

<b>Dersin Adı:</b> Kimyada Bilgisayar Uygulamaları				<b>Course Name:</b> Computer Applications in Chemistry		
Kod (Code)	Yarıyıl (Semester)	Kredi (Local Credits)	AKTS Kredi (ECTS Credits)	Ders Uygulaması, Saat/Hafta (Course Implementation, Hours/Week)		
				Ders (Theoretical)	Uygulama (Tutorial)	Laboratuvar (Laboratory)
KIM 219-219E	3	3	4,5	2	0	2
<b>Bölüm / Program (Department/Program)</b>		Kimya/Kimya (Chemistry/Chemistry)				
<b>Dersin Türü (Course Type)</b>		Zorunlu (Compulsory)		<b>Dersin Dili (Course Language)</b>		Türkçe (Turkish)
<b>Dersin Önkoşulları (Course Prerequisites)</b>		KIM 112 MIN DD veya KIM 112E MIN DD veya KIM 114 MIN DD veya KIM 114E MIN DD				
<b>Dersin Mesleki Bileşene Katkısı, % (Course Category by Content, %)</b>		<b>Temel Bilim ve Matematik (Basic Sciences and Math)</b>	<b>Temel Mühendislik (Engineering Science)</b>	<b>Mühendislik/Mimarlık Tasarım (Engineering/Archit ecture Design)</b>	<b>Genel Eğitim (General Education)</b>	
		30	30	10	30	
<b>Dersin Tanımı (Course Description)</b>		<p>MS Excel, formüller ve grafikler. Veri ile çalışma. Nümerik yöntemler, regresyon ve eğri uydurma. EndNote ve kütüphaneler ile çalışma. Referans yönetimi ve MS Word integrasyonu. ChemOffice ile kimyasal şema çizimi. Origin ile veriyi alma ve işleme. Grafiklerle çalışma. Nümerik analiz. MestreNova programı ile NMR spektrumlarının işlenmesi. Kimyasal kayma, pik seçilmesi, integrasyon ve multipllet analizi. NMR analiz sonuçlarının dışa aktarılması.</p> <p>Working with MS Excel, formulas, and charts. Data analysis. Numerical methods, regression and curve fitting. Working with Endnote and libraries, reference management and MS Word integration. ChemOffice, drawing chemical schemes. Importing, and processing the data with Origin. Working with plots. Numerical analysis. Processing NMR data with MestreNova. Chemical shift referencing, peak picking, integration, multipllet analysis, exporting NMR analysis results.</p>				
<b>Dersin Amacı (Course Objectives)</b>		<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Kimyada kullanılan bilgisayar programlarını ve kullanım yöntemleri hakkında bilgi vermek</li> <li>2. Nümerik analizlerin farklı programlardaki yapılaş yöntemlerini öğretmek ve veriyi görselleştirmek</li> <li>3. Kimyasal şemaların düzenli ve anlaşılır biçimde çizilmesini öğretmek</li> <li>4. NMR verilerinin işlenmesini ve değerlendirilmesini öğretmek</li> <li>5. Verilerin düzenlenip işlenerek bilimsel rapor haline getirilmesini ve uygun şekilde aktarılmasını öğretmek</li> </ol> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. To give information about the computer applications in chemistry and their methods of use</li> <li>2. To instruct performing numerical analysis on different applications and visualize the data</li> <li>3. To instruct drawing clear and understandable chemical schemes</li> <li>4. To instruct processing and evaluating NMR data</li> <li>5. To learn processing the data in order to write a scientific report appropriately.</li> </ol>				

<p><b>Dersin Öğrenme Çıktıları</b> <b>(Course Learning Outcomes)</b></p>	<p>Bu dersi başarıyla tamamlayan öğrenciler</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. MS Excel yazılımı ile formülleri kullanabilecek, verilerini içe veya dışa aktarabileceklerdir</li><li>2. MS Excel yazılımı ile nümerik analiz yapabilecek, grafik oluşturabilecek ve bu grafikleri MS Word gibi kelime işlemcilerde aktarabileceklerdir</li><li>3. Origin yazılımını kullanarak verilerini içe veya dışa aktarabilecekler, nümerik analiz yapabilecekler, grafikler oluşturabileceklerdir.</li><li>4. Kimyasal şemaları chemoffice yazılımı ile çizmeyi, düzenlemeyi ve MS Word gibi kelime işlemcilerde aktarmayı yapabileceklerdir.</li><li>5. Ham NMR verisini mestrenova yazılımı ile işleyebilecek ve MS Word gibi kelime işlemcilerde aktarmayı yapabileceklerdir.</li><li>6. Görevlerini hazırlamaya yardımcı olmak üzere gerekli kaynak ve literatürü Endnote yazılımı ile nasıl yöneteceklerini anlayacaklardır.</li></ol> <p>By successful completion of this course, students will</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Use formulas in MS Excel software and import or export the data.</li><li>2. Do numerical analysis with MS Excel software, create plots and export them to word processors like MS Word.</li><li>3. Make import or export the data into or from Origin software, make numerical analysis, create plots.</li><li>4. Draw chemical schemes with chemoffice software, edit and transfer the scheme to word processors like MS Word.</li><li>5. Handle raw NMR data with mestrenova software and transfer the scheme to word processors like MS Word.</li><li>6. Understand how to manage literature with Endnote software and make presentations.</li></ol>
--	---

## DERS PLANI

Hafta	Konular	Dersin Öğrenme Çıktıları
1	MS Excel yazılımına giriş ve formüller	1
2	MS Excel yazılımına veri aktarımı ve grafik oluşturma	1,2
3	MS Excel ile nümerik analiz: Doğrusal ve doğrusal olmayan regresyon	1,2
4	MS Excel ile nümerik analiz: Nümerik türev ve integral	1,2
5	Origin yazılımına giriş ve genel kullanımı	3
6	Origin yazılımına veri aktarımı ve grafik oluşturma	3
7	Origin ile nümerik analiz: Doğrusal ve doğrusal olmayan regresyon	3
8	Origin ile nümerik analiz: Nümerik türev ve integral	3
9	ChemOffice yazılımına giriş ve genel kullanım	4
10	ChemOffice ile tepkime şemalarının çizimi: Bileşikler, Radikaller, Şablonlar	4
11	ChemOffice ile tepkime şemalarının çizimi: Oklar, Elektron hareketleri, Tepkimeler	4
12	MestreNova yazılımına giriş ve veri aktarımı	5
13	MestreNova ile NMR spektrumunun işlenmesi	5
14	Endnote yazılımına giriş genel kullanım ve MS Word integrasyonu	6

## COURSE PLAN

Weeks	Topics	Course Learning Outcomes
1	Introduction to MS Excel software and formulas	1
2	Data import to MS Excel and creating plots	1,2
3	Numerical analysis with MS Excel: Linear and non-linear regression	1,2
4	Numerical analysis with MS Excel: Numerical differentiation and integration	1,2
5	Introduction to Origin and general usage	3
6	Data import to Origin and creating plots	3
7	Numerical analysis with Origin: Linear and non-linear regression	3
8	Numerical analysis with Origin: Numerical differentiation and integration	3
9	Introduction to ChemOffice and general usage	4
10	Drawing chemical schemes with ChemOffice: Compounds, Radicals, Templates	4
11	Drawing chemical schemes with ChemOffice: Arrows, Electron movements, Reactions	4
12	Introduction to MestreNova and general usage	5
13	Processing NMR data with MestreNova	5
14	Introduction to Endnote and general usage	6

**Dersin Kimya Bölümü Öğrenci Çıktılarıyla İlişkisi**

	Programın mezuna kazandıracığı bilgi ve beceriler (programa ait öğrenci çıktıları)	Katkı Seviyesi		
		1	2	3
1	Kimyanın temel alanları olan inorganik, organik, fiziksel ve analitik kimyanın önemli kavramlarını, teorik esaslarını ve ilgili konulardaki deneysel bulguları kavrama becerisini edinmeleri	x		
2	Öğrencilerin edindikleri teorik ve pratik bilgileri kimya ya da kimya içeren disiplinler arası alanlarda veya kimya temelli endüstrilerde uygulayabilme yeteneği edinmeleri		x	
3	Deneysel çalışmaları tasarlama, veri analizi yapma, klasik teknikleri ve modern cihazları kullanma becerisini edinmeleri	x		
4	Kimya ve kimya ile ilgili alanlar hakkında araştırma yapma ve bilgiye ulaşma için modern kütüphane kullanma becerisi edinmeleri		x	
5	Kimyasal simülasyon ve hesaplama, veri elde etme ve veritabanı kullanımı için bilgisayar kullanım becerisi edinmeleri			x
6	Problemleri çözme, kritik düşünme ve analitik çözümlere için matematik, fizik ve biyoloji temel bilgilerini kimyasal sistemlere uygulama becerisi edinmeleri			x
7	Hem sınıfta hem de laboratuvarında etkin biçimde grup çalışması yapma, liderlik ve grup üyesi olarak çalışma yeteneği edinmeleri			x
8	Araştırma yapma, araştırma raporu yazma, sözlü ve poster sunumu yapma becerisi edinmeleri,		x	
9	Kimyasal malzemelerin güvenli kullanımı ve uzaklaştırılmaları için modern yöntemler ve düzenlemeleri bilmeleri	x		
10	Etik davranışın kişisel ve profesyonel yaşamın tüm alanlarındaki önemini anlayabilmeleri			x

**Ölçek:** 1: Az, 2: Kısmi, 3: Tam

**Relationship of the Course to Chemistry Student Outcomes**

	Program Student Outcomes	Level of Contribution		
		1	2	3
1	An ability to understand the major concepts, theoretical principles and experimental findings in the main areas of chemistry: organic, inorganic, analytical, and physical	x		
2	An ability to apply the knowledge of chemistry to the solutions of qualitative and quantitative problems in chemistry-related global/public and social areas such as environmental, food, health, textile, agriculture and energy		x	
3	An ability to design experiment, to properly record the experimental results, to use modern instrumentation and classical techniques and to work effectively in teams in both classroom and laboratory	x		
4	An ability to use modern library searching and retrieval methods to obtain information about chemistry and chemistry-related areas.		x	
5	An ability to use computers for chemical simulation and computation, data acquisition, and database usage			x
6	An ability to apply and integrate basic knowledge from mathematics, physics and biology to chemistry for solutions of problems, critical thinking and analytical reasoning			x
7	An ability to have being team member both classroom and laboratory			x
8	An ability to research chemistry topics, write research reports, and give oral and poster presentations on that topic		x	
9	An ability to know the proper procedures and regulations for safe handling and use of chemicals and to follow the proper procedures and regulations for safe handling when using chemicals	x		
10	An understanding and appreciation the importance of ethical behavior in all aspects of personal and professional life			x

**Scaling:** 1: Little, 2: Partial, 3: Full

<b><u>Tarih (Date)</u></b> 11.03.2019	<b><u>Bölüm onayı (Departmental approval)</u></b>
--	---

**Ders kaynakları ve Başarı değerlendirme sistemi (Course materials and Assessment criteria)**

<b>Ders Kitabı (Textbook)</b>	Excel for Chemists 3rd Ed., J. Billo, Wiley, 2011 Essential Practical NMR for Organic Chemistry, Wiley, 2016		
<b>Diğer Kaynaklar (Other References)</b>	<a href="http://mestrelab.com/learn_support/mnova/nmr/">http://mestrelab.com/learn_support/mnova/nmr/</a> <a href="http://www.perkinelmer.com/Product/chemoffice-professional-chemofficepro">http://www.perkinelmer.com/Product/chemoffice-professional-chemofficepro</a> <a href="https://www.youtube.com/channel/UCbqEXpujYBlykLJRlahNMEQ">https://www.youtube.com/channel/UCbqEXpujYBlykLJRlahNMEQ</a> <a href="http://clarivate.libguides.com/endnote_training/home">http://clarivate.libguides.com/endnote_training/home</a>		
<b>Ödevler ve Projeler (Homework &amp; Projects)</b>	-		
<b>Laboratuar Uygulamaları (Laboratory Work)</b>	-		
<b>Bilgisayar Kullanımı (Computer Usage)</b>	%100 100%		
<b>Diğer Uygulamalar (Other Activities)</b>	-		
<b>Başarı Değerlendirme Sistemi (Assessment Criteria)</b>	<b>Faaliyetler (Activities)</b>	<b>Adedi (Quantity)</b>	<b>Genel Nota Katkı, % (Effects on Grading, %)</b>
	<b>Yıl İçi Sınavları (Midterm Exams)</b>	2	50
	<b>Kısa Sınavlar (Quizzes)</b>	-	-
	<b>Ödevler (Homework)</b>	-	-
	<b>Projeler (Projects)</b>	-	-
	<b>Dönem Ödevi/Projesi (Term Paper/Project)</b>	-	-
	<b>Laboratuar Uygulaması (Laboratory Work)</b>	-	-
	<b>Diğer Uygulamalar (Other Activities)</b>	-	-
	<b>Final Sınavı (Final Exam)</b>	1	50

<b><u>Tarih (Date)</u></b> 11.03.2019	<b><u>Bölüm onayı (Departmental approval)</u></b>
--	---