بنفس قوة Fundamental؟

لا.

وهذه نقطة الدكتور رجع لها لاحقًا في نفس النقاش.

قال إن الـFundamental transition يتكرر أكثر، ولذلك الـIntensity الخاصة به تكون أعلى.

مثل:

$$v_0 \rightarrow v_1$$

هذا انتقال طبيعي ومتكرر.

فتكون الـband عادة أوضح.

أما الانتقال إلى مستوى أعلى، مثل Overtone، يحتاج حالة/طاقة أعلى ويحدث بتكرار أقل.

لذلك:

$$Overtone\ bands\ usually\ weaker$$

وكان يشرحها بفكرة:

> كل ما تكرر الانتقال أكثر ← الـIntensity أعلى.

أما الانتقال غير المعتاد إلى مستوى أعلى:

> تكراره أقل ← Intensity أقل.

11. لذلك لا نحسب كل Peak صغيرة بنفس الطريقة

أشار الدكتور إلى الـSpectrum وقال إن عندك:

- Strong.
- Medium.
- Weak.

وبعض الـOvertone/Combination/Difference bands قد تكون ضعيفة.

وقال إننا في التحليل نهتم أكثر بالـ**Fundamental bands** الواضحة، وليس كل Peak صغيرة نراها ونبدأ نعتبرها Functional Group جديدة.

وهذه نقطة مهمة جدًا في تفسير الـIR.

ليه الـ peak بتظهر عند wavenumber معين وليه الـ peak اقوى من الـ peak التانية؟

1. العوامل التي تؤثر على موقع الـPeak — Wavenumber على X-axis

اضغط هنا $\bar{\nu} = \frac{1}{2\pi c}\sqrt{\frac{k}{\mu}}$

إذا بدي أعرف ليش رابطة تظهر عند Wavenumber أعلى من رابطة ثانية،
أنظر أساسًا إلى:
* k = Force constant / Bond strength
* μ = Reduced mass
لأن باقي الأشياء بالقانون ثوابت

يعني عندي علاقتين معلومات $\bar{\nu} \propto \sqrt{k}$ طردية

و $\bar{\nu} \propto \frac{1}{\sqrt{\mu}}$ عكسية

عندي C-H مقابل C-C [أول مقارنة]

1.38 اثبت اكبر عدد من الاشياء حتى اعرف سبب الاختلاف

الثابت عندي C و single bond

المتغير C مقابل H

الـ H خفيفة اقل بكثير من C وفق $\bar{\nu} \propto \frac{1}{\sqrt{\mu}}$

$\mu \downarrow \Rightarrow \bar{\nu} \uparrow$ ← lower reduced mass ← $\bar{\nu}_{C-H} > \bar{\nu}_{C-C}$

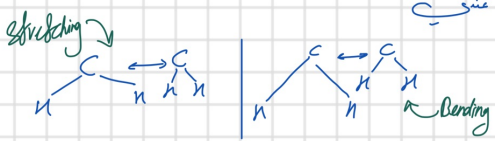
الـ C-H تطلع عند wavenumber اعلى يعني أترتب بجهة اليمين

ثاني مقارنة

ثالث مقارنة

عندي

Stretching



هون ثبتنا الرابطات والذرات اللي المتغير اغرى

احنا بنعرف الـ Stretching يحتاج طاقات اكثر من الـ Bending

حل السؤال

Which one appears at higher wavenumber?

فكري بأي عامل تغير:

إذا تغيرت الكتلة:

$\mu \downarrow \Rightarrow \bar{\nu} \uparrow$

إذا تغيرت قوة الرابطة:

$k \uparrow \Rightarrow \bar{\nu} \uparrow$

إذا تغير نوع الحركة:

Stretching > Bending

والدكتور قال إن أسئلة المقارنة فيها لعب، فلا تحفظي النتيجة لحالها؛ شوفي الثابت وشو المختلف.

ليش عند نفس المنطقة Peak تكون طويلة/قوية، وPeak ثانية تكون قصيرة/ضعيفة؟

هون رح نحكي عن الـ y-axis = Intensity / Transmittance

الدكتور أعطى مقارنة بين مركبين فيهم روابط:
C–H
وقال: افترضوا الـC–H تظهر تقريبًا في نفس المنطقة.
لكن في المركب الأول عندي عدد كبير من روابط C–H المتشابهة.
وفي الثاني عندي عدد أقل.
فليش الأولى تعطي Peak أكبر؟
لأن عدد الروابط اللي تعمل نفس الـvibration وتمتص في نفس المنطقة أكبر
يعني number of similar bonds ↑ ⇒ intensity ↑

الاثنين ممكن يمتصوا تقريبًا عند نفس القيمة الطاقية لأننا نقارن نفس نوع الـbond.لكن الفرق يظهر على Y-axis:
المركب اللي عنده C–H أكثر:
→ Peak أقوى/أكبر.
والمركب اللي عنده C–H أقل:
→ Peak أضعف/أقصر.

هاد المثال A

طب والهيدروجينات الموجودة على Benzene، ليش ما نعدها معهم؟
الدكتور وضح إنه بالمقارنة لازم تكون الروابط:{{Exactly similar}}
يعني ما بصير أقول:
"كلهم C–H وخلاص."لأن الـC–H الموجودة في بيئة مرتبطة بنظام π ليست نفس البيئة تمامًا مثل الـC–H الأليفاتية اللي كان يقارنها.
فهو بده مقارنة بين روابط متشابهة فعلًا.
هاي نقطة مهمة لأنه قال إن اللعب بالمقارنة ممكن يجي منها.

العامل الأول
number of similar Bonds

السؤال وين بتظهر الـ Peak

العامل الثاني ← Electronegativity difference

هيك يعني

C=C C=O

الرابطة بتشابه من حيث ايضا double bond ← [σ + π]

الفرق اللي الـ C=O

اما الـ C=O فالـOxygen أكثر Electronegative من Carbon ← يعني فرق بالشحنة المبرز $C^{\delta+} = O^{\delta-}$

الذرتان Carbon وCarbon، فالـElectronegativity متساوية تقريبًا

قال لو قارنت مثلًا:

$C = O$

مع رابطة لذرة أقل Electronegativity، ننظر إلى فرق الـElectronegativity.

وذكر ترتيبًا أثناء الشرح من ناحية الـElectronegativity مثل:

$O > N > C$

وأشار أيضًا إلى Sulfur، وقال إن Oxygen أعلى Electronegativity من Sulfur؛ لأن Sulfur موجود أسفل Oxygen في الجدول الدوري وحجمه أكبر.

فإذا بقية ظروف المقارنة متشابهة، كلما كان فرق الـElectronegativity أكبر، يكون تغير الـDipole أكبر، وبالتالي:

$Intensity \uparrow$

وبالتالي تغير الـDipole أثناء الاهتزاز يكون أكبر.

والدكتور شرحها بحركة الرابطة:

لما تتمدد C=O ثم ترجع، وجود فرق الـElectronegativity يجعل التغير في القطبية أوضح، فتكون الـvibration أكثر وضوحًا/شدة.

لذلك:

$C = O \text{ gives stronger intensity than } C = C$

توضيح

لما أمط:

$C = O$

يصير عندي فصل أوضح للشحنة:

$C^{\delta+} - O^{\delta-}$

ولما ترجع الرابطة: التغير بالـDipole يكون واضحًا ومتكررًا.

أما:

$C = C$

فعندي Carbon مقابل Carbon.

فالـElectronegativity متقاربة/متساوية، وبالتالي تغير الـDipole أضعف.

فقال إن الـC=C تظهر عادةً:

أقوى Intensity

من C=C.

السؤال هون مديش الـ Peak بتكون قوية

• هون شرح الدكتور عن الـIHD

شو معنى IHD؟ IHD هي **Index of Hydrogen Deficiency**، والدكتور ركز على كلمة **Deficiency** = نقص، يعني إحنا نسأل: هل عندي نقص في عدد الـHydrogens بالنسبة للمركب المشبع؟ ليش هذا مهم؟ لأن الكربون في المركب المشبع يعمل **4 bonds**، فإذا عدد الـHydrogens أقل من العدد المتوقع للمركب المشبع، هذا النقص يعطيني فكرة إنه ممكن يكون عندي **π bond أو Ring**. القانون الذي استخدمه الدكتور في الأمثلة البسيطة اللي كان يشرحها من C وH و O هو: $IHD = \frac{1}{2}(2C + 2 - H)$، يعني $IHD = \frac{2C+2-H}{2}$، حيث C = عدد ذرات Carbon وH = عدد ذرات Hydrogen. أول مثال: مركب Saturated. الدكتور بدأ بمركب مشبع وكان هدفه يوضح: إذا المركب Saturated بالكامل، الـIHD يطلع صفر. مثاله كان C_2H_6، وهو Ethane: $CH_3 - CH_3$. قال: هذا المركب **Saturated**، يعني ما عندي Double bond ولا Triple bond ولا Ring. نطبق القانون: $IHD = \frac{1}{2}(2C + 2 - H)$. عندي $C = 2$ و$H = 6$، إذن: $IHD = \frac{1}{2}[(2 \times 2) + 2 - 6] = \frac{1}{2}(4 + 2 - 6) = \frac{1}{2}(0)$، وبالتالي $IHD = 0$. شو معنى IHD = 0؟ الدكتور قال: $IHD = 0 \Rightarrow Saturated$، يعني ما عندي نقص في الـHydrogen، وبالتالي ما عندي indication لوجود **π bond أو Ring**. وقال بمعنى كلامه: كل Carbon أخذت تشبعها الطبيعي، فما عندي Hydrogen deficiency. المثال الثاني: لو صار عندي Double Bond. بعدها قال: طيب، احذفوا هذا المثال وحطوا $C = C$، يعني بدل C_2H_6 صار عندي C_2H_4، وهو مثل $CH_2 = CH_2$. الآن نحسب: $IHD = \frac{1}{2}[(2 \times 2) + 2 - 4] = \frac{1}{2}(6 - 4) = \frac{1}{2}(2)$، وبالتالي $IHD = 1$. وهون قال: طلع عندي 1، وفي هذا المثال عندي π bond، لأن عندي Double bond: $C = C$، والـDouble bond فيها $\sigma + \pi$، إذن واحدة من درجات عدم الإشباع جاءت من الـπ. لكن انتبهي: IHD = 1 لا يعني بالضرورة Double Bond! وهون أعطى الدكتور المثال الثاني المهم جدًا: **Cyclohexane**، C_6H_{12}. هذا المركب ما عنده Double bond، كل الروابط Single، لكن عنده $Ring$. نحسب الـIHD: $IHD = \frac{1}{2}[(2 \times 6) + 2 - 12] = \frac{1}{2}(12 + 2 - 12) = \frac{1}{2}(2)$، وبالتالي $IHD = 1$. نفس الناتج! لكن هذه المرة ما عندي π bond، عندي $Ring$. إذن شو معنى IHD = 1؟ الدكتور قال: إذا طلع $IHD = 1$، فممكن يكون عندي $One\ Double\ Bond$ أو $One\ Ring$، يعني الـIHD لحاله ما بحدد أي واحدة منهم، هو يعطيني **First impression** عن التركيب. ليش الحلقة تعمل Hydrogen Deficiency؟ هاي الدكتور شرحها، وما اكتفى يقول احفظوا 1 = Ring. قال فكري بالكربون: لو المركب كان Open-chain ومشبع، كل Carbon بدها تكمل أربع روابط، لكن لما أعمل Ring، الكربونات ترتبط ببعض بطريقة تغلق السلسلة، فبالتالي يقل عدد الـHydrogens مقارنةً بالمركب المفتوح المشبع، ولهذا يظهر عندي $Hydrogen\ Deficiency$ حتى لو ما كان عندي Double bond، يعني النقص بالـH ممكن يكون بسبب **π bond** أو بسبب **Ring formation**. هون الدكتور سأل: طيب شو استفدنا من IHD أصلًا؟ وهذه أهم نقطة في آخر المحاضرة. قال إن فائدته تظهر لما يكون عندنا $Unknown\ compound$، يعني إحنا أصلًا ما بنعرف تركيب المركب، وشرح لكم تقريبًا كيف تبدأ عملية التعرف على مركب جديد من الصفر. مثال الدكتور: استخلصنا مادة من نبتة. أعطى سيناريو للتوضيح، قال تقريبًا: افترضوا أخذنا نبتة من مكان معين، عملنا لها extraction، وجربنا الـextract ووجدنا أنه يمتلك $Biological\ activity$، مثلًا قال **Anticancer أو Antifungal**. المهم اكتشفنا إن هذا الـextract فيه مادة فعالة. السؤال: شو هي المادة الفعالة؟ شو تركيبها؟ إحنا ما بنعرف. أول خطوة: **Elemental Analysis**. قال أول تحليل ممكن نعمله للمركب المجهول هو $Elemental\ Analysis$، وهذا يعطيني العناصر الموجودة ونِسَبها، مثل Carbon وHydrogen وOxygen وغيرها. وذكّركم بشيء أخذتوه سابقًا بالكيمياء العامة/التحليلية: من نسب العناصر، نحسب الـmoles، وبعدها نقسم على أقل عدد حتى نطلع $Empirical\ Formula$. مثلًا بالنهاية ممكن يطلع معي شيء من نوع $C_xH_yO_z$. الدكتور قال: بغض النظر عن الأرقام، المهم صار عندي $Empirical\ Formula$. لكن الـEmpirical Formula لحالها ما تعطيني Structure، وهاي النقطة الأساسية. لو عرفت عدد C وH وO، هذا لسه ما قال لي: هل عندي Single bonds فقط؟ Double bond؟ Triple bond؟ Ring؟ يعني ما زلت ما بعرف الوضع البنائي للمركب، وهون يدخل IHD. ثاني خطوة: أحسب IHD من الـFormula. الدكتور قال: قبل حتى ما أروح أفسر الـIR بالكامل، أقدر من الـformula أحسب IHD، وهذا يعطيني **First impression** أو نظرة أولية عن المركب: هل المركب Saturated؟ هل فيه احتمال π bond؟ Ring؟ أكثر من درجة عدم إشباع؟ وهكذا. بعدين بروح للـIR، وهون ربط الثلاث أشياء ببعض: $Elemental\ Analysis \rightarrow Empirical\ Formula \rightarrow IHD \rightarrow IR$، يعني ما بنستخدم IHD بدل الـIR، ولا الـIR بدل IHD، بل واحد يعضّد ويثبت الثاني، وهاي تقريبًا العبارة اللي كان بده يوصلها. مثال كيف IHD والـIR يثبتوا بعض: الدكتور قال افترضوا الـIR spectrum أعطاني Peak قوية تقريبًا في منطقة تشير حسب الجدول إلى $C = O$، يعني $Carbonyl$، لكن أنا عندي كمان الـEmpirical Formula، أحسب منها IHD. إذا أعطاني الـIHD قيمة متوافقة مع وجود عدم إشباع، وبنفس الوقت الـIR أعطاني Peak للـC=O، صار عندي أكثر من دليل يدعم وجود الـCarbonyl. يعني IHD يعطيني احتمال وجود **unsaturation** والـIR يحدد لي نوع **Functional Group** بشكل أوضح. الدكتور ليش سماها First Impression؟ لأن الـIHD ما بيعطيك التركيب النهائي. يعني لو $IHD = 1$، ما بقدر أقول مباشرة: أكيد $C = C$، لأنه ممكن تكون Ring، فهو يعطيني فقط درجة عدم الإشباع، وبعدين الأجهزة والتحاليل الأخرى تساعدني أحدد شو الموجود فعليًا. نقطة مهمة جدًا للعملي: الدكتور قال إنه رجع ذكّركم بالـIHD لأنه **بالامتحان العملي راح تستخدموه كثير**. ممكن يعطيك Formula / Empirical formula وIR spectrum وجدول الـIR، وأنت تبدأ أول شيء تعمل IHD حتى تعرف بشكل أولي شو ممكن يكون موجود، وبعدين تروح للـIR peaks وتربط المعلومات مع بعضها. خلينا نثبت معنى الأرقام اللي شرحها الدكتور: إذا $IHD = 0$ → المركب Saturated حسب الأمثلة التي كان يشرحها. وإذا $IHD = 1$ → ممكن **One double bond** أو **One ring**. والفكرة العامة: كلما ظهر عندي Hydrogen deficiency، أبدأ أفكر بوجود $\pi\ bonds\ and/or\ rings$. أهم شيء: لا تخلطي IHD مع IR Active، هاي فكرتين منفصلتين تمامًا. IHD يخبرني عن $Degree\ of\ unsaturation$، أما IR Active يعتمد على $Change\ in\ Dipole\ Moment$، يعني IHD ما إله علاقة بسؤال: "هل هذه الحركة ستظهر أم لا؟" هو أداة تساعدني أتوقع Structure. تسلسل الدكتور كاملًا في آخر الجزء: إذا عندي مادة Unknown ذات Biological