

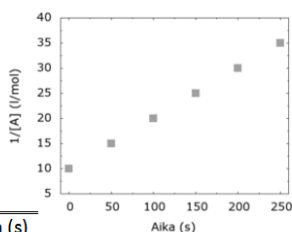
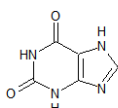


Jyväskylän yliopisto

Kemian laitos

Ohjeita kemian opiskeluun

Raportoinnin välineitä



1/[A] (mol/l)	Aika (s)
10	0
15	50
20	100
25	150
30	200
35	250

$$\ln K = \frac{\Delta H_{\text{rxn}}^{\circ}}{R} \left(\frac{1}{T} \right) + \frac{\Delta S_{\text{rxn}}^{\circ}}{R}$$

Jussi Ahokas
Tatu Kumpulainen
Jani Moilanen
2023

Esipuhe

Tässä ohjeessa esitellään kemian opinnoissa ja erityisesti raportoinnissa tarvittavia ohjelmistoja sekä tulosten ja matemaattisten tai kemiallisten kaavojen esittämiseen liittyviä sääntöjä. Raportoinnissa tarvittavien ohjelmistojen käyttö kannattaa aloittaa mahdollisimman varhaisessa vaiheessa opintoja, jotta niistä saa parhaan hyödyn opiskelun edetessä. Ohjeessa esiteltyt ohjelmistot on valittu siten, että ne löytyvät valmiiksi asennettuina kemian laitoksen koneilta tai opiskelijat voivat asentaa ne ilmaiseksi henkilökohtaisille koneilleen. Ohje on päivitetty versio Jussi Ahokkaan 2013 laatimasta ohjeesta *Raportoinnin välineitä*.

Sisältö

1 Kuvaajat	1
1.1 Kuvaaja OriginPro 2017 ohjelmistolla	1
1.2 Kuvaaja Microsoft Excelillä	12
2 Suoran sovitus	17
2.1 Suoran sovitus OriginPro:lla	17
2.2 Suoran sovitus Excelillä	19
3 Taulukot	22
3.1 Taulukko Wordilla	22
4 Matemaattiset kaavat	26
4.1 Kaavojen ja muuttujien kursivointi	26
4.2 Kaavojen kirjoittaminen ja numerointi Wordilla	26
5 Numeeristen tulosten esittäminen	31
5.1 Virhelähteet ja virheiden arvioiminen	31
5.2 Tulosten esitystarkkuus ja pyöristäminen	32
6 Kemiaalliset kaavat ja reaktioyhtälöt	35
6.1 Kemiaalliset kaavat ja reaktioyhtälöt Wordissä	36
7 Kemiaalliset rakennekaavat	38
7.1 Rakennekaava ChemDraw’lla	38
8 Laitteistokuvat	49
8.1 Tislauslaitteisto ChemDraw:lla	49

1 Kuvaajat

Kuvaajien avulla voidaan esittää mittaustulokset havainnollisessa muodossa. Tässä ohjeessa piirretään oheisen taulukon tiedot kuvaajaan OriginPro 2017 ja Microsoft Excel (Office 365) ohjelmistoilla.

Tulokset, joista kuvaaja piirretään, on tässä esitetty vain listana. Myöhemmin tässä ohjeessa tulokset esitetään oikeaoppisesti taulukkomuodossa.

Tulokset:

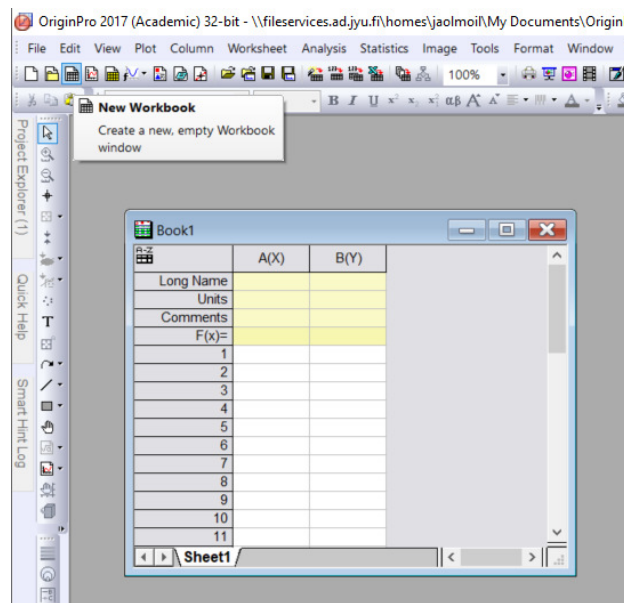
Aika (s)	$1/[A]$ (l/mol)
0	10
50	15
100	20
150	25
200	30
250	35

1.1 Kuvaaja OriginPro 2017 ohjelmistolla

OriginPro 2017 on asennettu kemian laitoksen opiskelijakoneille. Yliopistolta ei ole saatavilla ohjelmasta kotikoneille asennettavaa versiota, joten kotikäyttöön ohjelmisto täytyy hankkia omalla kustannuksella.

Ohje kuvaajan piirtämiseksi Originilla.

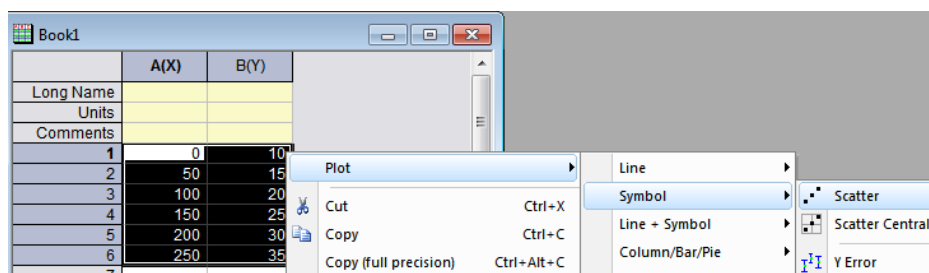
1. Käynnistä ohjelmisto. Ohjelmisto löytyy Start-/Käynnistävalikosta kansista OriginLab
2. Ohjelma käynnistyy ja työpöydällä avautuu tyhjä työkirja (Book1). Jos työkirjaa ei ole avoinna saat sen työkalurivin painikkeesta **New Workbook**.



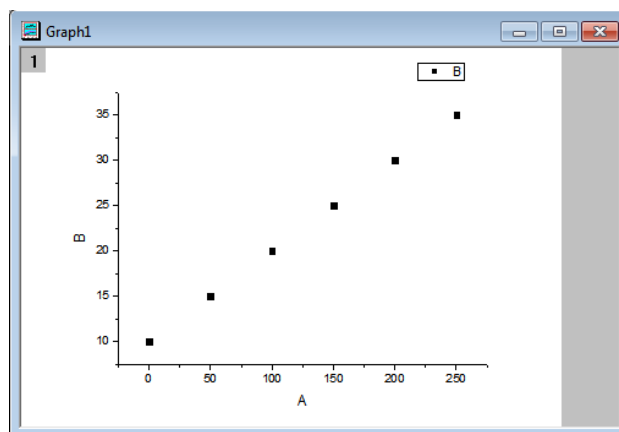
3. Syötä arvot sarakkeisiin A(X) ja B(Y). Nyt x-akselille (sarake A(X)) tulee aika ja y-akselille (sarake B(Y)) konsentraation käänteisluku $1/[A]$.

	A(X)	B(Y)
Long Name		
Units		
Comments		
1	0	10
2	50	15
3	100	20
4	150	25
5	200	30
6	250	35
7		

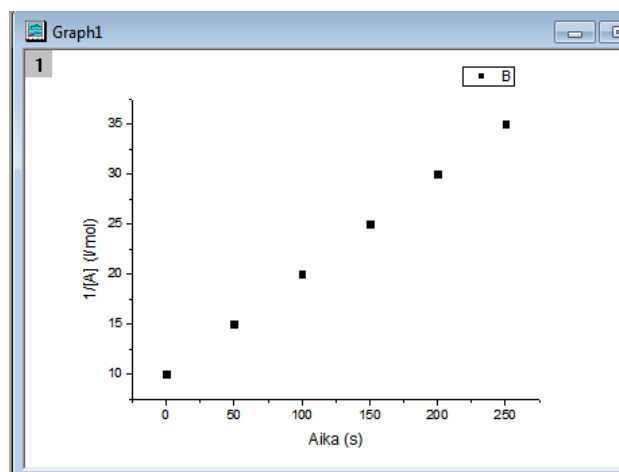
4. Maalaa piirrettävät arvot ja paina hiiren oikeaa nappia. Valitse Plot → Symbol → Scatter. Saman voit tehdä myös työkalurivin Plot -valikosta.



5. Nyt ruudulle saatiin kuvaaja, jossa mittapisteet on merkitty symboleilla (mustat neliöt). X-akselilla on aika ja y-akselilla konsentraation käänteisluku.

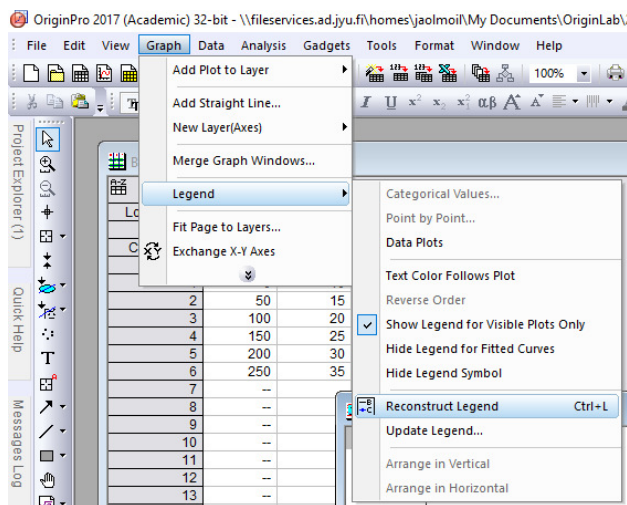


6. Laitetaan akseleille oikeat otsikot ja yksiköt näkyviin: tuplaklikkaa x-akselin alla olevaa A:ta. Pyyhi merkit pois laatikosta ja kirjoita otsikko ja yksikkö. Tee sama y-akselin otsikolle B.



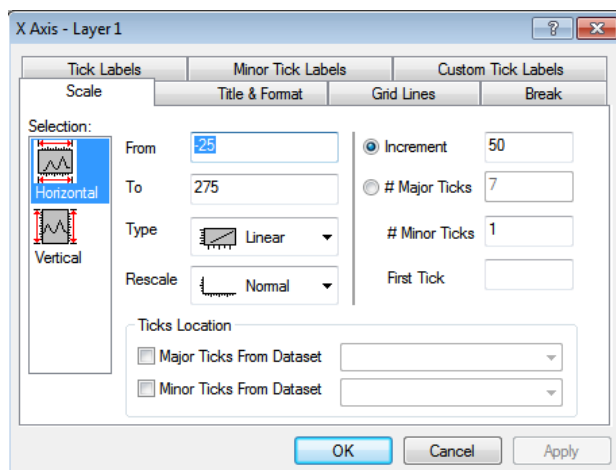
7. Nyt kuvaa voi muokata helposti:

- Oikeassa yläkulmassa olevan Legend -laatikon voi poistaa klikkaamalla sitä ja painamalla delete. Tarvittaessa sen voi palauttaa valitsemalla Graph → Legend → Reconstruct Legend.



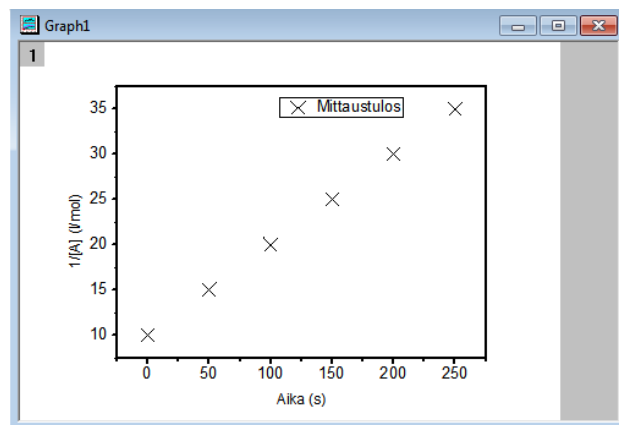
Laatikkoon voi kirjoittaa tuplaklikkaamalla selitteen symbolimerkkiä. Selite on erityisen hyvä silloin, jos samassa kuvassa on useita eri mittaustuloksia eri symbolein esitettynä.

- Akseleita ja niiden merkintöjä voi muokata tuplaklikkaamalla akselia, jolloin avautuu uusi ikkuna, jossa voit säätää kuvan asetuksia.

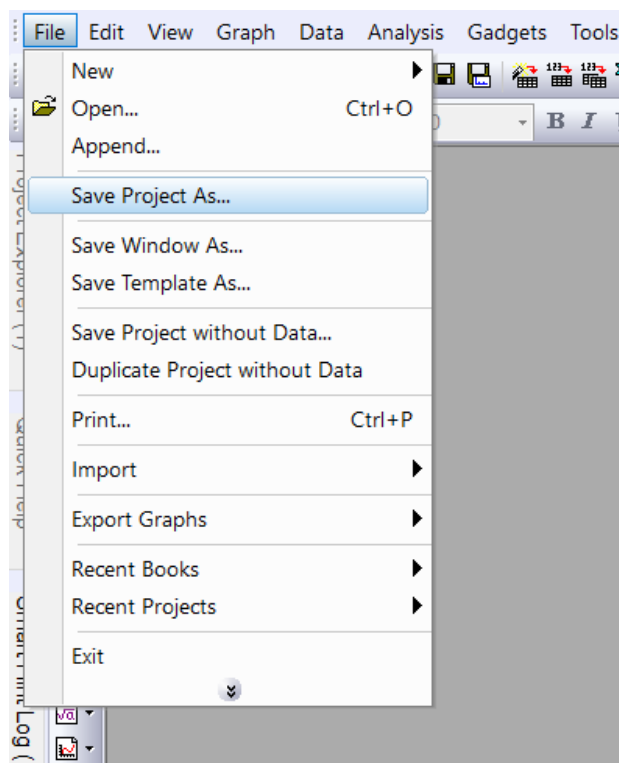


- Tärkeimmät kuvan asetukset:
 - Scale -välilehti
 - * Vasen laita: valitse joko x- (Horizontal) tai y-akselin (Vertical) asetukset.
 - * From ja To ovat akselin alku- ja loppuarvot.

- * **Major Ticks** -valikosta voit asentaa jakovälin (**Value**) akselilla esitettäville lukuarvoille. Varmista, että **Type** -valikossa on valittuna **By Increment**.
- * **Minor Ticks** määrittää esitettyjen lukuarvojen välisen jakovälin akselille. Varmista, että **Type** -valikossa on valittuna **By Counts**.
- **Title** -välilehti
 - * Valitse vasemmasta laidasta akseli mitä haluat muokata.
 - * **Color**, **Font** ja **Size** -valikoista voit muokata valitun akselin otsikon väriä, fonttia ja fontin kokoa.
- **Line and Ticks** -välilehti
 - * Valitse vasemmasta laidasta akseli mitä haluat muokata.
 - * **Line** -valikossa voit muokata akselin viivan väriä (**Color**), paksuutta (**Thickness**) ja paikkaa (**Axis Position**).
 - * **Major Ticks** -valikossa voit muokata jakovälin tyyliä (**Style**), pituutta (**Length**), väriä (**Color**) ja paksuutta (**Thickness**).
 - * **Minor Ticks** -valikossa voit muokata jakovälien jaottelun tyyliä (**Style**), pituutta (**Length**), väriä (**Color**) ja paksuutta (**Thickness**).
 - * Joskus voi olla tarpeen katkaista x- tai y-akseli ja jatkaa sitten katkon jälkeen halutulla arvolla. Näitä voi säätää **Break** -välilehdellä.
- Kuvaajan symboleita voi muokata tuplaklikkaamalla symbolia.
- Tässä esitettyjen muokkaustoimintojen avulla kuvasta saa vaikkapa tämän näköisen:

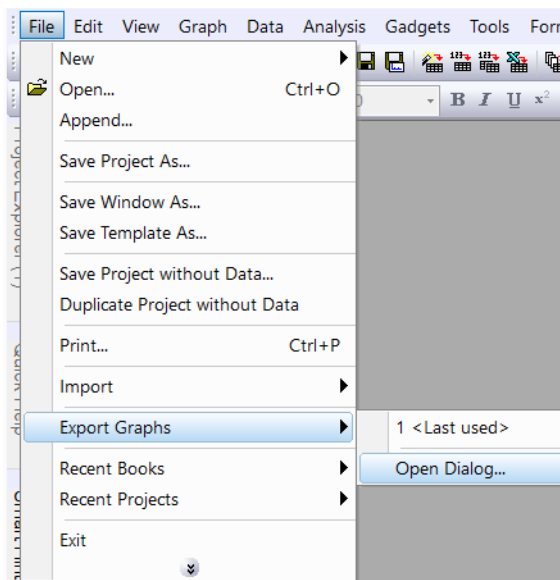


8. OriginProssa työt tallennetaan projekteina: File → Save Project As.

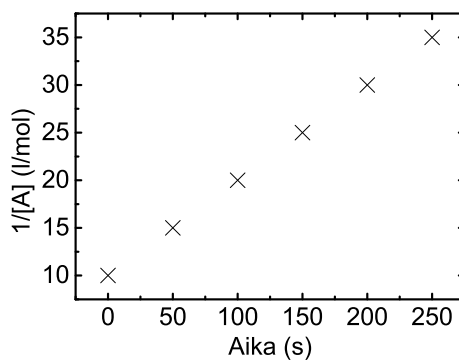


9. Varsinainen kuvaaja tallennetaan kuvatiedostona, jotta se voidaan liittää kuvana esim. työselostukseen. Valitse kuvaajan ikkuna aktiiviseksi ja valitse File → Export Graphs → Open Dialog. Valitse kuvan tiedostomuoto (tyypillisesti jpg, gif tai png toimii hyvin), tiedostoni-

mi, tiedostopolku, resoluutio (miehellään 600 tai suurempi) ja tallenna. Voit myös esikatsella kuvaa.



10. Tallennuksen jälkeen kuvan voi tuoda omaan työhön eri ohjelmistoista riippuvalla tavalla. Valmis kuva näyttää tältä, kun kuvan jokaiselle reunalla on laitettu viivat ja jakovälit:



Kuva 1. Esimerkkikuva OriginPro:lla tehdystä kuvaajasta.

11. Käydään vielä läpi kuinka samassa kuvaajassa voi esittää kahdet eri tulokset. Käytetään esimerkissä alla olevia tuloksia.

Tulokset 1:

Aika (s) $1/[A]$ (l/mol)

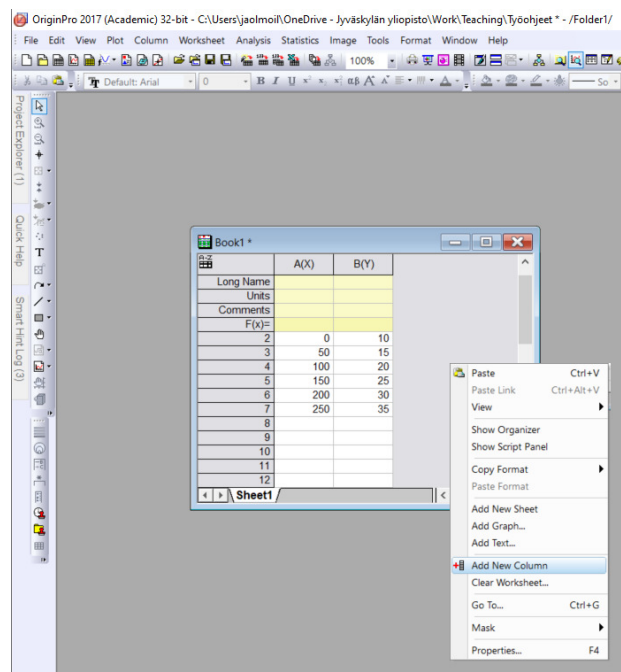
0	10
50	15
100	20
150	25
200	30
250	35

Tulokset 2:

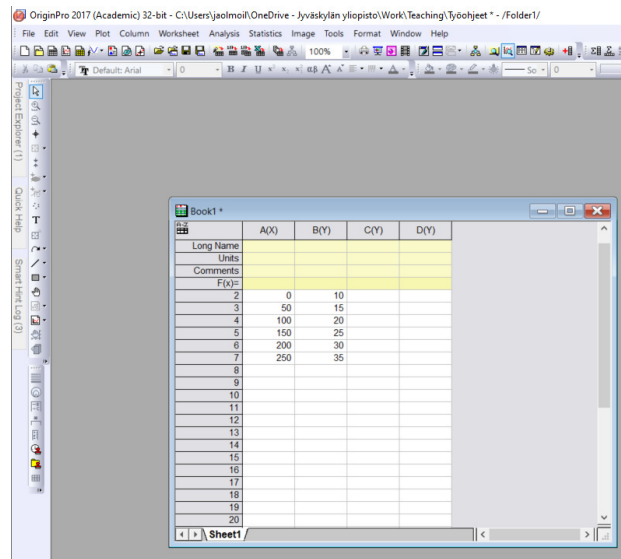
Aika (s) $1/[A]$ (l/mol)

0	10
25	15
75	20
125	25
175	30
225	35

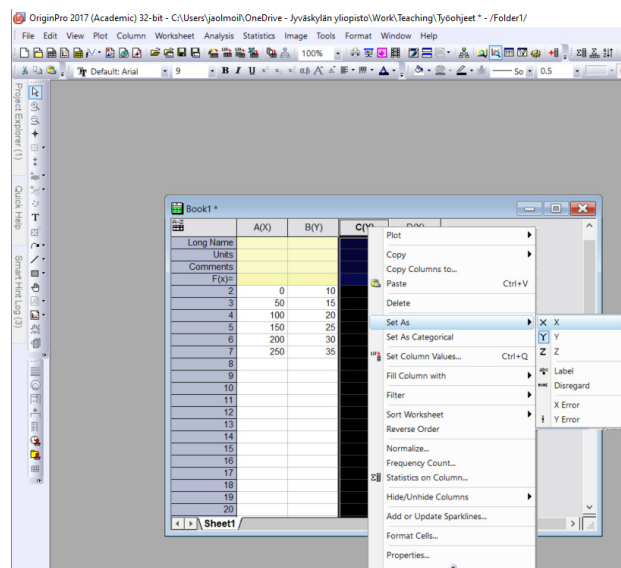
12. Klikkaa hiiren oikeaa nappia työkirjan harmaalla alueella ja valitse Add New Column.



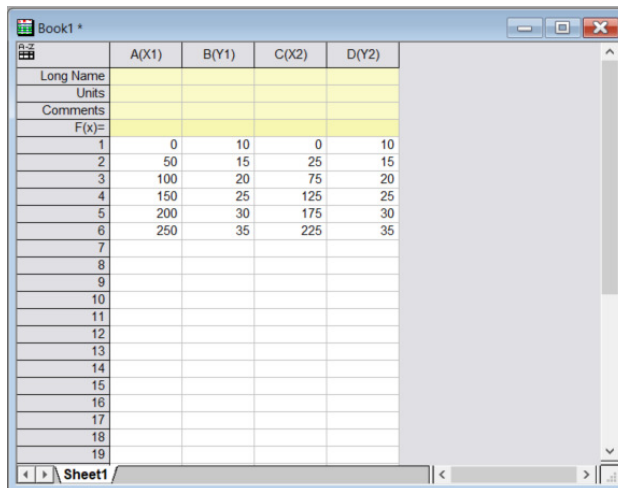
13. Toista tämä kaksi kertaa ja saat kaksi uutta saraketta - C(Y) ja D(Y) - työkirjaan. Mikäli mittaussarjoilla on yhteinen x-akseli (samat x-pisteiden arvot), voit jättää toisen sarakkeista pois ja siirtyä suoraan kohtaan 15.



14. Sarakkeen C:n oletusarvo on Y, joten se pitää muuttaa X:ksi. Valitse sarake C → paina hiiren oikeaa nappia → valitse avautuvasta ponnahdusvalikosta Set As → X.

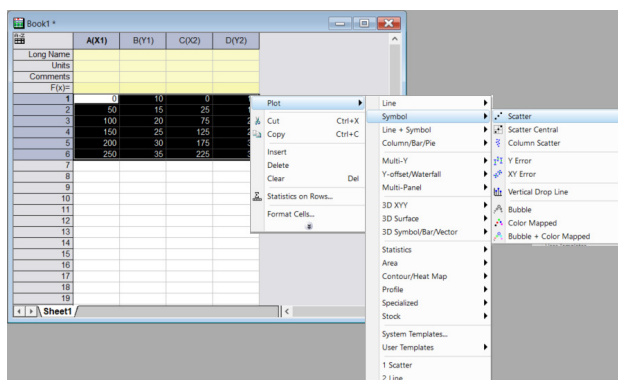


15. Kopioi Tulokset 2 tiedoista aika sarakkeeseen C(X) ja konsentraation käänteisluku sarakkeeseen D(Y). Taulukon tulisi näyttää tältä.

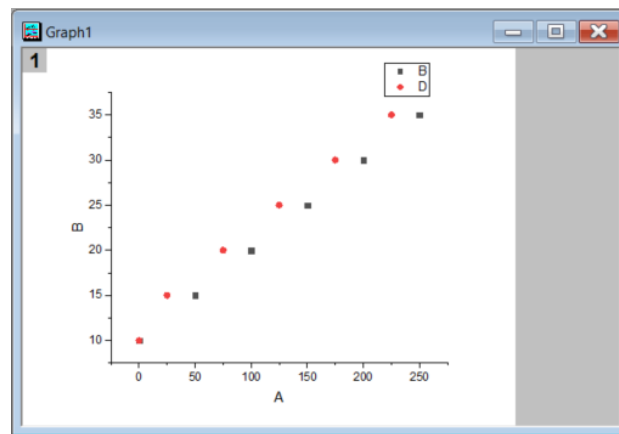


	A(X1)	B(Y1)	C(X2)	D(Y2)
Long Name				
Units				
Comments				
F(x)=				
1	0	10	0	10
2	50	15	25	15
3	100	20	75	20
4	150	25	125	25
5	200	30	175	30
6	250	35	225	35
7				
8				
9				
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				

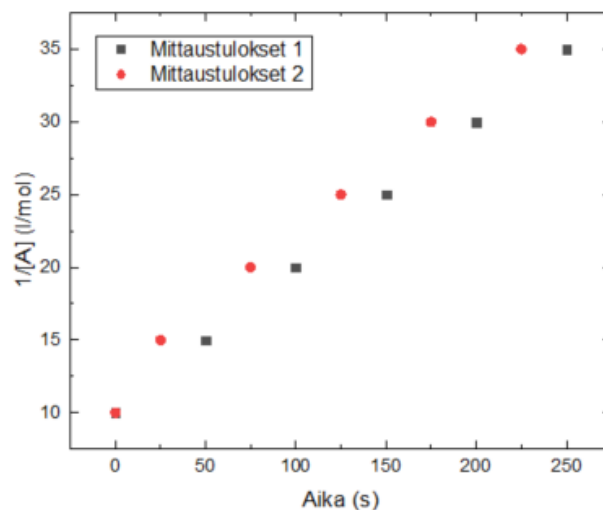
16. Maalaa kaikki arvot sarakkeista A(X1), B(Y1), C(X2) ja D(Y2) ja paina hiiren oikeaa nappia. Valitse Plot → Symbol → Scatter. Saman voit tehdä myös työkalurivin Plot -valikosta.



17. Muodostuva kuvaaja on esitetty alla ja siinä on merkattu mustilla neliöillä Tulosten 1 datapisteitä, kun taas Tulosten 2 datapisteet on esitetty punaisten pallojen avulla. Toistamalla kohdat 12–16 voit lisätä useampia mittausarvoja samaan kuvaajaan.



18. Voit seuraavaksi muokata yllä olevien ohjeiden (kohdat 5-10) mukaan kuvaajasta julkaisukelpoisen. Lopputuloksen pitäisi näyttää tältä:



Kuva 2. Esimerkkikuva OriginPro:lla tehdystä kuvaajasta.

19. Työselostuksessa kuvat tulee numeroida ja niihin tulee lisätä kuvateksti kuvan alapuolelle. Kuvateksti päättyy pisteeseen.

OriginPro on hyvin laaja ohjelmisto, jossa on paljon erilaisia ominaisuuksia. Tässä rajoituttiin vain kuvaajan piirtämisen perusteisiin.

1.2 Kuvaaja Microsoft Excelillä

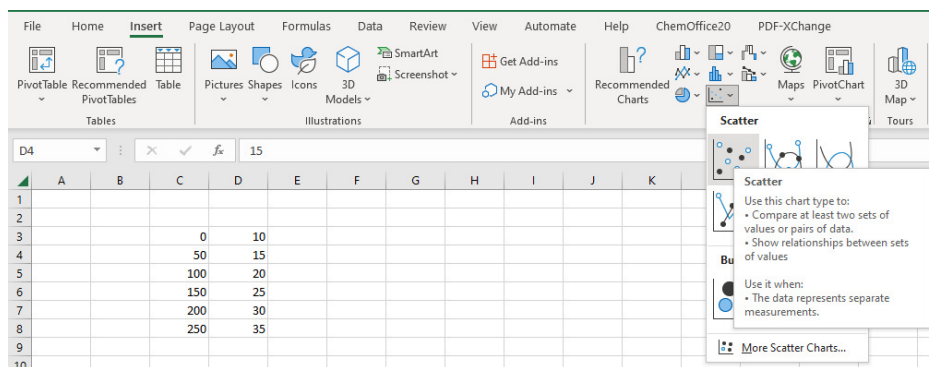
Tässä ohjeessa esitetään kuvaajan tekeminen Office 365 paketin Excel versiolla. Tämä ohje käsittelee vain kuvaajan piirtämisen. Lisäohjeita saa Excelin **Help**-valikosta ja internetistä. Lisäksi Exceliä käsittelevää kirjallisuutta löytyy kirjastoista ja kirjakaupoista.

Office 365 paketin Excel on asennettuna kaikille yliopiston työasemille. Opiskelijat voivat myös asentaa Office ohjelmistot omille koneilleen yliopiston lisenssillä. Huom. selaimessa toimivat Office ohjelmistot eroavat hieman koneelle asennettavista versioista.

1. Käynnistä Excel.
2. Syötä mittaustulokset Excelin laskentataulukkoon. Huomaa, että vierekkäisissä lukupareissa vasen sarake on oletuksena x-akselin arvo ja oikea y-akselin.

	A	B	C	D	E
1					
2					
3			0	10	
4			50	15	
5			100	20	
6			150	25	
7			200	30	
8			250	35	
9					

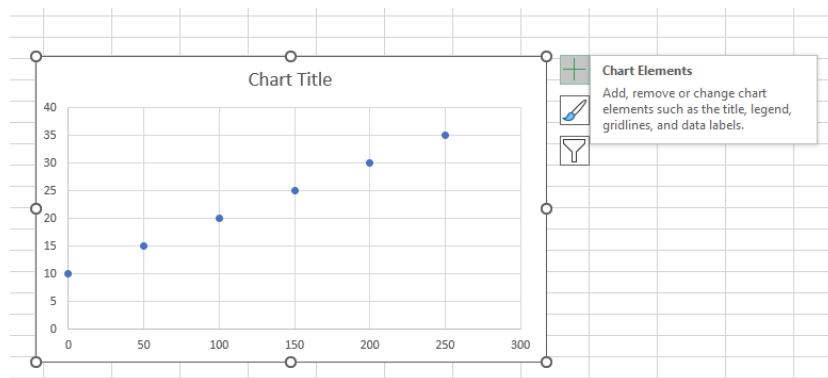
3. Maalaa piirrettävät arvot, valitse **Insert** ja **Scatter** -pudostusvalikosta **Scatter** ilman viivoja.



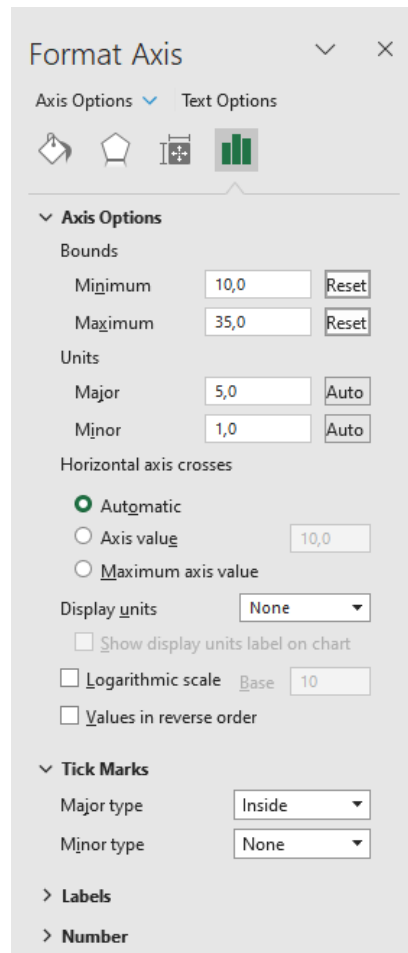
4. Nyt laskentataulukkoon muodostuu muokkaamaton kuvaaja.

5. Kuvaajan muokkaaminen

- Klikkaa kuvaajaa, jolloin kuvaajaan oikeaan yläkulmaan ilmestyy **Chart Elements** ja **Chart Styles** -valikot.



- Akseleiden nimeäminen: Aktivoi **Chart Elements** -valikosta **Axis Titles**, jolloin akseleiden viereen ilmestyy tekstit **Axis Title**. Voit muokata tekstejä kaksoisklikkaamalla. Kirjoita laatikoihin akseleiden otsikot ja käytetyt yksiköt. Muokkaa sekä x- että y-akselin otsikko.
- Muokataan myös muita akseleiden asetuksia. Kaksoisklikkaamalla haluttua akselia Excelin oikeaan laitaan avautuu **Format Axis** -valikko, josta asetukset löytyvät. Korjataan aluksi akseliden alku- ja loppuarvot. Kuvassa ei saa olla alueita, joissa ei ole mitään. **Axis Options** kohtaan voi asettaa halutut alku- ja loppuarvot. Asetetaan x-akselille uusi loppuarvo: **Minimum** → 10,0 ja **Maximum** → 35,0. Vastaavasti y-akselille uudet alku- ja loppuarvot: **Minimum** → 0,0 ja **Maximum** → 260,0. Y-akselin asetukset saat esiin kaksoisklikkaamalla akselia.
- Lisätään molemmille akselleille myös jakovälimerkit valitsemalla **Tick Marks** kohdasta **Major type** → **Inside**



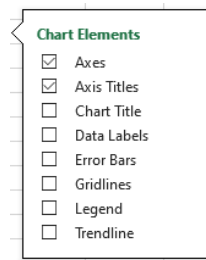
- Muita asetuksia **Format Axis** -valikossa:
 - Major unit ja Minor unit asettaa jakovälimerkit halutulla tiheydellä.
 - Tick Marks muokkaavat jakovälimerkkien esitystapaa.
 - Horizontal/Vertical axis crosses säätää y-akselin paikkaa x-akselilla. Tätä tarvitaan silloin, kun halutaan y-akseli leikkaamaan x-akselin muualla kuin pisteessä $x = 0$.

6. Akselien lukuarvojen fonttikoon muuttaminen.

- Valitse haluttu muotoiltava teksti. Klikkaa haluttua tekstiä esim. x-akselin lukuarvoa. Nyt voit muokata numeroiden arvoja Home-

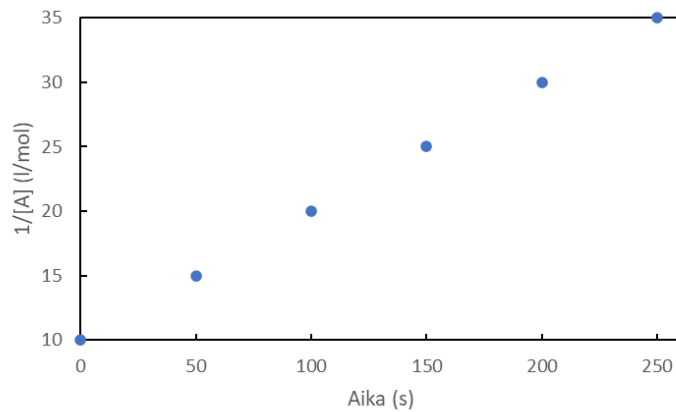
välilehden fonttiasetuksista. Samalla tavalla voit muokata y-akselin arvoja ja akseleiden otsikkotekstejä.

7. Otsikkotekstin ja vaakaviivat saa poistettua kuvasta klikkaamalla kuvaa ja poistamalla **Chart Elements** -valikosta valinnat **Chart Title** ja **Gridlines**.



8. Kuvattujen lukuarvojen symboleita voi muokata kaksoisklikkaamalla symbolia, jolloin avautuu **Format Data Series** -ikkuna. Sen **Marker** -kohdassa voi vaihtaa symbolin tyyliä ja kokoa. **Marker Fill** -kohdassa voi vaihtaa väriä yms. Vastaavasti **Line** -kohdassa voi halutessaan muokata viivojen ominaisuuksia.
9. Akseleiden paksuutta ja väriä voi muokata kaksoisklikkaamalla niitä, jolloin avautuu **Format Axis** -ikkuna. **Line Color** ja **Line Style** -valikoista saa säädettyä akseliden väriä ja leveyttä.
10. Jos kuvaan haluaa akseleiden suuntaiset viivat ylös ja oikealle, niin ne saa klikkaamalla valkoista kuva-aluetta, jolloin avautuu **Format Plot Area** -ikkuna. Viivat saa tuotettua valitsemalla **Border** → **Solid line**. Viivojen ominaisuuksia saa säädettyä samasta valikosta.
11. Kuvatekstejä saa lisättyä, poistettua ja muokattua **Chart Elements** -valikosta, esimerkiksi voit tarvittaessa lisätä **Legend** -tekstin ilmoittamaan eri mittausarvoja.
12. Valmiin kuvan saa siirrettyä tekstinkäsittelyohjelmaan leikkaa-liimaa-menetelmällä (Copy-Paste).
13. Kuvan tallentaminen tiedostoksi (.png) onnistuu klikkaamalla kuvaajaa hiiren oikealla näppäimellä ja valitsemalla **Save as Picture....**

14. Edellä mainittujen muokkausten avulla kuvasta on saatu tämän näköinen.



Kuva 3. Esimerkkikuva Excelillä tehdystä kuvaajasta.

15. Kuvat tulee numeroida ja niihin tulee lisätä kuvateksti kuvan alapuolelle. Kuvateksti päättyy pisteeseen.

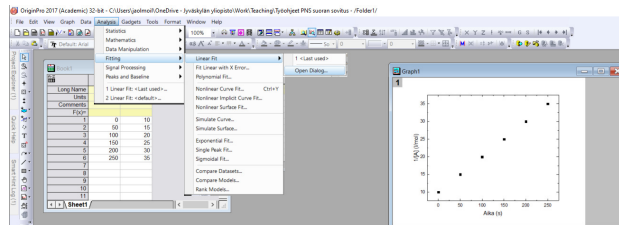
2 Suoran sovitus

Suoran sovitus tehdään useissa laboratoriotöissä lineaarisen tai linearisoidun mittausdatan kulmakertoimen ja leikkauspisteen määrittämiseen. Suoran sovitus onnistuu helposti sekä OriginPro että Excel ohjelmistoilla.

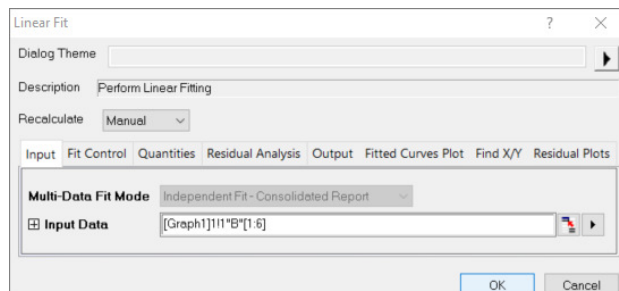
2.1 Suoran sovitus OriginPro:lla

Suoran sovitus tehdään OriginPro 2017 ohjelmassa **Fitting** -työkalulla. Käyme seuraavaksi lävitse pienimmän neliösumman (PNS) suoran sovituksen OriginPro 2017 ohjelmalla. OriginPro 2017 ohjelman avamaaminen ja yksinkertaisen kuvaajan tekeminen on esitetty kappaleessa 1.1., johon voit tarvittaessa palata. Tässä ohjeessa oletetaan, että mittausdata ja kuvaaja on jo valmiina OriginPro 2017 ohjelmistossa.

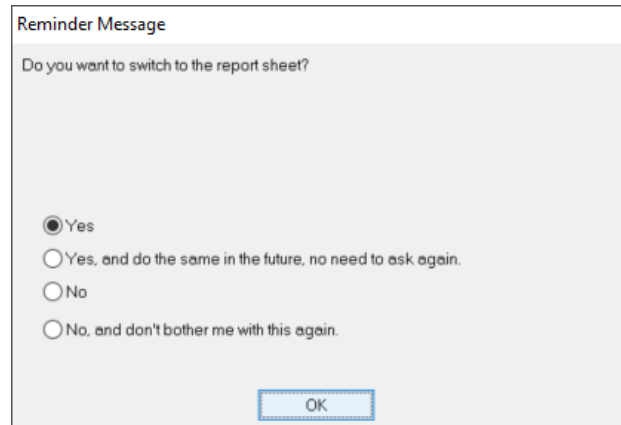
1. Kuvaajan ikkunan ollessa aktiivinen valitse **Analysis** -valikosta **Fitting** → **Linear Fit** → **Open Dialog**.



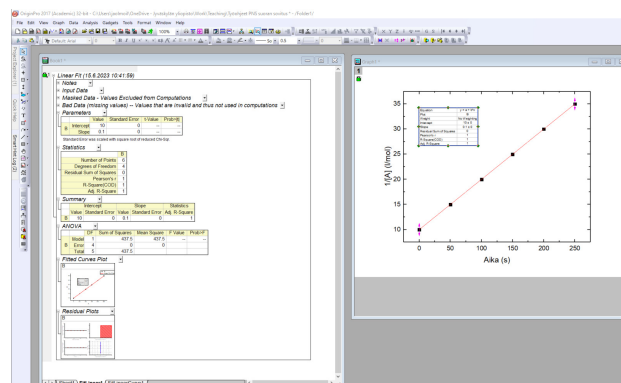
2. Ruutun avautuu **Linear Fit** -ikkuna. Klikkaa ikkunan alalaidassa olevaa **OK** -painiketta.



3. Ruutun avautuu uusi ikkuna, jossa kysytään "Do you want to switch to the report sheet?". Valitse Yes ja paina OK.



4. Tämän jälkeen saat sovituksen tiedot ja arvot virheineen näkyviin Book1-ikkunaan uudelle välilehdelle. Sovituksen perustiedot kuten kulmakerroin ja leikkauspiste sekä niiden virheet tulostuvat myös kuvaajaasi, jossa voit siirtää ne hiirellä parempaan paikkaan kuvassa. Parametrit voi vaihtoehtoisesti poistaa kuvaajasta, mikäli ne ilmoitetaan kuvaajan kuvatekstissä.



5. Valmiin kuvaajan sovituksineen voit tallentaa kappaleessa 1.1 olevien ohjeiden mukaan.

2.2 Suoran sovitus Excelillä

Suoran sovitus onnistuu Excelissä helpoiten käyttämällä Excelin LINEST funktiota. Suomenkielisessä Excelissä funktion nimi on LINREGR, mutta sen käyttö vastaa englanninkielistä. Käytetään esimerkissä kohdassa 1 taulukoitua mittausdataa. Oletuksena on, että mittausdata on jo syötetty Exceliin.

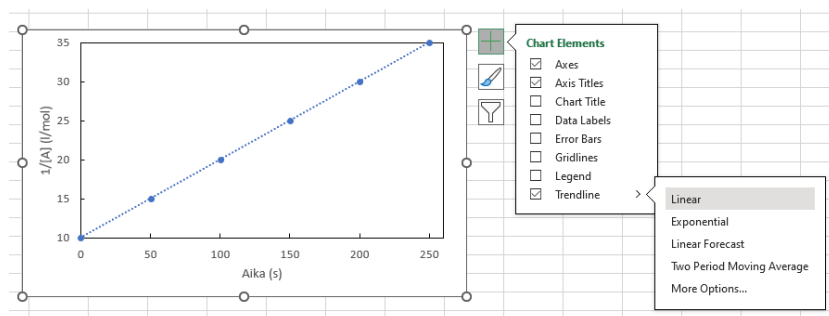
1. Valitse tyhjä solu ja kirjoita siihen =LINREGR(.
2. Maalaa tämän jälkeen y-akselin arvot ($1/[A]$) ja lisää puolipiste ;.
3. Maalaa tämän jälkeen x-akselin arvot (Aika) ja lisää puolipiste ;.
4. Mikäli haluat leikkauspisteen olevan erisuuri nollasta syötä seuraavaksi 1 ja lisää puolipiste ;. Jos taas haluat leikkauspisteen olevan nolla, syötä 1 tilalle 0.
5. Syötä lopuksi toinen 1 ja päättä funktio kaarisulkeella) ja paina Enter.

	C	D	E	F	G	H	I
	Aika (s)	1/[A] (l/mol)					
	0	10			=LINEST(D3:D8;C3:C8;1;1)		
	50	15					
	100	20					
	150	25					
	200	30					
	250	35					

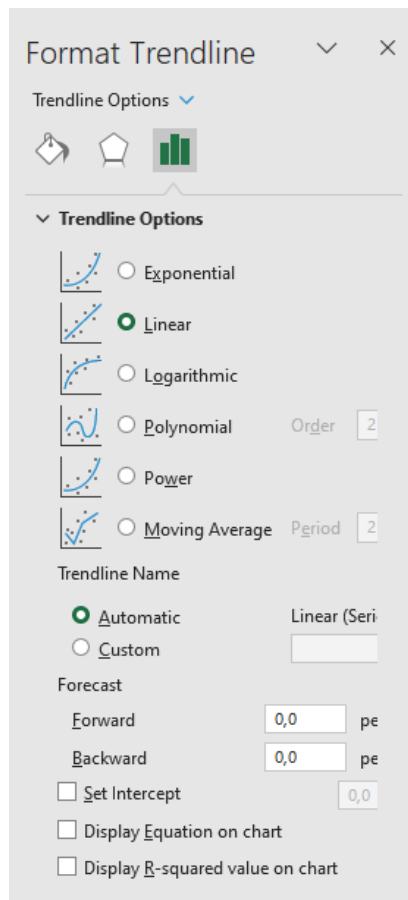
6. Suoransovituksen parametrit ilmestyvät Exceliin muiden statististen parametrien kanssa.

	C	D	E	F	G	H
	Aika (s)	1/[A] (l/mol)				
	0	10			0,1	10
	50	15			6,21E-18	9,4E-16
	100	20			1	1,3E-15
	150	25			2,59E+32	4
	200	30			437,5	6,75E-30
	250	35				

7. Syntyvän taulukon ylimmällä rivillä ovat suoran kulmakerroin (0,1) ja leikkauspiste (10). Näiden alapuolella ovat arvojen vastaavat virheet. Kolmannen rivin ensimmäisessä solussa on ns. R^2 -arvo. Tässä tapauksessa $R^2 = 1$, koska kaikki pisteet osuvat täydellisesti suoralle. Muista parametreistä ei tarvitse välittää.
8. Tarvittaessa suoran voi lisätä myös edellisessä piirrettyyn kuvaajaan. Lisää suoran sovituksen suora aktivoimalla kuvaaja ja valitsemalla **Chart Elements** -valikosta **Trendline** → **Linear**.



9. Piirretyn suoran parametreja voi muokata suoraa kaksoisklikkaamalla avautuvasta **Format Trendline** -valikosta.



10. Suoran yhtälön voi tarvittaessa lisätä kuvaajaan valitsemalla asetuksesta **Display Equation on chart**. Huomaa kuitenkin, että suoransovituksen parametrit virheineen tulee määrittää suoransovituksen kautta yllä kuvatulla tavalla.

3 Taulukot

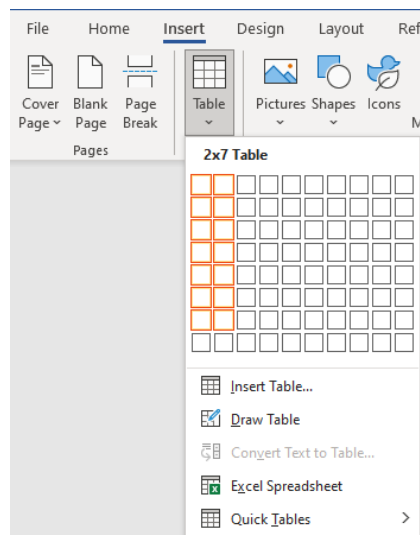
Taulukoiden avulla voidaan esittää helposti ja havainnollisesti numeerista dataa. Taulukoiden tulee olla helposti luettavia. Taulukoissa tulee myös aina näkyä käytetyt yksiköt.

Käytetään seuraavassa esimerkissä aiemmin esitettyä taulukkoa ja muotoilaan se selostukseen sopivaan muotoon.

3.1 Taulukko Wordilla

Taulukon tekeminen Wordilla on helppoa.

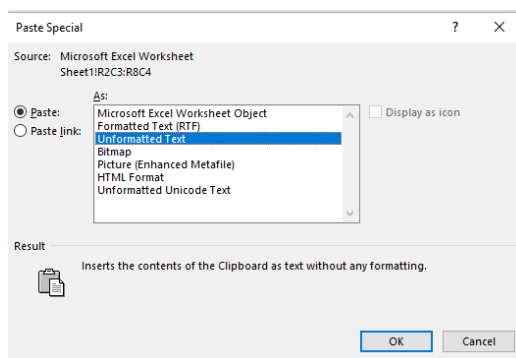
1. **Insert** -välilehdellä valitaan **Table** ja valitaan haluttu taulukon koko. Nyt data on kahdessa sarakkeessa, joissa on molemmissa 6 arvoa. Sen lisäksi tarvitaan vielä otsikkorivi sarakkeille. Tarvitaan siis 2×7 kokoinen taulukko.



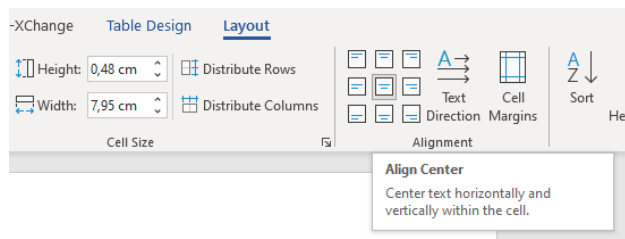
2. Avautuneeseen taulukkopohjaan kirjoitetaan tarvittavat arvot:

Aika (s)	1/[A] (l/mol)
0	10
50	15
100	20
150	25
200	30
250	35

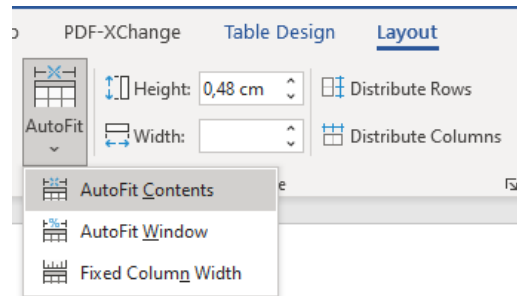
3. Arvot on myös mahdollista kopioida taulukkoon suoraan Excelistä leikkaa-liimaa-menetelmällä (Copy-Paste). Valitse kopioivat arvot Excelistä ja kopioi arvot painamalla Ctrl+C. Valitse tämän jälkeen Word taulukosta saman kokoinen alue, esimerkiksi tässä tapauksessa 2×7 alue mikäli lukuarvojen otsikot kopioidaan myös Excelistä. Tämän jälkeen liitä arvot Word-taulukkoon painamalla Ctrl+V. Mikäli haluat säilyttää Word taulukon alkuperäiset muotoilut (fontti, fonttikoko, ym.), liitä arvot määräten painamalla Ctrl+Alt+V ja valitsemalla **Unformatted Text**.



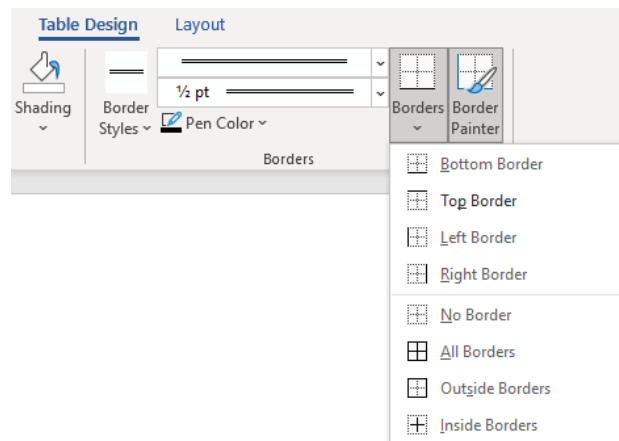
4. Yllä esitetty perustaulukko on vielä täysin ilman muotoiluja, eikä näytä erityisen hyvältä. Ensimmäiseksi keskitetään tekstit. Maalataan taulukko (joko hiirellä vasen nappi pohjassa tai klikkaamalla taulukon vasemman yläkulman nuolimerkkiä), jolloin yläpalkkiin ilmestyy **Layout**-välilehti. Keskitetään teksti klikkaamalla **Align Center**-painikkeesta.



5. Samalla voit sovittaa taulukon koon sen sisällön mukaan: **Layout** -välilehti ja **AutoFit** → **AutoFit Contents**.

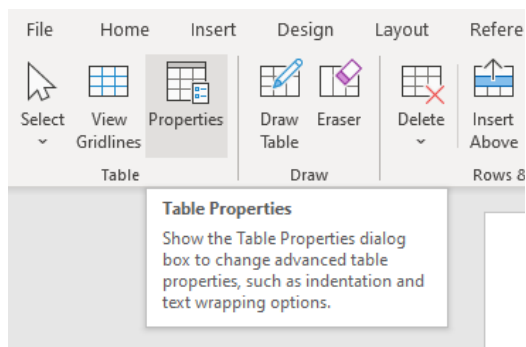


6. Nyt taulukon teksti on keskitetty ja taulukko on järkevän kokoinen. Taulukon kokoa ja sarakkeiden leveyksiä voi muokata hiirellä vetämällä tai **Layout** -välilehden **Height**- ja **Width** -arvoilla.
7. Poistetaan turhat viivat taulukosta. Normaalisti taulukossa on vaakaviiva ylimpänä, seuraavaksi on otsikkorivi, jonka alla on vaakaviiva. Taulukon päättää alimman rivin alapuolinen vaakaviiva. Taulukon ulkonäköä voi vaihtaa **Table Design** -välilehden valmiiden taulukkotyylien mukaan (**Table Styles**) tai muokkaamalla itse. Selkeä taulukko ei tarvitse mitään ylimääräistä. **Table Design** -välilehden **Borders** -valikon avulla voi säätää taulukon viivoja.



8. Taulukon tekstin fonttia, fonttikokoa ja tyyliä voi vaihtaa **Home** -välilehden asetuksista. Valitse ensin muokattava teksti hiirellä ennen asetusten vaihtamista.

9. Taulukkoa voi siirtää raahaamalla sitä vasemman yläkulman nuoli-merkistä. Taulukon sijoittumista suhteessa tekstiin (**Alignment** ja **Text wrapping**) voi myös säätää **Layout** -välilehden **Properties** -valikosta.



10. Tässä esimerkki yksinkertaisesta hyvin muotoillusta taulukosta.

Taulukko 1. Kuvaus taulukon sisällöstä

Aika (s)	1/[A] (l/mol)
0	10
50	15
100	20
150	25
200	30
250	35

11. Taulukot tulee numeroida ja niihin tulee lisätä taulukko teksti taulukon yläpuolelle. Taulukkoteksti ei pääty pisteeseen.

4 Matemaattiset kaavat

Tässä osiossa käydään läpi kaavan kirjoittamisen, kursivoinnin ja numeroinnin periaatteet Wordin kaavaeditorilla. Matemaattiset kaavat tulee kirjoittaa selkeästi ja ne tulee pääsääntöisesti keskittää sekä numeroida. Kaavan numerointi tulee kaavariville oikeaan reunaan kaarisulkeiden sisään. Huomaa kuitenkin, että laskuesimerkkejä ja sijoituksia ei tule numeroida.

4.1 Kaavojen ja muuttujien kursivointi

Kaavojen ja muuttujien kursivointiin tulee kiinnittää erityistä huomiota. Kaikki muuttujat, esimerkiksi E , V ja p , ja kemialliset vakiot, kuten R ja F tulee esittää kursivoidulla eli vinolla kirjasimella yhtälöissä, tekstissä, kuvajissa ja taulukoissa. Kuitenkin tekstimuotoiset alaindeksit (esimerkiksi lähtöaineet ja tuotteet), yksiköt (esimerkiksi kJ, K, mol ja Pa), kemialliset kaavat (esimerkiksi NaOH, H₂SO₄ ja Na⁺), logaritmimerkinnät (log ja ln) ja muut matemaattiset operaattorit esitetään normaalilla kirjasimella. Tämän lisäksi eräitä vakiintuneita merkintöjä, kuten pH ja pOH ei myöskään kursivoida.

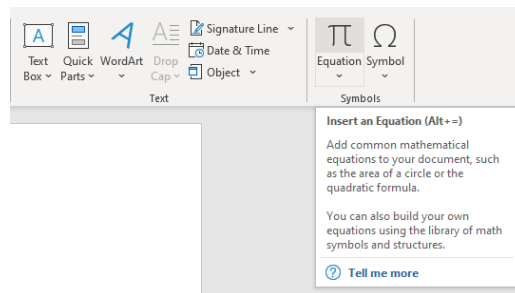
Kaavan kirjoittamista selkeytetään seuraavan esimerkin avulla, jossa kaava on muotoa $\ln K = -\frac{\Delta H_{\text{rxn}}^{\circ}}{R} \left(\frac{1}{T}\right) + \frac{\Delta S_{\text{rxn}}^{\circ}}{R}$.

Kaavassa kaikki muuttujat on kursivoitu, mutta tekstimuotoiset alaindeksit (rxn = reaction) sekä logaritmimerkintä (ln) on esitetty normaalilla pystytekstillä. Mikäli lauseke sisältää yksiköitä ja numeroita, myös ne esitetään pystytekstinä. Esimerkiksi $\underbrace{\Delta H_{\text{rxn}}^{\circ}}_{\text{muuttuja}} = 2500 \underbrace{\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}}_{\text{yksikkö}}$

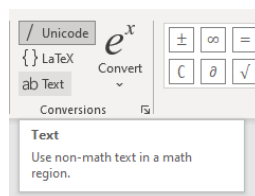
4.2 Kaavojen kirjoittaminen ja numerointi Wordilla

Wordilla kaavojen tekeminen onnistuu kaavaeditorilla. Myös kaavojen numerointi onnistuu vaivatta seuraavien ohjeiden mukaisesti.

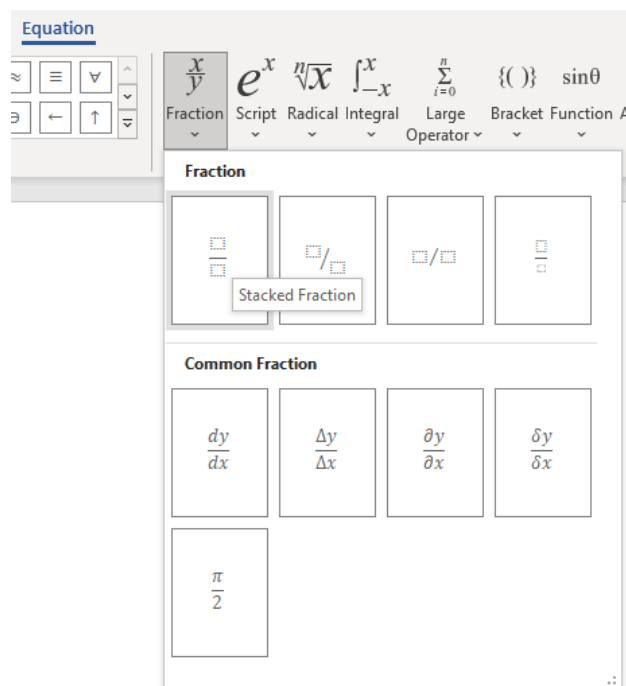
1. Avataan Wordin kaavaeditori **Insert**-välilehdellä klikkaamalla **Equation**-painiketta.



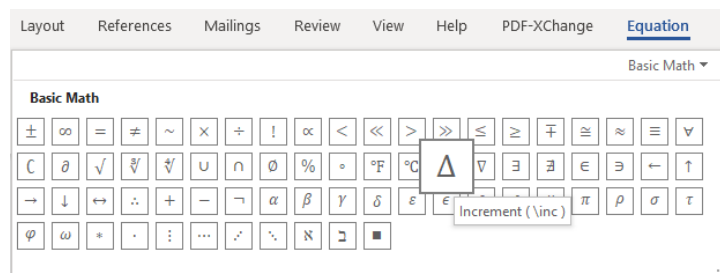
2. Kirjoitetaan kappaleen alussa esitetty esimerkkikaava. Seuraavissa ohjeissa ollaan **Equation**-valikossa, ellei toisin mainita. Ympäristön saa aktivoitua klikkaamalla **Insert**-välilehden **Equation**-painiketta.
3. Kirjoitetaan ensiksi $\ln K$. Huomaa, että $\ln$ on pystyttekstiä ja K on kursivilla. Kaavaeditori tekee automaattisesti kaikista kursivista $\ln$ -tekstin saat normaaliksi pystyttekstiksi maalaamalla sen ja klikkaamalla **Text**-painiketta.



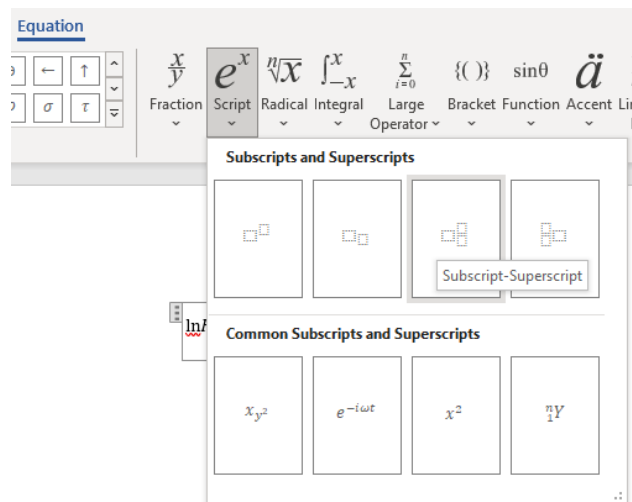
4. Kirjoitetaan yhtäsuuruusmerkin jälkeinen murtolauseke. Lisää ensin miinusmerkki (-) näppäimistöstä ja valitse tämän jälkeen **Fraction**-pudotusvalikosta oikeanlainen murtolausekkeen muotoilu.



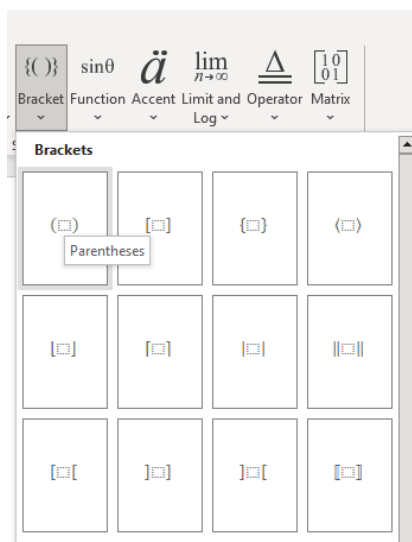
5. Ylempään laatikkoon kirjoitetaan jakoviivan yläpuolinen asia.
6. Iso delta, Δ , löytyy Symbols -valikon Basic Math -osiosta. Valikon saa laajennettua klikkaamalla ensin valikon oikean laidan alaspäin osoittavaa nuolenkärkeä.



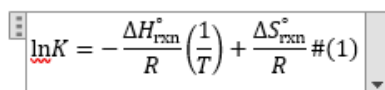
7. Seuraavaksi kirjoitetaan H , jossa on sekä ylä- että alaindeksi. Valitaan ensiksi Script -valikosta merkkialusta, joka mahdollistaa ylä- ja alaindeksin lisäämisen.



8. Kirjoitetaan isoon ruutuun H (automaattisesti kursivi), alaindeksin laatikkoon rxn ja yläindeksin laatikkoon valitaan **Basic Math**-valikosta asteen merkki $^\circ$. Huomaa, että esimerkissä teksti rxn on normaalia pystytekstiä. Sellaiseksi sen saa maalaamalla tekstin ja klikkaamalla **ab Text**-painiketta.
9. Viimeisenä lisätään viivan alle R .
10. Seuraavaksi lisätään suluissa oleva murtolauseke. Valitaan **Bracket**-valikosta kaarisulkeet. Nämä sulkeet skaalautuvat sisällön mukaan toisin kuin näppäimistön sulkumerkit.



11. Valitaan sulkujen sisään murtolauseke ja kirjoitetaan siihen tarvittavat muuttujat.
12. Lisätään tämän perään plusmerkki näppäimistöltä ja kirjoitetaan jällellimäinen termi käyttämällä edellä opittuja menetelmiä.
13. Ennen poistumista kaavaeditorista, kirjoitetaan kaavan loppuun #(1), jossa numero viittaa kaavan numeroon. #-merkki ilmoittaa kaavaeditorille, että merkin jälkeiset asiat viittavat kaavan numerointiin.



$$\ln K = -\frac{\Delta H_{\text{rxn}}^{\circ}}{R} \left(\frac{1}{T} \right) + \frac{\Delta S_{\text{rxn}}^{\circ}}{R} \# (1)$$

14. Painetaan tämän jälkeen Enter ja kaavaeditori numeroi ja keskittää kaavan automaattisesti.

$$\ln K = -\frac{\Delta H_{\text{rxn}}^{\circ}}{R} \left(\frac{1}{T} \right) + \frac{\Delta S_{\text{rxn}}^{\circ}}{R} \quad (1)$$

15. Kaavan numerointia voi muuttaa jähkikäteen maalaamalla sulkeiden sisällä oleva numero ja syöttämällä uusi.

5 Numeeristen tulosten esittäminen

Kaikki kokeelliset mittaukset sisältävät epätarkkuutta, jolloin lopputulosten arvot eivät ole absoluuttisia. Tulosten tarkkuus riippuu muun muassa käytetystä menetelmästä, analyysistä, laitteista ja tekijästä. Virhelähteiden tunnistaminen ja lopputuloksen epätarkkuuden määrittäminen ovat keskeinen osa kvantitatiivista analyysiä.

5.1 Virhelähteet ja virheiden arvioiminen

Mittavälineissä usein ilmoitetaan mittaustarkkuus, joka tulee kirjata ylös ja huomioida lopputuloksissa. Esimerkiksi mittapullossa voi olla merkintä “(50 ± 0,08) ml, In 20°C”, joka tarkoittaa mittapullon tilavuuden olevan välillä 49,92–50,08 ml nesteen ja pullon lämpötilan ollessa 20°C. Tämän lisäksi laitteilla ja eri menetelmillä on omat tarkkuutensa eli kuinka lähelle todellista tulosta voidaan päästä tietyissä olosuhteissa (konsentraatio, lämpötila).

Useissa laboratoriotöissä lopputulos saadaan suoran sovituksen tai usean mittauksen keskiarvon kautta. Tällöin yksittäisten mittavälineiden virheitä ei huomioida, koska suoran sovitus tai keskiarvo ottaa näiden epätarkkuudet jo huomioon. Suoran sovitus tuottaa automaattisesti suoran sovituksen parametrien, kulmakerroin ja leikkauspiste, virheet (osio 2). Keskiarvona määritetyn tuloksen virheenä tulee käyttää keskiarvon keskivirhettä $\sigma_{\bar{x}}$. Esimerkiksi jos tulos x mitattiin N kertaa, ilmoitetaan lopputuloksena mittausten keskiarvo $\bar{x}$ ja virheenä keskiarvon keskivirhe $\sigma_{\bar{x}}$. Tulokset voidaan laskea seuraavien yhtälöiden avulla:

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (1)$$

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{N - 1}} \quad (2)$$

$$\sigma_{\bar{x}} = \frac{\sigma_x}{\sqrt{N}}. \quad (3)$$

Yhtälöissä (1)-(3) N on mittausten määrä, x_i yksittäisen mittauksen tulos ja σ_x on keskihajonta. Keskiarvon ja keskihajonnan voi laskea myös käyttämällä Excelin 'KESKIARVO' (engl. 'AVERAGE') ja 'KESKIHAJONTA.S' (engl. 'STDEV.S') -funktioita. Keskiarvon keskivirheen laskemiseen tarvittavan neliöjuuren saa laskettua Excelin 'NELIÖJUURI' (engl. 'SQRT')-funktioilla. Ohjeita Excelin funktioiden käyttöön voi katsoa Excelin *Help* -valikosta funktion nimellä.

Mikäli lopputulos määritetään epäsuorasti usean eri parametrin avulla, parametrien epätarkkuuksien yhteisvaikutusta lopputulokseen voidaan arvioida virheen etenemislain avulla. Virheen etenemislaki voidaan yleisesti esittää muodossa:

$$\delta f = \sqrt{\sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \delta x_i \right)^2}, \quad (4)$$

missä δf on epäsuorasti määritetyn tuloksen f virhe, $\partial f / \partial x_i$ yhtälön f osittaisderivaatta parametrin x_i suhteen ja δx_i parametrin x_i virhe. Esimerkiksi suorakaiteen, jonka sivujen pituudet ovat a ja b ja niitä vastaavat virheet δa ja δb , pinta-ala voidaan laskea yhtälöllä $A = a \cdot b$, jolloin sitä vastaava virhe yhtälön (4) mukaisesti on:

$$\delta A = \sqrt{\left(\frac{\partial A}{\partial a} \delta a \right)^2 + \left(\frac{\partial A}{\partial b} \delta b \right)^2} = \sqrt{(b \cdot \delta a)^2 + (a \cdot \delta b)^2} \quad (5)$$

5.2 Tulosten esitystarkkuus ja pyöristäminen

Välitulokset ja muut numeeriset arvot, joiden virhettä ei tarkastella, ilmoitetaan yhtä monella merkitsevällä numerolla kuin laskun tai mittauksen epätarkimmassa arvossa on käytetty. Tämän vuoksi lukujen asiayhteyteen tulee kiinnittää huomiota. Esimerkiksi jos ohjeessa on kerrottu työssä käytettävän 200 millilitran mittapulloja, joiden tarkkuus on $(200,00 \pm 0,01)$ ml, tällöin luvussa 200,00 on viisi merkitsevää numeroa. Tulosta ilmoitettaessa tulee muistaa, että desimaaliluvun alussa olevat nollat tai kokonaislu-

vun lopussa olevat nollat eivät ole merkitseviä. Esimerkiksi luvuissa 12340, 123400000, 0,001234 ja 0,0000001234 on neljä merkitsevää numeroa, mutta luvussa 1234,00 on kuusi merkitsevää numeroa. Suomenkielisissä teksteissä desimaalilukujen erottimena käytetään pilkkua kun taas englanninkielisissä teksteissä erottimena käytetään pistettä.

Mikäli lopputuloksen virhe tunnetaan, tuloksen esitystarkkuus määräytyy virheen suuruudesta. Kemian ja fysiikan laboratoriossa vakiintunut tulosten ilmoitustarkkuuskäytäntö on viidentoista yksikön sääntö, jonka mukaan virhe voi olla korkeintaan 15-yksikköä. Tulos ilmoitetaan aina samalla tarkkuudella virheen kanssa. Virheen pyöristämiseen sovelletaan seuraavia sääntöjä:

Sääntö 1: Virhe pyöristetään yhden merkitsevän numeron tarkkuuteen, ja varsinainen mittaustulos pyöristetään samaan tarkkuuteen. Jos virhe pyöristyy esim. sadasosan tarkkuuteen, tuloskin pyöristetään sadasosan tarkkuuteen, jne. Tämä sääntö johtaa joissakin tilanteissa varsin rankkoihin pyöristyksiin. Tämän vuoksi kyseistä sääntöä on lievennetty niin kutsutulla 15-yksikön säännöllä.

Sääntö 2: Virhe pyöristetään aina ylöspäin, tulos normaalisti.

15-yksikön sääntö: Seuraavissa kahdessa tapauksessa virheen ilmoittamiseen käytetään kahden merkitsevän numeron tarkkuutta:

1. Virheen ensimmäinen merkitsevä numero on 1 ja toinen korkeintaan 4 (tai 5 ja perässä vain nollia).
2. Virheen ensimmäinen merkitsevä numero on 9 ja jokin sitä seuraavista numeroista on suurempi kuin nolla.

Kun virhe ilmoitetaan 15-yksikön säännön mukaan, virhe on korkeintaan 15 tuloksen vähiten merkitsevää desimaalia. 15-yksikön säännön mukaan virhe voi siis olla enintään 0,015, 0,15, 1,5 jne. Heti, jos virheeksi saadaan esimerkiksi 0,152, pyöristetään sekä lopputulos että virhe kymmenysoisien tarkkuuteen. Kohdan 2) tapauksissa virhe pyöristettynä on esim. 0,10, 0,010 jne.

Esimerkkejä:

$$131,8 \pm 7,6 \rightarrow 132 \pm 8 \text{ (säännöt 1 ja 2)}$$

$$131 \pm 17 \rightarrow 130 \pm 20 \text{ (säännöt 1 ja 2)}$$

$$31628 \pm 1273 \rightarrow 31600 \pm 1300 \text{ (sääntö 2 ja 15-yksikön sääntö)}$$

$$3,1678 \pm 0,0873 \rightarrow 3,17 \pm 0,09 \text{ (säännöt 1 ja 2)}$$

$$3,1678 \pm 0,0973 \rightarrow 3,17 \pm 0,10 \text{ (sääntö 2 ja 15-yksikön sääntö)}$$

$$3,1678 \pm 0,1073 \rightarrow 3,17 \pm 0,11 \text{ (sääntö 2 ja 15-yksikön sääntö)}$$

$$3,1678 \pm 0,1573 \rightarrow 3,2 \pm 0,2 \text{ (säännöt 1 ja 2)}$$

$$1,161 \cdot 10^{-18} \pm 4,9 \cdot 10^{-20} \rightarrow (1,16 \pm 0,05) \cdot 10^{-18} \text{ (säännöt 1 ja 2)}$$

Kuten esimerkeistä havaitaan, tulosten pyöristämiseen käytetään siis aina sääntöä 2 ja joko sääntöä 1 tai 15-yksikön sääntöä.

6 Kemialliset kaavat ja reaktioyhtälöt

Kemialliset kaavat ja reaktioyhtälöt kertovat mm. mistä yhdisteestä on kyse tai mitä kemiallisessa reaktiossa tapahtuu. Yleisesti kemiallisista yhdisteistä tulee mainita yhdisteen nimi ja rakennekaava. Esimerkiksi metaani, CH_4 . Myös triviaalinimiä voi käyttää silloin, kun ne ovat yleisesti tunnettuja kuten aseton (C₃H₆O, 2-propanoni, dimetyyliketoni)

Erityisen tärkeää kemiallisten kaavojen kirjoittamisessa on selkeys. Veden kemiallinen kaava ei ole H₂O vaan H_2O . Ylä- ja alaindeksien käyttö on tärkeää selkeyden vuoksi. Esimerkiksi ammoniumioni, NH_4^+ , on huomattavan vaikeaselkoinen, jos se esitettäisiin muodossa NH_4+ .

Usein kemiallisen kaavan lisäksi on tarpeen lisätä myös merkintä aineen olomuodosta (faasista). Olomuoto merkitään kemiallisen kaavan perään suluissa *kursiivilla*:

Faasi	Faasimerkintä	Esimerkki
Kiinteä	(<i>s</i>)	$\text{H}_2\text{O} (s)$
Neste	(<i>l</i>)	$\text{H}_2\text{O} (l)$
Kaasu	(<i>g</i>)	$\text{H}_2\text{O} (g)$

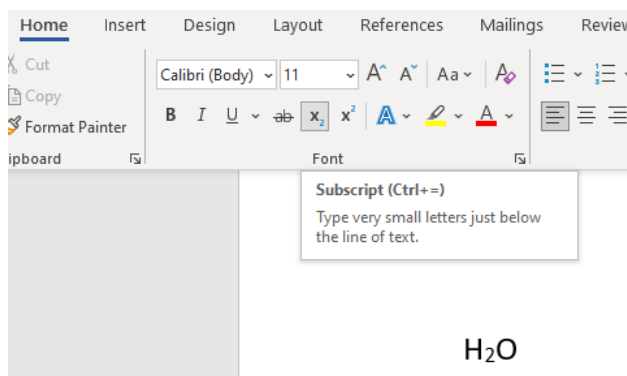
Selkeyden vuoksi kemiallisen kaavan ja faasimerkinnän väliin voi kirjoittaa pienen välin (pienempi kuin välilyönti!).

Tärkeää on huomata, että kemiallisissa kaavoissa aineiden kemialliset merkit kirjoitetaan pystytekstinä (ei *kursiivilla*). Tämä seikka tulee vastaan tekstinkäsittelyohjelmien kaavaeditoreja käytettäessä.

Kemialliset reaktiot esitetään usein samalla tavalla kuin matemaattiset kaavat: keskitettyinä ja numeroituina. Reaktioyhtälöiden numeroinnissa käytetään tavallisten numeroiden lisänä kirjainta R, esim. R1, R2, R3, jne. Tällöin numerointi ei sotke matemaattisten kaavojen numerointia.

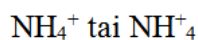
6.1 Kemiaalliset kaavat ja reaktioyhtälöt Wordissä

Yksittäisen molekyylin kirjoittaminen voidaan tehdä helposti käyttäen alaindeksejä Subscript ja yläindeksejä Superscript:



Kun molekyylin kaavassa on sekä ylä- että alaindeksejä, useimmiten on parempi käyttää kaavaeditoria. Tässä ammoniumioni kirjoitettuna Wordilla eri tavoin:

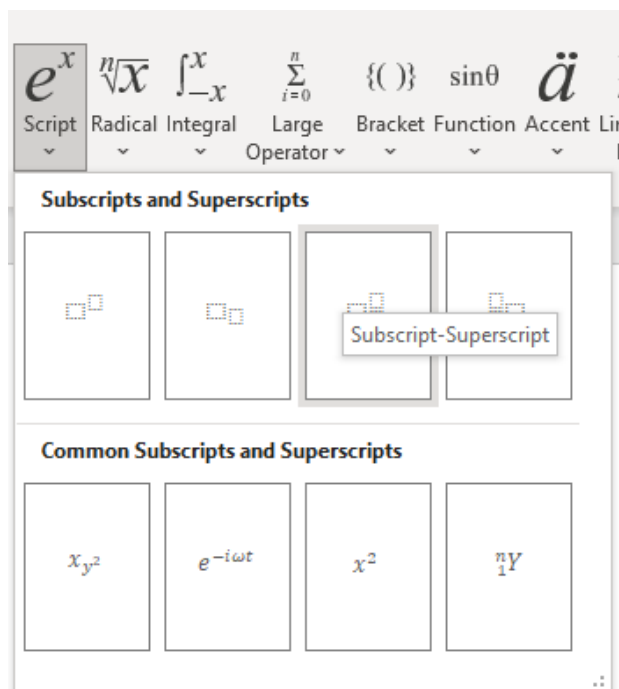
Ammoniumioni ala- ja yläindeksejä käyttäen:



Ammoniumioni kaavaeditorilla:



Ylä- ja alaindeksejä käyttämällä + ja 4 eivät sijoitu oikein. Kaavaeditorilla + ja 4 saadaan sijoitettua oikein kemiallisiin merkkeihin nähden käyttäen Script -valikon asetteluja:



Reaktioyhtälöiden kirjoittamisessa kannattaa käyttää kaavaeditoria. Reaktioyhtälöt voidaan kirjoittaa matemaattisten kaavojen kirjoittamiseen annettujen ohjeiden pohjalta. Ainoastaan numerointi eroaa tässä tapauksessa. Esimerkiksi:



Kaavaeditorista löytyy myös nuolia, joiden ylä- ja/tai alapuolelle voi kirjoittaa tekstiä. Myös tasapainonnuolen ($\rightleftharpoons$) lisääminen onnistuu kaavaeditorilla.

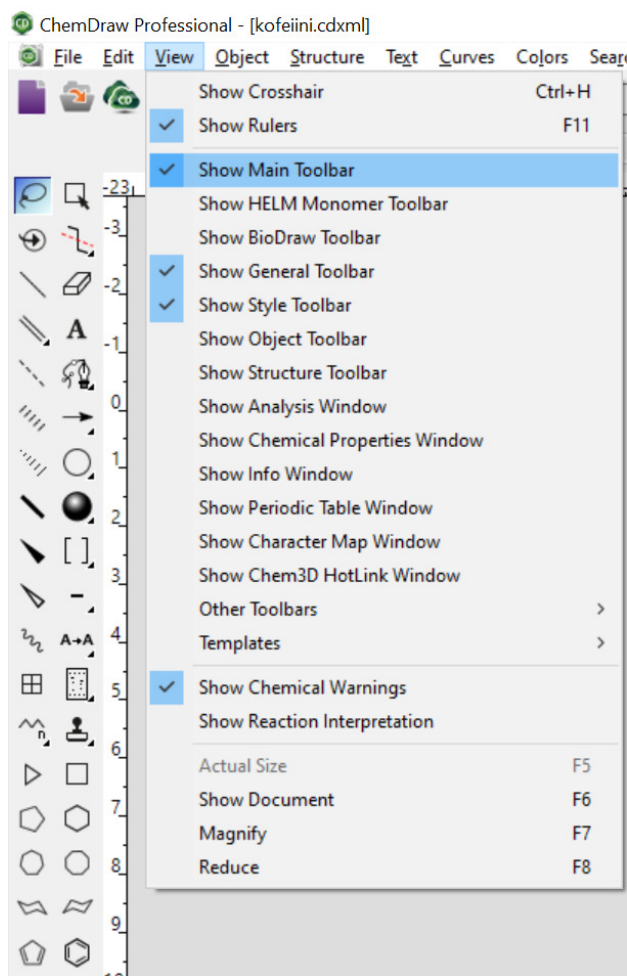


7 Kemiaalliset rakennekaavat

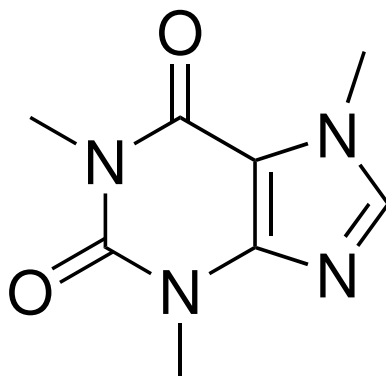
Kemiaallisten rakennekaavojen piirtäminen on yksi keskeinen kemistin taito. Tyypillisesti yhdisteistä esitetään rakennekaavat. Katso vaikka kemian oppikirjoja tai muita kemian julkaisuja. Opintojen edistyessä myös kemian tietokannat tulevat tutuiksi. Monet näistä tietokannoista mahdollistavat tehokkaan haun rakennekaavojen avulla. Näistä syistä rakennekaavojen piirtäminen on hyvä opiskella mahdollisimman aikaisessa vaiheessa opintoja. Tässä ohjeessa käydään läpi lyhyesti perusominaisuudet ChemOffice 2020 -ohjelmistopakettin ChemDraw-ohjelmistosta. ChemOffice on yleinen teollisuudessa käytetty ohjelmisto.

7.1 Rakennekaava ChemDraw'lla

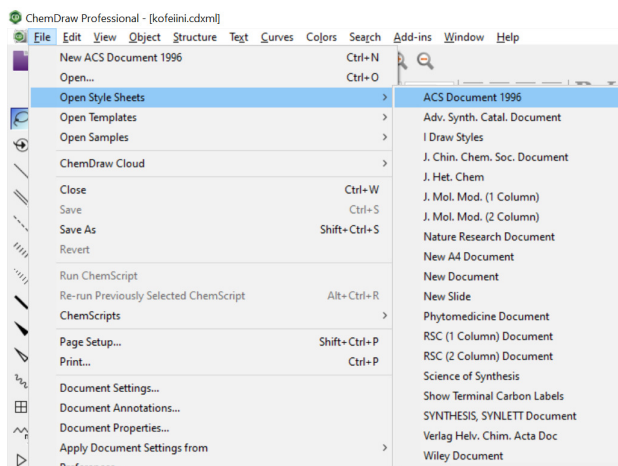
Avaa ChemDraw. Asetuksista riippuen ohjelmaan avautuu useita työkalurivejä ja valikoita. **View** -valikosta voi avata ja sulkea halutut valikot ja työkalut. Tärkein työkaluvalikko on vasemmalta löytyvä päätyökaluvalikko, joka avautuu yleensä ohjelman avautuessa. Tarvitessaan sen saa auki **View** -valikosta.



Piirretään esimerkissä kofeiinin ($C_8H_{10}N_4O_2$) rakennekaava:

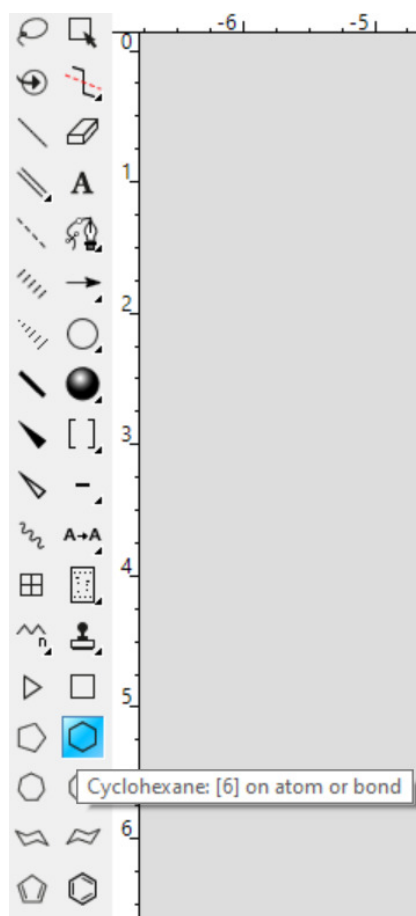


1. Valitaan ensimmäiseksi oikea tyyli: **View** → **Open Style Sheets** → **ACS Document 1996**.



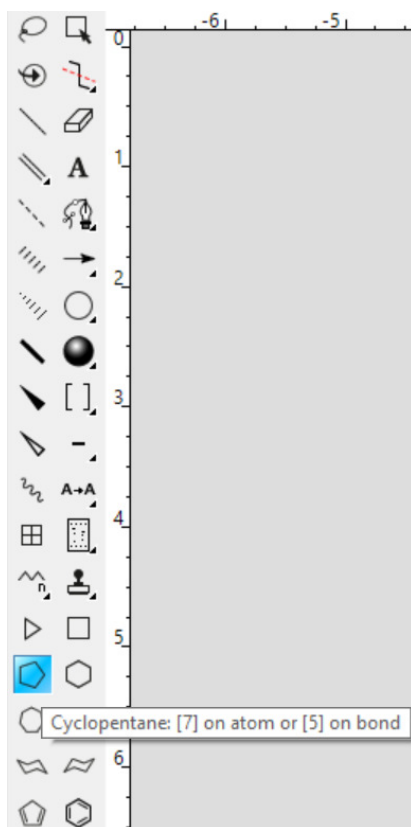
Eri julkaisusarjat käyttävät erilaisia tyylejä rakennekaavojen esityksessä. Yksi yleisimmin käytetyistä tyyleistä on esimerkiksi valittu ACS Document 1996. Tätä tyyliä käytetään esimerkiksi kaikissa ACS:n julkaisusarjoissa. Tyyliä käyttämällä yhdisteistä saadaan suoraan haluttu näköisiä eikä kaikki asetuksia tarvitse tällöin säätää itse.

2. Valitaan sykloheksaanirengas **Tools** -ikkunasta



ja klikataan työalustaa sykloheksaanin lisäämiseksi haluttuun kohtaan.

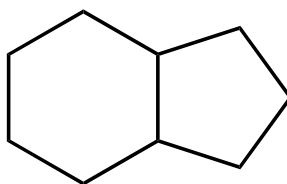
3. Lisätään seuraavaksi syklopentaanirengas.



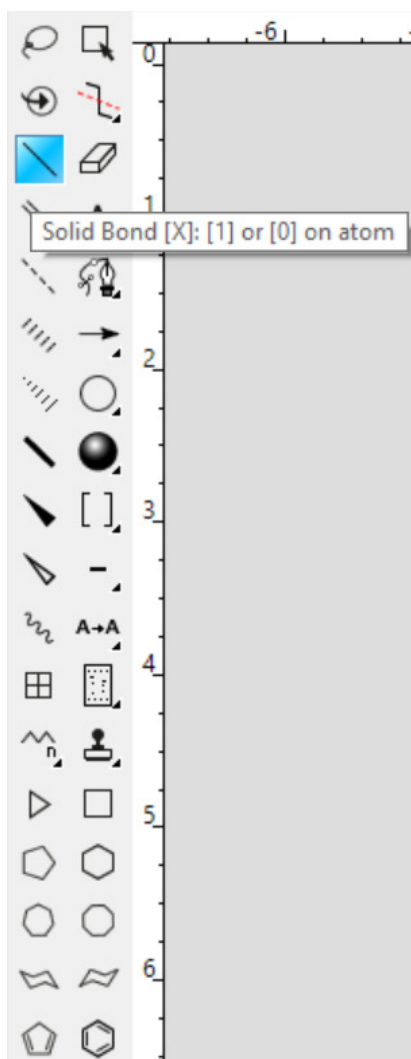
Valitse syklopentaanirangas valikosta



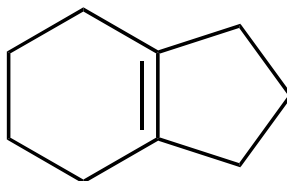
ja vie kursori kohtaan, johon syklopentaani halutaan liittää (ko. sidos korostuu sinisellä). Klikkaa hiiren vasenta näppäintä liittääksesi syklopentaanirenkaan kiinni sykloheksaanirenkaasaan.



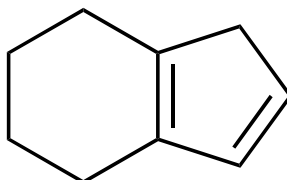
4. Lisätään kaksoissidos sidokseen, johon syklopentaani liitettiin. Valitse Solid Bond



ja vie kursori haluttuun kohtaan (sininen palkki ilmestyy, kun olet oikeassa kohdassa) ja liitä sidos klikkaamalla hiiren vasenta nappia.

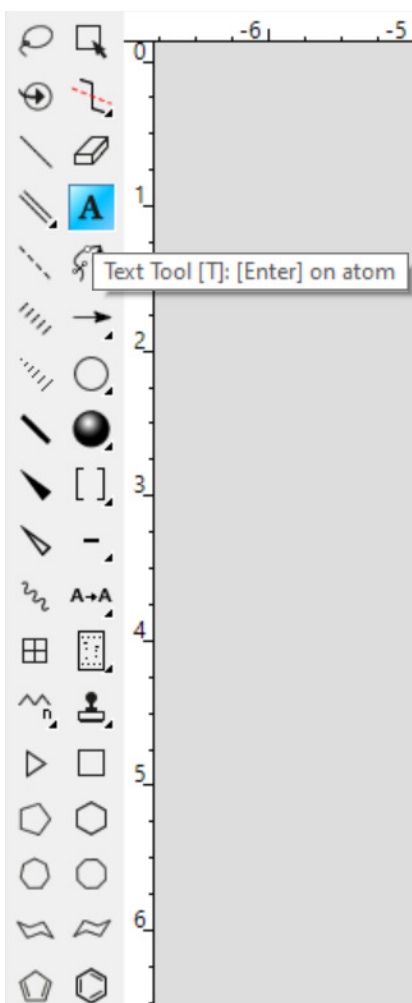


5. Lisää samalla tavalla toinen kaksoissidos syklopentaanirenkaaseen.

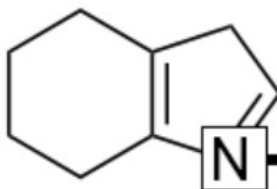


Huomaa kuinka ChemDraw korjaa automaattisesti toisen kaksoissidoksen paikan. Se oli alunperin sykloheksaanirenkaan sisällä, nyt se on syklopentaanirenkaan sisällä.

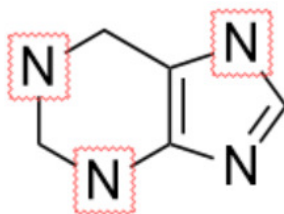
6. Korvataan tarvittavat hiilet typpi-atomeilla. Valitse **Text** -työkalu



Vie kursori korvattavan hiilen päälle (sininen korostusväri ilmestyy) ja klikkaa hiirellä. Kirjoita N.

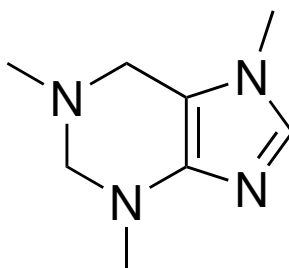


7. Lisää samalla tavalla loput typpiatomit.

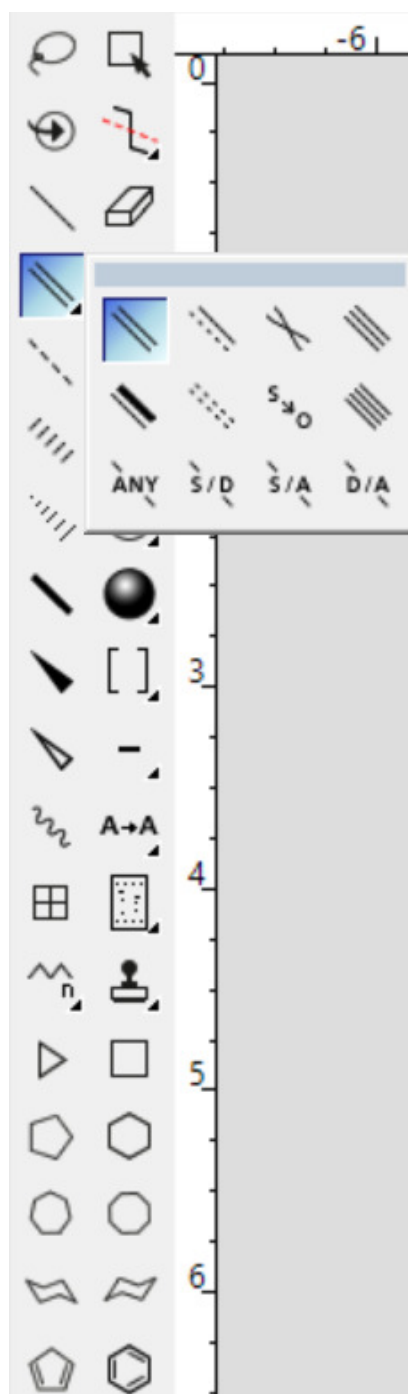


Huomaa, että typpiatomit, jotka osallistuvat vain kahteen sidokseen ovat ympäröityinä punaisella neliöllä, koska valenssielektronirakenne ei vastaa sidosten lukumäärää.

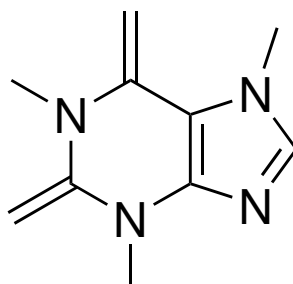
8. Lisää punaisilla korostettuihin typpiatomeihin CH_3 -ryhmät. Valitse **Solid Bond** (katso kohta 4) ja klikkaa typpiatomeja.



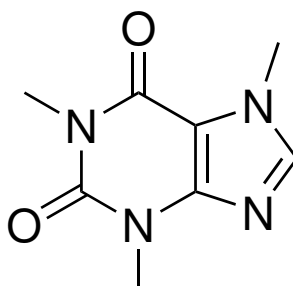
9. Lisää kaksoisidokset, joihin happi liittyy. Valitse **Multiple Bonds** -työkalu. Huomaa, että **Multiple Bonds** -valikossa on useita erilaisia sidosvaihtoehtoja, jotka saat näkyviin pitämällä hiiren vasenta nappia pohjassa.



10. Klikkaa kaksoissidokset haluttuun kohtaan yhdisteessä.



11. Lisää kaksoissidosten vapaisiin päihin happiatomit **Text** -työkalulla (katso kohta 6).
12. Kofeiinin rakennekaava on valmis:



13. Tehdyt toimempiteet voi poistaa yhdisteestä valitsemalla haluttu alue (**Lasso**- tai **Marquee** -työkalulla) ja poistamalla **Delete**llä.



14. **Lasso**- tai **Marquee** -työkalulla voi valita koko molekyylin tai osan siitä kopiointia varten.
15. Muita hyödyllisiä toimintoja ChemDraw:ssa ovat mm.
 - **Structure** → **Convert Structure to Name**, joka antaa IUPACin mukaisen nimen valitulle rakenteelle.

- **Structure** → **Convert Name to Structure**, jolla voi hakea nimeä vastaavan valmiin rakenteen.

8 Laitteistokuvat

Tyypillisesti tutkimuksessa käytettävät laitteistot esitellään raporteissa vähintään mallinimeltä sekä tärkeimmiltä ominaisuuksiltaan. Usein laitteistoista esitetään myös kuva, joka selventää laitteistoa. Useimmiten laitteistosta esitetään ns. viivapiirrokset, mutta nykyaikaiset ohjelmistot mahdollistavat myös viimeistellymmät laitteistokuvaukset. On kuitenkin muistettava, että kuvan tärkein tarkoitus on kertoa keskeiset seikat laitteistosta. Tähän tarkoitukseen selkeä viivapiirros sopii usein erittäin hyvin. Viivapiirroksia voi tehdä käytännössä kaikilla tekstinkäsittelyohjelmilla, joissa on piirtotyökalut tai jopa Paintilla.

Seuraavassa esitetään esimerkkinä kuinka tisluslaitteisto voidaan piirtää ChemDraw:lla.

8.1 Tisluslaitteisto ChemDraw:lla

1. Avaa ChemDraw
2. Valitse `View` → `Templates` → `Clipware, part 1` ja `View` → `Templates` → `Clipware, part 2`. Nyt ohjelmassa on auki kaksi ikkunaa, jotka pitävät sisällään erilaisia laboratoriotarvikkeita.
3. Valitse statiiivi klikkaamalla sitä hiirellä ja aseta se haluamaasi kohtaan työpöydälle klikkaamalla.



4. Lisää koura, tisluskolvi, tislusväliliosa...

- Viimeksi lisättyä kappaletta voi liikuttaa joko hiirellä tai nuolinäppäimillä. Kappale tulee valita aktiiviseksi painamalla esimerkiksi **Tools** -valikon **Lasso** -työkalulla.
- Kappaleita voi pyöritellä ja peilata. Nämä operaatiot saa klikkaamalla aktiivista kappaletta hiiren oikealla näppäimellä.
- Aktiiviset kappaleet saa poistettua **delete** -näppäimellä.
- Tekstiä saa lisättyä **Tools** -valikon **Text** -työkalulla.
- Lisää piirtotyökaluja löytyy valikosta **View** → **Other Toolbars**.

5. Harjoituksena voi koota vaikka seuraavanlaisen laitteiston.

