

KEMIAN LAITOS JYVÄSKYLÄN YLIOPISTO

Tutkielman otsikko

Kandidaatintutkielma ja -projekti

02.02.2020

Malli Oppilas



JYVÄSKYLÄN YLIOPISTO

Tiivistelmä

tekstiä

Esipuhe

tekstiä

Käytetyt lyhenteet ja vieraskieliset termit

Lyhenne	Merkitys	Suomennos
AES	atomic emission spectroscopy	atomiemissiospektroskopia
ANOVA	analysis of variance	varianssianalyysi
CE	circular economy	kiertotalous
CRM	critical raw material	kriittinen raaka-aine
EDX	energy-dispersive	energiadisersiivinen
ICP	inductively coupled plasma	induktiivisesti kytketty plasma
LoD	limit of detection	havaintoraja
LoQ	limit of quantification	määrittäysraja
OES	optical emission spectroscopy	optinen emissiospektroskopia
REE	rare-earth element	harvinainen maametalli
SCM	shrinking core model	kutistuvan ytimen malli
SEM	scanning electron microscopy	pyyhkäisyelektronimikroskopia
XRF	x-ray fluorescence	röntgenfluoresenssi

Sisällys

Tiivistelmä	iii
Esipuhe	iv
Lyhenteet ja vieraskieliset termit	v
1 Johdanto	1
1.1 Yhtälöitä ja taulukko	1
1.2 Kemialliset yhdisteet ja rakenteet	2
1.3 Physics-paketti	2
1.4 Kuvia	2
1.5 Lähdekoodi	3
2 Viittaamisesta	3
3 Yhteenveto	3
Viitteet	4
Liitteet	5

1 Johdanto

Alla lyhyet ohjeet sekä näppäriä vinkkejä LaTeXin käyttöön opinnäytetöissä.

1.1 Yhtälöitä ja taulukko

Alla esimerkkejä yhtälöiden ja taulukoiden käytöstä.

Reaktion kertaluku määritetään integroitujen nopeuslakien avulla, esimerkiksi

$$[A_2B_3](t) = -k_r t + [A_2B_3]_0, \quad (1)$$

jossa k_r on reaktion nopeusvakio ja $[A_2B_3]$ ajasta t riippuva konsentraatio. Yhtälöstä (1) nähdään, että nollannen kertaluvun reaktiossa konsentraation tulisi noudattaa suoran yhtälöä¹.

Ensimmäinen ja toinen kertaluku voidaan linearisoida seuraavien yhtälöiden mukaisesti:

$$\ln[A_2B_3] = -k_r t + \ln[A_2B_3]_0 \quad (1. \text{ kl}), \quad (2)$$

$$\frac{1}{[A_2B_3]} = k_r t + \frac{1}{[A_2B_3]_0} \quad (2. \text{ kl}). \quad (3)$$

Esittämällä konsentraatio yhtälöiden (1)–(3) mukaisesti voidaan päätellä mitä kertalukua reaktio noudattaa ja määrittää vastaava reaktion nopeusvakion arvo. Taulukossa 1 on yhtälöiden (1)–(3) perusteella lasketut arvot graafista esitystä varten. Taulukoiden tekemistä voi helpottaa huomattavasti käyttämällä sivustoa <https://www.tablesgenerator.com>, jonka avulla taulukon muotoilut saa tehtyä helposti ja tiedot saa tuotua esimerkiksi Excelistä.

Taulukko 1. Konsentraation aikariippuvuus. Reaktion kertaluvun määrittämiseen tarvittavat arvot

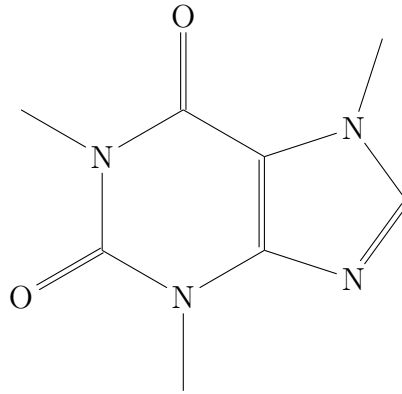
t (s)	$[A_2B_3]$ (mol dm ⁻³)	$\ln[A_2B_3]$	$[A_2B_3]^{-1}$ (dm ³ mol ⁻¹)
0	0,100	-2,303	10,0
50	0,067	-2,703	14,9
jne			

1.2 Kemialliset yhdisteet ja rakenteet

LaTeXissa on paljon hyödyllisiä paketteja kemiallisten yhdisteiden ja rakenteiden tekemiseen. Esimerkiksi yhdisteet voi kirjoittaa näin C_2H_5OH tai ioneille Na^+Cl^- . Reaktiot taas hoituvat näin käyttämällä `reaction`-funktiota, jonka formaatti seuraa `mhchem`-pakettia.



Joitain rakenteita voi myös piirtää `chemfig`-paketilla, ks. kuva 1.



Kuva 1. Kofeiinin rakenne. Muista, että kuvatekstien tulee olla informatiivisia ja kuviin tulee olla viittaus tekstissä.

1.3 Physics-paketti

Yhtälöissä voi myös käyttää näppärää `physics`-pakettia, joka helpottaa yhtälöiden kirjoittamista. Esimerkiksi kvanttimekaaninen odotusarvo voidaan kirjoittaa seuraavasti käyttäen Diracin notaatioita:

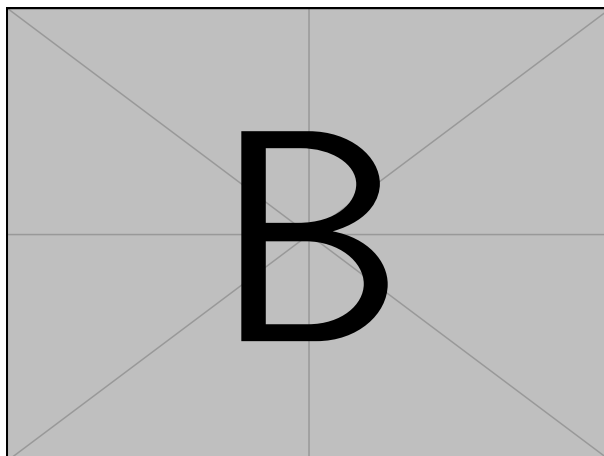
$$\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle . \quad (4)$$

Vastaavasti esimerkiksi osittaisderivaatat hoituvat kätevästi. Tässä esimerkki sisäenergian kokonaisdifferentiaalille:

$$dU(T,V) = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_T dV = C_V dT + \pi_T dV . \quad (5)$$

1.4 Kuvia

`Wrapfig`-komennolla kuvan voi halutessaan laittaa myös tekstin joukkoon. Esimerkki on esitetty kuvan 2 avulla.



Kuva 2. Esimerkki wrapfig-toiminnon käytöstä.

1.5 Lähdekoodi

Halutessaan työn joukkoon voi laittaa myös lähdekoodia, jota on käytetty projektissa. Usein nämä tiedot annetaan liitetiedostoissa. Esimerkiksi:

```
import numpy as np
print('Small Python test')
```

2 Viittaamisesta

Testataan tässä viittaamista artikkeliin,^{2,3} ohjeisiin,⁴ WWW-sivuun⁵ ja opinnäytetyöhön⁶ käyttämällä yläindeksiä.* Lisäksi voidaan viitata tarvittaessa "riviviitteellä" näin 4. Tällaista tarvitaan esimerkiksi kuvateksteissä tai taulukoiden alaviitteinä, jos vaikka halutaan ilmaista, että tiedot ovat viitteestä 4.

Huomioi, että lehtien nimet eivät (ainakaan toistaiseksi) tule automaattisesti CASSI-mukaiseen lyhennettyyn muotoon. Tämän voi korjata manuaalisesti muokkaamalla viitteet.bib -tiedoston "journal-tietueessa olevan lehden nimen sen lyhenteellä.

3 Yhteenveto

Loppu.

*WWW-sivuihin viitataan @online-tietueella ja opinnäytetyöhön @thesis-tietueella. Ks. viitteet.bib esimerkkinä muotoilusta.

Viitteet

1. Atkins, P., *Physical Chemistry*, University Press, Oxford, 2006, ss. 111–111.
2. Hohenberg, P. ja Kohn, W., Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.*, **1964**, *136*, B864–B871. DOI: 10.1103/PhysRev.136.B864.
3. Mortensen, J. J.; Larsen, A. H.; Kuisma, M.; Ivanov, A. V.; Taghizadeh, A.; Peterson, A.; Haldar, A.; Dohn, A. O.; Schäfer, C.; Jónsson, E. Ö.; Hermes, E. D.; Nilsson, F. A.; Kastlunger, G.; Levi, G.; Jónsson, H.; Häkkinen, H.; Fojt, J.; Kangsabanik, J.; Sødequist, J.; Lehtomäki, J.; Heske, J.; Enkovaara, J.; Winther, K. T.; Dulak, M.; Melander, M. M.; Ovesen, M.; Louhivuori, M.; Walter, M.; Gjerding, M.; Lopez-Acevedo, O.; Erhart, P.; Warmbier, R.; Würdemann, R.; Kaappa, S.; Latini, S.; Boland, T. M.; Bligaard, T.; Skovhus, T.; Susi, T.; Maxson, T.; Rossi, T.; Chen, X.; Schmerwitz, Y. L. A.; Schiøtz, J.; Olsen, T.; Jacobsen, K. W. ja Thygesen, K. S., GPAW: An open Python package for electronic structure calculations, *J. Chem. Phys.*, **2024**, *160*, 092503.
4. Apulainen, A., Opinnäytteiden kirjoitusohje, 2023, Jyväskylän yliopisto, Kemian laitos.
5. Compendium of Chemical Terminology, International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC), <https://goldbook.iupac.org> (5.2.2026).
6. Kotoneva, J., *Steroidit supramolekulaarisessa kemiassa*, pro gradu -tutkielma, Jyväskylän yliopisto, kemian laitos, Jyväskylä, 1995.

Liitteet

Liite 1: Liitteen seliteteksti

Liite 2: jne.