

Kimyacılar için Bilişim Teknolojileri

Oğuz Akpolat, Fatma Kartal

Muğla Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Kimya Bölümü, 48000 Muğla
oakpolat@mu.edu.tr

Özet: Bu çalışmada kimyanın anorganik kimya, organik kimya, fizikokimya, analitik kimya ve biyokimya gibi temel alanlarında ve bu alanlara ilişkin mühendislik hesaplamalarında uygulamada karşılaşılabilecek bilgi teknolojileri üzerinde durulmuş olup seçilen bazı örnek uygulamalar ile de konular daha ayrıntılı olarak incelenmiştir. Çok geniş bir alanı kapsayan bu uygulamalar temel alanlar çerçevesinde sınıflandırılarak, yazılımlar hem yapısal olarak hem de pratik kullanımları açısından ele alınmıştır.

Anahtar Kelimeler: Bilişim, Tek-Noloji, Kemometri, İstatistik, Model-Leme, Simulasyon, Kimya, Kimyacı.

Information Technologies for Chemists

Abstract: In this work, it was reviewed information technologies encountered on basic areas of chemistry like inorganic chemistry, organic chemistry, physical chemistry, analytical chemistry and biochemistry and on engineering calculations related these areas practically, and studied on some selected applications in detailed. These applications in a wide range were classified on the basic areas and related softwares were studied on their uses both structurally and practically.

Keywords: Information, Technology, Chemometrics, Statistics, Modeling, Simulation, Chemistry, Chemist.

1. Giriş

Son yüzyılda yaşanan endüstri devrimini izleyen bilgi çağı, pek çok bilimin hızla gelişmesini, bilişimle girişimini ve böylece daha çok bilginin daha kısa sürede üretilmesini, teknoloji ile bütünleşmesini, paylaşılmasını ve böylece daha etkin olarak optimum koşullarda değerlendirilmesini sağlamıştır. Bu çerçevede yaşanan bilgi süreçleri bilginin deneysel, kavramsal ve tasarımsal olarak üretilmesi paylaşılması ve teknolojiye aktarılmasıdır [1].

Kimyasal üretim süreçlerine bakıldığında ise, bu alandaki yeni ürünler ve yeni konular da onun yaratıcılığının bir sonucu olup son elli yılda kimyanın yarattığı üretimler yaşamı çevre sararken, yeni konularını da beraberinde yaratmıştır. Bu konular ayrı ayrı adlar

alırken ancak özünde daima kimya olarak kalır. Bu çerçevede ister özgün mekanik ya da elektiriksel özelliklere sahip bu yeni malzemelerin üretilmesine uygulanan kimyanın yoğunlaşacağı alan ister nano teknolojiler olsun, ister biyokimyanın alanına giren ve yaşamı büyük oranda değiştiren biyo teknolojiler olsun, maddenin özellikleri ve dönüşümleriyle uğraşan her şey, o madde ister canlı ister cansız olsun, köken itibarıyla kimyadır. Kimyada ve kimyasal üretim süreçlerinde ise bilişim ve bilişim teknolojilerinin kullanımı daha şimdiden büyük önem taşıyor ve önümüzdeki yıllarda bu önemin hızla artacağı da çok açıktır [2].

Genelde yaşanan bilgi süreçlerinde bilginin üretilmesi sürdürülebilir bir gelişmenin temelini oluştururken özelde kimya alanında da böyle olması kaçınılmazdır. Her adımda üreti-

len ve saklanan bilgi miktarı hız-la artmakta ve bunların değeren-dirilebilmesi de ancak yine bilgi tek-nolojileri ile mümkün olmaktadır. Bu teknolojinin alt yapısını da bilgi-sayar donanımları, yazılım paketleri ve paylaşım ağları oluşturmaktayken bu teknolojilerin verimli kullanımı da eğitimden başlayarak büyük bir önem arz etmekte ve bu konudaki çabalar her geçen gün hızla artmaktadır [1, 3]. Bu çerçevede hazırlanan bu çalışmada kimya ve kimyaya dayalı üretim süreçlerinde yararlı olabilecek bilişim teknolojilerinin bir sınıflandırılması yapılmış olup bun-ların pratik kullanımları ele alınmıştır.

2. Kimya ve Kimyasal Süreçler Açısından Bilişim Teknolojileri

Kimya ve kimyasal işlemlerin yer aldığı süreçlere bakıldığında karşılaşılan temel alanlar koordinasyon kimyasını da kapsayan anorganik kimya ve organik teknolojiler, fiziko-kimya ve nanoteknolojiler, reaksiyon ve katalizör teknolojileri ile nükleer teknolojiler, biyokimya, biyoinformatik ve biyoteknoloji ile analitik kimya ve deneysel ölçüm ve değerlendirme teknolojileri ile analiz laboratuvarlarının bilişim yönetim teknolojileri ve tüm bu teknolojilerin üretim süreçlerine aktarıldığı kimyasal süreçlerinin optimizasyonu ile modellemesinin simülasyonunun, kontrolünün ve tasarımının gerçek-leştirildiği mühendislik çözümleri olarak sınıflandırılabilir [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19].

Bilgi ve bilgi teknolojileri açısından bakıldığında uygulamada karşılaşılabilecek yazılımları aşağıdaki gibi sınıflandırmak mümkündür.

1. Bilgisayar ve bilgisayar ağlarının aktif kullanımına imkan sağlayan Dos, Windows ve Linux gibi işletim sistemleri ile network ağ paylaşım sistemleri ve PC bilgisayar kullanıcıları ile WEB sistemleri için güvenlik yazılımları

2. Ofis, muhasebe ve pazarlama gibi hizmetler için kullanılan İşlemci, Hesap tablosu, Sunum Yazılımı gibi programlar
3. Her türlü yazılımla birlikte de kullanılan ve elde edilen verilerin depolandığı veri tabanları ile verilerin değerlendirildiği veri madenciliğine ilişkin yazılımlar
4. Organik ve anorganik yapıların moleküler boyutta formülize edilip şekillendirildiği ve atomlar ya da moleküller arası reaksiyonların canlandırıldığı simülasyon programları
5. Kimyasal analiz süreçlerinin gerçekleştirildiği laboratuvarlarda analizlerin doğrudan yapıldığı gaz kromatografisi (GC) ya da atomik absorpsiyon (AAS) gibi cihazların kontrol programları ve kullanıcı ara yüzeyleri
6. Laboratuvarlarda veya diğer üretim süreçlerinde elde edilen verilerin veya veri gruplarının değerlendirildiği istatistiksel amaçlı programlar
7. Çok sayıda verinin üretildiği, depolandığı laboratuvarlarla ilgili olarak hazırlanmış 17025 ya da 22001 gibi ISO standartları doğrultusunda raporların ve dökümanların hazırlandığı laboratuvar yada prosesler için kullanılan laboratuvar bilgi yönetim sistemlerine ilişkin yazılımlar
8. Üretim süreçlerinde ve tesislerin optimizasyonu, modellemesi, simülasyonu ile bu sürecin sıcaklık, derişim, akış hızı gibi parametrelerinin kontrolü ile vana veya benzeri taşıyıcı sistemler gibi proses cihazlarının mekanik tasarımında ve kontrolünde kullanılacak olan kontrol üniteleri ve kullanıcı ara yüzeylerinin tasarlanmasında gerekli olan yazılımlar

Tüm bu yazılımlara bakıldığında ya doğrudan C++ gibi derleyiciler aracılığıyla yazılan ve daha profesyonel yazılımcı özellikleri isteyen yazılımlar ile, Matematica ya da Mat-lab gibi daha az profesyonellik isteyen ve ancak ara yüzeylerinde programlama yapılabilen yazılımları ya da Ofis, Spss, Biyoinformatik, Chem Sketch veya Chem Axon gibi doğrudan programlamaya ihtiyaç duymayan simülasyon

paketleri olarak sınıflandırılabilirler [1, 17, 20, 21, 22, 23, 24].

Bu çalışmada da ağırlıklı olarak kimya ve kimyasal süreçlerde karşı-laşılan istatistik, biyoinformatik, laboratuvar ölçümleri ve değerlendirilmeleri, modelleme, simülasyon, optimizasyon ve tasarım aşamalarında karşılaşılabilecek pratik örnek uygulamalar üzerinde durulacaktır.

2.1. İşletim Sistemleri, Bilgisayar Ağları ve Bilişim Güvenliği, Temel Büro Yazılımları ve Veri Tabanları

İşletim sistemleri denildiğinde ilk akla gelen Dos, Windows ve Linux gibi sistemler olup WEB gibi internet ya da intranet üzerinde kurulu bilgisayarların güvenliğini tehdit eden en önemli unsurlar ise başta virüsler olmak üzere solucanlar, truva atları, casus yazılımlar ve spamlardır ve başarı ancak bu unsurlara karşı yapılacak bütüncül çalışmalarla mümkündür [25, 26]. Temel büro yazılımlarında en çok karşılaşılan ürünler İşlemci, Hesap tablosu, Sunum Yazılımı gibi olup bunlar doküman yazımı, verilerin hesaplanması ve grafiklendirilmesi ile genel sunum amaçlıdır. [27]. Veri tabanları ise verilerin toplanıp işlendiği yazılımlar olup Hesap Tabloları'nın da pratik olarak bir veri tabanı amacıyla kullanılabilceği unutulmamalıdır [27, 28].

2.2. Moleküler Boyutta Yapılandırılmalar ve Reaksiyonlar, Laboratuvar Analiz Cihazları

Anorganik ya da organik moleküllerin yapılarının iki yada üç boyutlu çizimlerinin yapılabildiği ara yüzeyler ile anorganik ya da organik kökenli reaksiyonlarda molekül hareketlerinin görsel olarak izlenmesini sağlayan ACD / Chem Sketch gibi moleküler simülasyon ilgili olarak hazırlanmış bazı paket programlar mevcuttur [20, 21, 29]. Kimyasal laboratuvarlarda kullanılan çok sayıda analiz cihazlarından biride gaz kromatografıdır (GC) olup bu tür cihazların pratik olarak kullanılmaları ve analiz sonuçlarının değerlendirilmesi için oluşturulmuş kullanıcı ara yüzeyleri bulunmaktadır [30].

2.3. Kimyada Verilerin İşlenmesi Ve Değerlendirmesi ve Laboratuvarlarda Bilgi Yönetim Sistemleri

Kimyasal üretimlerin gerçekleştirildiği tesislerde ve laboratuvarlarda özellikle analitik kimya açısından bakıldığında verilerin işlenmesi ve istatistiksel değerlendirilmesi ile bu verilerin sağlandığı deney faktörlerinin araştırılması, optimize edilmesi, zaman tasarrufunun sağlanması ve kantitatif ölçümler için kalibrasyonların gerçekleştirilmesi için gerekli olan deneysel tasarımların hazırlanması kimyanın belki de en çok hesaplama ve modelleme çalışmalarına ihtiyaç duyulduğu alanlarıdır. Temel kimya ve fizik bilgileri ile birlikte mühendislik ve hesaplama tekniklerine, matematik ve istatistik konularına ve dolaylı olarak bu çalışmaların pratiğe dönüştürülebi-leceği yazılımlara dayanan kimyada verilerin işlendiği ve değerlendirildiği bu alan kemometriks olarak da bilinmektedir. Verilerin istatistiksel değerlendirilmesinde SPSS, Excel ya da Minitab gibi yazılımlar kullanıcıya kısmen kolaylık sağlarken deney tasarımlarının gerçekleştirildiği Matlab, Matematica gibi algoritma yazılımlarının kullanılması da hızla yaygınlaşmaktadır. [14, 18, 22, 31].

Biyoloji, biyokimyada, genetik ve biyoteknolojik veriler işlendiği alan ise biyoinformatik olup, yeni bir bilim dalı olarak, biyoinformatik The National Center for Biotechnology Information (NCBI)'a göre: Yaşam bilimleri (biyoloji, biyokimya, tıp), bilgisayar bilimleri, bilişim teknolojileri ile matematik ve istatistiğe dayalı disiplinler arası bir bilim dalıdır. [1, 15].

Laboratuvarla üretilen çok sayıda bilginin saklanması, değerlendirilmesi ve raporlandırılması ise çok karmaşık bir iş olup, kullanılan tüm cihazların ve ofis işlemlerinin birleştirildiği bilgi yönetim sistemleri şu anda mevcuttur. [15].

2.4. Kimyasal Süreçlerde Bilişim Teknolojileri

İster kimyasal ister biyokimyasal olsun bir ürünün çoğaltılmasında yaşanan sürecin adımları bir biyoteknoloji prosesi üzerinde bilişim

teknolojilerinin kullanımı açısından aşağıdaki gibi verilebilir [1].

1. Bir biyoteknolojik ürünün üretilebilmesi için gerekli sürecin (prosesin) ve donanımın (cihazların) tasarlanabilmesi için; Gerekli Pazar araştırması, fiyat analizleri, sürece ilişkin fiziksel, kimyasal ve biyolojik ön tasarım bilgilerinin laboratuvarında araştırılması, üretimde kullanılacak biyolojik materyele (mikroorganizmaya) ait bilgilerin, yani biyoinfor-matik bilgilerin doğru olarak saptanması, istatistiksel olarak değerlendirilmesi ve gerekli danışmanlık hizmetlerinin alınması gereklidir. Çünkü ancak böylece yapılması planlanan proste verimlilik belir-lenebilecektir. Bir pilot tesisin bu veriler ışığında modellenmesi, simu-lasyonu, optimizasyonu, tasarlan-ması ve ölçek büyüme (scale-up) ve diğer biyofizikokiyasal parametre-lerinin değişimine ilişkin deneylerin gerçekleştirilmesi, ve böylece tasanım için gerekli verilerin toplanması sağlanmalıdır.

2. Ön tasarım ve ölçek büyüme verileriyle prosesin gerçek boyutlarında yeniden modellenmesi, simu-lasyonu, optimizasyonu, tasarlanması. Gerekli danışmanlık hizmet-lerinin alınması ise tasarım aşamasının son adımıdır.

3. Üretim tesisinin kurulması ve oluşturulan çekirdek kadro ile kurucu firmadan deneme üretiminin sağlanması,

4. İlk yatırım ve üretim giderleri göz önüne alınarak maliyet muhasebesi yardımıyla birim maliyetin belir-lenmesi ve

5. Sürecin birey ve toplumsal boyutu da göz önüne alınarak pazarlama stratejilerinin belirlenmesi. Ham-madde ve ürün satışlarının optimizasyonu. da yatırım ve işletme aşamasıdır.

Yukarıda genel çizgileri sunulan üretim adımlarında ki bilgilenme süreçlerinde en büyük yardımcı-lardan biri, sürecin en etkin gerçekleştirilebilmesi, fiziksel alt yapı-nın ve insan kaynaklarının en iyi şe-kilde kullanılabilmesi için tüm bu süreçlerin içerdiği adımların çok iyi kavranması ile birlikte bilişim teknolojilerinden yararlanılmasıdır.

3. Proseslerin Modellenmesi, Optimizasyonu ve Simulasyonu

Hangi üretim alanında olursa olsun bir prosesin modellenmesi yani başka bir deyişle sürecin fizikokim-yasının ya da biyofizikokimyasının ve sürecin içinde gerçekleştiği cihaz-ların matematiksel olarak tanımı proses sistem mühendisliğinde esas-tır. Ancak bundan sonra sistem simule edilebilir, optimum çalışma koşulları ve optimum cihaz büyük-lükleri belirlenebilir ve tasarlanabilir ve özellikle üretim aşamasına geçil-diğinde böylece sürecin belirlenen optimum değerlerde yürümesi için kontrol edilebilir. Yukarıda açıklanan tüm bu adımların en iyi düzeyde gerçekleştirilebilmesi, ancak bu süreçlerin doğru anlaşılması, doğru modellenmesi ve bu modelin mate-matiksel çözümlemesi için uygun çözüm tekniklerinin kullanılması ile mümkündür [1]. Matematiksel olarak modellenen sistem, üretim sürecinde izlenirken, değişen sistem paramet-relerine göre (sıcaklık, konsantras-yon, pH gibi) içinde bulunulan anı göstermek için çözülür ve sistemin olması gereken parametre değerleri ile arasındaki oluşan farklar bulunur ve böylece sistemin istenen koşul-larda çalışabilmesi için müdahale edilebilir. Yani sistem optimum çalış-ma koşullarına yönlendirilir. Bu adımların tümü ancak, sistemin simule edilebilmesiyle gerçekleştirilebilir.

3.1. Modelleme ve Simulasyon için Yazılım

Simulasyon ve tasarım amaçlı, yalnızca sistemin fizikokimyasal ya da biyofizikokimyasal özelliklerinin giri-lip simule edildiği ve kullanıcının hiçbir şekilde yazılım olarak müdahale etmediği paket programlar (Chem-Cad gibi) mevcuttur. Bununla birlikte, daha öncede bahsedildiği gibi C++ gibi derleyiciler kullanılarak hazırlanan yazılımlar (Matemati-tica, Matlab gibi) basit basic komut-larıyla programın hem bazı kesimle-rinin yazılıp yönlendirilmesine imkan tanıyarak hem de daha önceden hazırlanan paketlerini de kullanıcının hizmetine sunarak modelleme, simu-lasyon ve optimizasyon problem-lerinin çözümüne kullanıcı

çalışmada asıl amaç HPLC de yeterli çözünürlüğü ve makul bir çalışma zamanına sahip gerçekçi optimal deneysel çalışma koşullarının saptanması için kromatografik bir ayırma yönteminin geliştirilmesi-dir. Böylece daha az sayıda çalışmayla hem zaman hem de emek tasarruf edilmiş olacaktır. Yapılan işlem iki çalışma parametresinin eşanlı olarak optimizasyonuna dayanmakta olup daha sonra da kolon çalışma koşullarının optimizasyonu tartışılmıştır. Ardından da elde edilen optimizasyon sonuçları deneysel çalışmalarla karşılaştırılmıştır.

4.2 Biyokimyasal Reaksiyonlarda Konsantrasyon Verilerinin Değerlendirilmesi

Bu bölüm bir fermentör de zamana bağlı olarak kaydedilen biyokütle, substrat ve asetat konsantrasyon verilerinin istatistiksel açıdan değerlendirilip grafikler halinde sunumuna ve bu verilerle çizilen konsantrasyon eğrilerinin her birinin matematiksel olarak ifade edilebilmesi ya da diğer bir deyişle regresyonu ve korelasyonuna ilişkindir [32].

4.3 Bir Nöron Hücreesindeki İyonların Aksiyon Potansiyelini Oluşturmalarının Modellenmesi

Canlı bünyesinde bulunana sinir sistemindeki bir nöron hücreesinde uyarılabilir hücreler tarafından belirli noktalara iletilmesi için üretilen elektriksel sinyallerin aktarılmasında hücre membranında bulunan iyon kanalları büyük rol oynamaktadırlar. Bu iyon kanallarındaki akan akımların makroskobik modeli Hodgkin-Huxley tarafından geliştirilmiştir. Ancak bu modelde iyon kanallarının stokastik açılma ve kapanma özelliği göz ardı edilmiştir. Neher ve Sakman tarafından geliştirilen patch-clamp tekniği ile ise sadece bir iyon kanalı üzerinden geçen akımın ölçülmesi mümkün olmuştur. Bu deneysel teknik ile elde edilen sonuçlarda iyon kanalının temelde rast gele açılıp kapanan stokastik bir eleman olduğu anlaşılmıştır. DeFelice ve Isaac tarafından yapılan çalışmada ise grup halinde bulunan iyon kanallarının uyartım olmadığı halde dinlenim

potansiyeli, aksiyon potansiyeli, ateşleme gibi bilinen makroskobik özel-liklere sahip olduğu gösterilmiştir [33, 34].

4.4 Deterministik ve Stokastik Süreçlerin Modellenmesinde Karşılaşılan Diferansiyel Denklemlerin Çözümü

Bu süreçlerde rastlanan diferansiyel denklemler çoğunlukla bir başlangıç değer problemi olup çözümlenmeleri için değişik metodlar geliştirilmiştir. En sık karşılaşılanı Euler metodu olup bu metotta verilen başlangıç değerleri ile seçilen adım büyüklüğüne bağlı olarak her adımın sonundaki değişim aşağıdaki gibi hesaplanır [16, 32]:

$$\begin{aligned} \text{Dif. Denklem:} & \quad dy/dx=f(y,x) \\ \text{Başlangıç Koş:} & \quad x=0; y(0)=y_0 \\ \text{Adım Aralığı:} & \quad \Delta x=h \\ \text{n. adımdaki artış:} & \quad y_{n+1}=y_n+f(y_n,x_n) \\ & \quad x_{n+1}=x_n+\Delta x \end{aligned}$$

olarak bulunur. Yeterli doğrulukta bir sonuç ulaşmak için adım aralığı (Δx) yeterince küçük seçilmelidir. Bu hesaplamaların gerçekleştirilebilmesi için uygun bir yazılım seçilerek işlemler programlanır.

4.5 Kimyasal Analiz Verilerinin Değerlendirilmesinde İki ve Üç Boyutlu Grafiklerin Kullanımı

Kimyasal analizlere ilişkin değerlendirilmelerde verilerinin doğrudan iki veya üç boyutlu grafiklerinin çizimi ya da analiz parametrelerinin optimizasyonunda veriler yardımıyla iki veya üç boyutlu gösterimlerin oluşturulması ve deneysel sonuçlarla birlikte gösterimi ile birlikte doğru veya yüzey biçimindeki bu optimizasyon eğrilerinin ve/veya yüzeylerin en küçük kareler yöntemiyle bulunabilmesi için aşağıda bir algoritma editöründe yazılmış üç boyutlu bir çizim örneği sunulmuştur [14]:

% P: Veri Matrisi

$$P=[\dots, \dots, \dots ; \\ \dots, \dots, \dots ;$$

..., ..., ..]
plot3(P(:,1), P(:,2), P(:,3))

4.6 Optimizasyon ve Deneysel Tasarım

Yüksek performanslı sıvı kromatog-rafinde (HPLC) bilgisayar destekli yöntem geliştirilmesine ilişkin 4.1 bölümünde sunulan çalışma, bir ilaç hammaddesi ve olası yan ürünlerinin optimum koşullarda analizi üzerine olup optimizasyon için doğrudan programlama yerine DryLab adlı bir bilgisayar simulasyon yazılım pakedi tercih edilmişti [11]. Bu bölümde ise optimizasyon ve deneysel tasarımı [35]. Genel olarak analitik kimyada bir yöntemin optimizasyonu çalışma parametreleri olarak da adlandırılan pH, kimyasallarının konsantrasyonu, sıcaklık, çözgen, karışımın komponentleri gibi faktörlere karşı reaksiyon hızı gibi yöntemin cevabının (responsunun, çözünürlüğünün) irdelemesine dayanır. Yapılan deneysel tasarımın değerlendirilmesi cevap yüzeyinin çizilmesi ve optimum nokta bölgesinin taranmasıyla gerçekleştirilir.

4.7 Monte Carlo Simulasyon Metodunun Nükleer Kimyadaki Uygulamaları

Monte Carlo metodu, olasılık teorisi üzerine kurulu bir sistemdir. Monte Carlo metodunda istatistiksel ve matematiksel tekniklerle bir deneyi veya çözülmesi gereken bir fiziksel olayı tesadüfi sayıları defalarca kullanarak simüle etmek esastır. Günümüzde bu metod, fizik ve matematik problemlerinin çözümünde MCNP(Monte Carlo N – Parçacık Taşınım) kodunu kullanarak özellikle nükleer transport hesaplamalarda iyi sonuçlar vermektedir [36, 37, 38].

4.8. Üç Boyutlu Hareketlerin Modellenmesi

Bir fermentörde çoğalan mikroorganizmaların miktarlarına bağlı olarak buldukları ortamda üç boyutlu hareketlerinin modellenmesi öncelikli mikroorganizmanın büyüme kinetik esasları çerçevesinde kütle miktarlarının bulunması ile eş zamanlı olarak mikroorganizmaların fermentördeki üç boyutlu rastgele

dağılım hareketlerinin akışkan moleküllerine benzetilerek modellenip görsel olarak izlenebilmesine dayanır. Burada büyüme kinetiğinin ifade edilmesinde en basit gösterim olan Monod büyüme kinetiği denklemi ile parçacıkların rastgele hareketlerinin modellenmesinde Brownian hareket denklemi seçilmiştir. Hazırlanan matematik modele ilişkin yazılan algoritmanın uygulanması ile biçimsel olarak üç boyutlu grafikte gösterilen mikroorganizma hareketi video filmine dönüştürülmüştür [39].

4.9. Molekül Modelleme ve HyperChem kullanarak MO diagramlarını oluşturma

Kuantum teorisinin geliştirilmesinden hemen sonra, kuantum mekanik kanunları atom ve moleküllere uygulanmaya başlanmıştır. Prensipten olarak, kuantum teorisi ile bir molekülün bütün kimyasal özellikleri hesaplanabilir. Aslında bir bileşiğin yapısı ve kimyası deneysel yöntemlerle belirlenebilir, ancak hesaplama yolu ile öngörünün yapılabilmesi çok yararlıdır ve pek çok uygulama alanı bulmuştur. Örneğin farmakolojide yeni ilaçların geliştirilmesinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Kimyacılar bilgisayar kullanarak sentezden önce ilaçların yapıları hakkında ön bilgiye sahip olurlar, ilaçta istenen özellikleri belirlerler, sonra bu özelliklere uygun sentezleri gerçekleştirirler [40, 41].

5. Sonuçlar

Bu çalışmada kimyanın temel alanlarında karşılaşılabilecek bilişim uygulamaları üzerinde durulmuş olup çok geniş bir alanı kapsayan bu uygulamalar bu temel alanlar çerçevesinde sınıflandırılarak, yazılımlar hem yapısal olarak hem de pratik kullanımları açısından ele alınmıştır.

6. Kaynaklar

[1] Akpolat, O., 2004, Information Processes in Technology for Sustainable Developments and Biotechnology, Turkish Electronic Journal of Biotechnology, 2, 11-16.

- [2] **Brockman, J.** (Editor-2002, The Next Fifty Years), 2007, Gelecek 50 Yıl - 21. Yüzyılın İlk Yarısında Hayat ve Bilim (Tercüme: N. Elhüseyni), NTV Yayınları.
- [3] **Nikoukaran, J., Paul, R. J.**, 1999, Software Selection for Simulation in Manufacturing, *Simulation Practice and Theory*, 7(1-14).
- [4] **Petrucci, R. H., Harwood, W. S., Herring, F. G., Madura, J. D.**, 2007, General chemistry: principles and modern applications, Pearson Education International.
- [5] **Perry, R. H., Chilton, C.H.**, 1973, Chemical Engineers Handbook, 5 th. Edition, McGAW-HILL.
- [6] **Saltelli, A., Ratto, M., Tarantola, S., Campolongo, F.**, 2005, Sensitivity Analysis for Chemical Models, *Chem. Rev.* 105, 2811-2827.
- [7] **Bersohn, M., Esack, A.**, 1976, Computers and Organic Synthesis, *Chemical Reviews*, Vol. 76, No. 2.
- [8] **Hansch, C., Hoekman, D., Leo, A., Weininger, D., Selassie, C. D.**, 2002, ChemBioinformatics: Comparative QSAR at the Interface between Chemistry and Biology, *Chem. Rev.* 102, 783-812.
- [9] **Klein, M. L., Lewis, L. J.**, 1990, Simulation of Dynamical Processes in Molecular Solids, *Chem. Rev.* 1990, 90, 459-479.
- [10] **Hlupic, V.**, 1999, Simulation Software : Users' Requirements, *Computers & Industrial Engineering* 37, 185-188.
- [11] **Hoang, T. H., Cuerrier, D., McClintock, S., Maso, M. D.**, 2003, Computer-assisted method development and optimization in high-performance liquid chromatography, *Journal of Chromatography A*, 991, 281-287.
- [12] **Akpolat, O.**, 2004, The Collectional of Data and Computational programming for Modeling and Simulation in a Model Supported Way for Batch and Fed Batch Fermentation Units, *Turkish Electronic Journal of Biotechnology*, 2, 1-10.
- [13] **Akpolat, O.**, 2004, Biyoteknolojide Süreçlerin Modellenmesi, Simülasyonu ve Optimizasyonunda Temel MatLab Uygulamaları (Organizasyon: **D. Kazan**), Kurs Notları, Marmara Üniv., Kim. Müh. Böl.
- [14] **Brereton, R. G.**, 2003, Chemometrics: Data Analysis for thje Laboratory and Chemical Plant, John Wiley & Sons Ltd.
- [15] **LIMS Ürün Tanıtım Broşürü**, 2002, LABWORKS Enterprise Laboratory Information Management System, BRP20215 Printed in USA © 2002 PerkinElmer, Inc.
- [16] **Jenson, V. G., Jeffreys, G. V.**, 1977, Mathematical Methods in Chemical Engineering, Academic Pres.
- [17] **Ören, T., Üney, T., Çölkesen, R., (Editörler)**, 2006, Türkiye Bilişim Ansiklopedisi, Papatya Yay. Eğit. A.Ş. ve Türkiye Bilişim Vakfı, 55, 144, 162, 200, 250, 436, 590, 1100.
- [18] **Çakır, A., Seren, N. E.**, 2006, Otomatik Kontrol Sistemleri, Akademik Bilişim Konferansı, Kütahya Üniv.
- [19] **Ertas, H., Ertas, F. N.**, 2001, Analitik Kimyada Veri İşleme ve Değerlendirme, Ders Notları, Ege Üniv. Fen Fak. Kim. Böl. Analitik Kim. A. B. D.
- [20] **ACD/ChemSketch 11.0 Freeware Ürün Tanıtımı**, 2008, <http://www.acdlabs.com/download/chemsk.html>, 27 May.
- [21] **ChemAxon Ürün Tanıtımı**, 2008, <http://www.chemaxon.com/products.html?gclid=CIfg8JC6xpMCFRwo1QodhHZ6Bg>, 27 May.

- [22] **Arifoğlu, U.**, 2005, MATLAB 7.04, SIMULINK ve MÜHENDİSLİK UYGULAMALARI, Alfa Basım Yayın Ltd. Şti.
- [23] **TS EN ISO/IEC 17025 Türk Standardı**, 2005, Deney ve Kalibrasyon laboratuvarlarının Yeterliliği İçin Genel Şartlar, T.S.E.K.
- [24] **TS EN ISO/IEC 27001 Türk Standardı**, 2006, Bilgi Teknolojisi-Güvenlik Teknikleri-Bilgi Güvenliği Yönetim Sistemleri-Gereksinimler, T.S.E.K.
- [25] **Ersoy, E.**, 2006, İnternette Güvenlik, Virüs, Spam, Bireysel Savunma, Akademik Bilişim Konferansı, Kütahya Üniv.
- [26] **Bilgi Güvenliği Ürün Tanıtım**, 2008, Güvenlik, <http://www.gentekbilgisayar.com/guvenlik.html>, 27 May.
- [27] **Uysal, M.**, 1999, Excel Word 2000 ile Etkin Cozumler, I. Baskı., Beta Basım Yayın Dagitim A.Ş.
- [28] **Günaydin, V.**, 2008, Introduction to SQL, http://www.w3schools.com/sql/sql_intro.asp, 27 May.
- [29] **Hou, T., Xu, X.**, 2001, A new molecular simulation software package – Peking University Drug Design System (PKUDDS) for structure-based drug design, Journal of Molecular Graphics and Modelling 19, 455–465.
- [30] **Gündüz, G., Akpolat, O., Gürbüz, D.**, 2000, Gaz Kromatografisi Teori ve Uygulamaları, Kurs Notları, E.Ü. Ebiltem Yayınları.
- [31] **İstatistik Ürün Tanıtımı**, 2008, SPSS 16.0, http://www.spss.com/spss/whats_new_base.htm, 27 May.
- [32] **Lübbert, A., Simutis, R., Volk, N., Galvanuskas, V.**, (2000), Biochemical Process Optimization and Control. Hands-on Course, , 2000, Martin Luther Universität-Germany.
- [33] **Star, C., McMillan, B.**, 1995, Human Biology, 5 th. Edition, Wadsworth Publishing Company.
- [34] **Ekmekçi, N. H., Özer, M.**, 2008, Nöron Modellemede Gürültü Analizi İçin Stokastik Hodgkin-Huxley Modeli, http://www.emo.org.tr/resimler/ekler/31b342d8a83408e_ek.pdf, 30 May.
- [35] **Otto, M.**, 1999, Chemometrics: Statics and Computer Application in Analytical Chemistry, Wiley-Vch Verlag GmbH.
- [36] **Hançerlioğulları, A.**, 2006, Monte Carlo Metodu ve MCNP Kod Sistemi, Kastamonu Eğitim Dergisi, 14, 2, 545-556.
- [37] **Gültekin, A. T., Asyali M. H.**, 2008, Pi Sayısının Monte Carlo Metodu ve Gregory/Leibniz Formülüyle Hesaplanması, <http://joy.yasar.edu.tr/arsiv/n7v2/>
- [38] **Friedlander, G., Kennedy, J. W., Macias, E. S., Miller, J. M.**, 1981, Nuclear and Radiochemistry, John Wiley & Sons Ltd.
- [39] **Akpolat, O.**, 2007, Bir Fermentörde Çoğalan Mikroorganizmaların Buldukları Ortamdaki Üç Boyutlu Hareketlerinin Modellenmesi, Akademik Bilişim Konferansı, Kütahya Üniv.
- [40] **Inorganik Lab. Ders. Not**, 2008, MOLEKÜL MODELLEME, HyperChem kullanarak MO diagramlarını oluşturma, <http://w3.gazi.edu.tr/web/nkaracan/inorglab/mm.pdf>, 27 May.
- [41] **HyperChem Ürün Tanıtım**, 2008, Computational Chemistry, <http://www.compuchem.com/index.html>, 27 May.