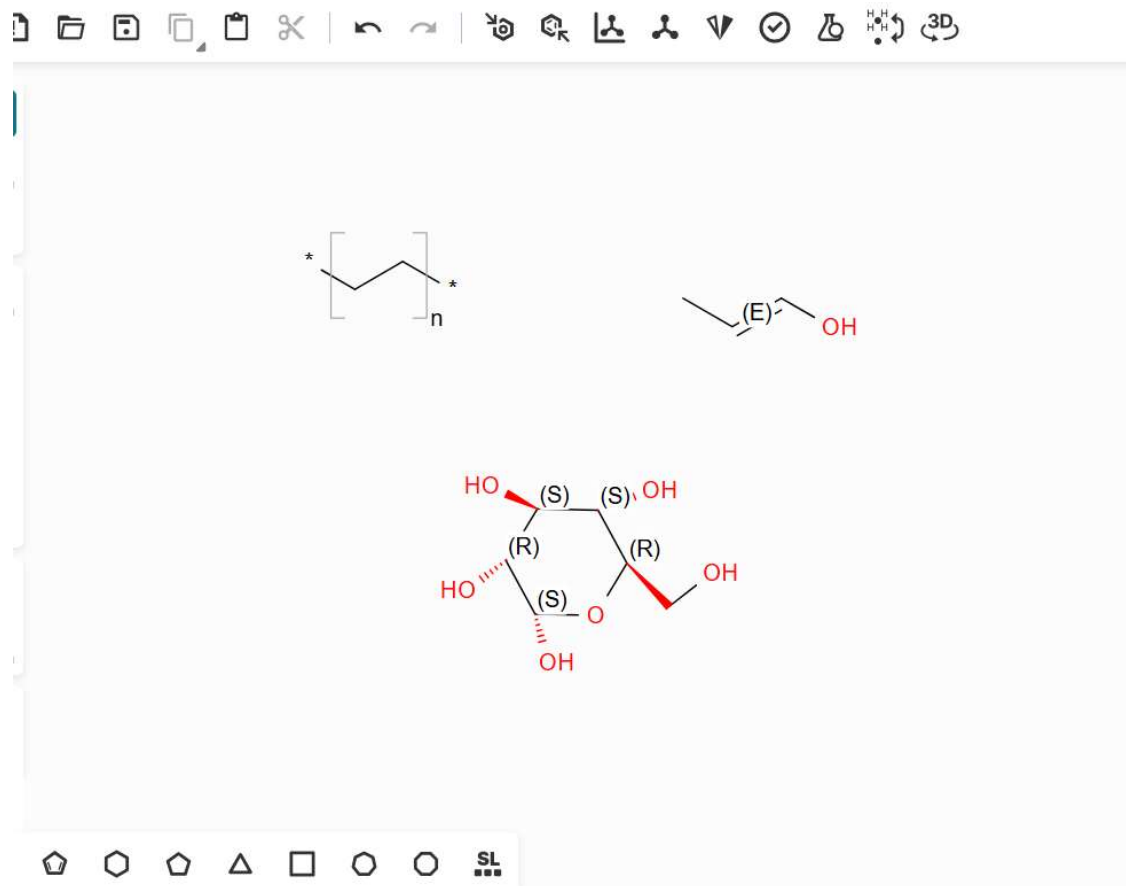


KETCHER lukiossa

Eerika Häkkinen



MISTÄ KETCHERIN SAA

Ketcher on selainpohjainen piirto-ohjelma, joten sitä ei varsinaisesti ladata omalle koneelle.

Ketcherin linkin voi vaikka tallentaa kirjanmerkkipalkkiin.

<https://lifescience.opensource.epam.com/KetcherDemoSA/index.html>

Mitä tarvittaneen lukiokemiassa

- ▶ viivakaava
- ▶ sidosviivakaava
- ▶ ionivaraukset kaavoihin
- ▶ E/Z ja R/S-isomeerit
- ▶ polymeerin piirtäminen
- ▶ reaktioyhtälön laatiminen
- ▶ Ketcherin valmiit rakennekaavat

LOPS 2019 keskeiset sisällöt

KE2

- ▶ aineen rakenteen mallien ja yhdisteen kaavan esittäminen

KE3

- ▶ hiilen yhdisteiden rakenteiden mallintaminen
- ▶ rakenneisomeria
- ▶ stereoisomeria hiiliyhdisteissä

KE4

- ▶ reaktiot
- ▶ polymeroitumisreaktiot

KE5

KE6

- ▶ tasapainoreaktiot

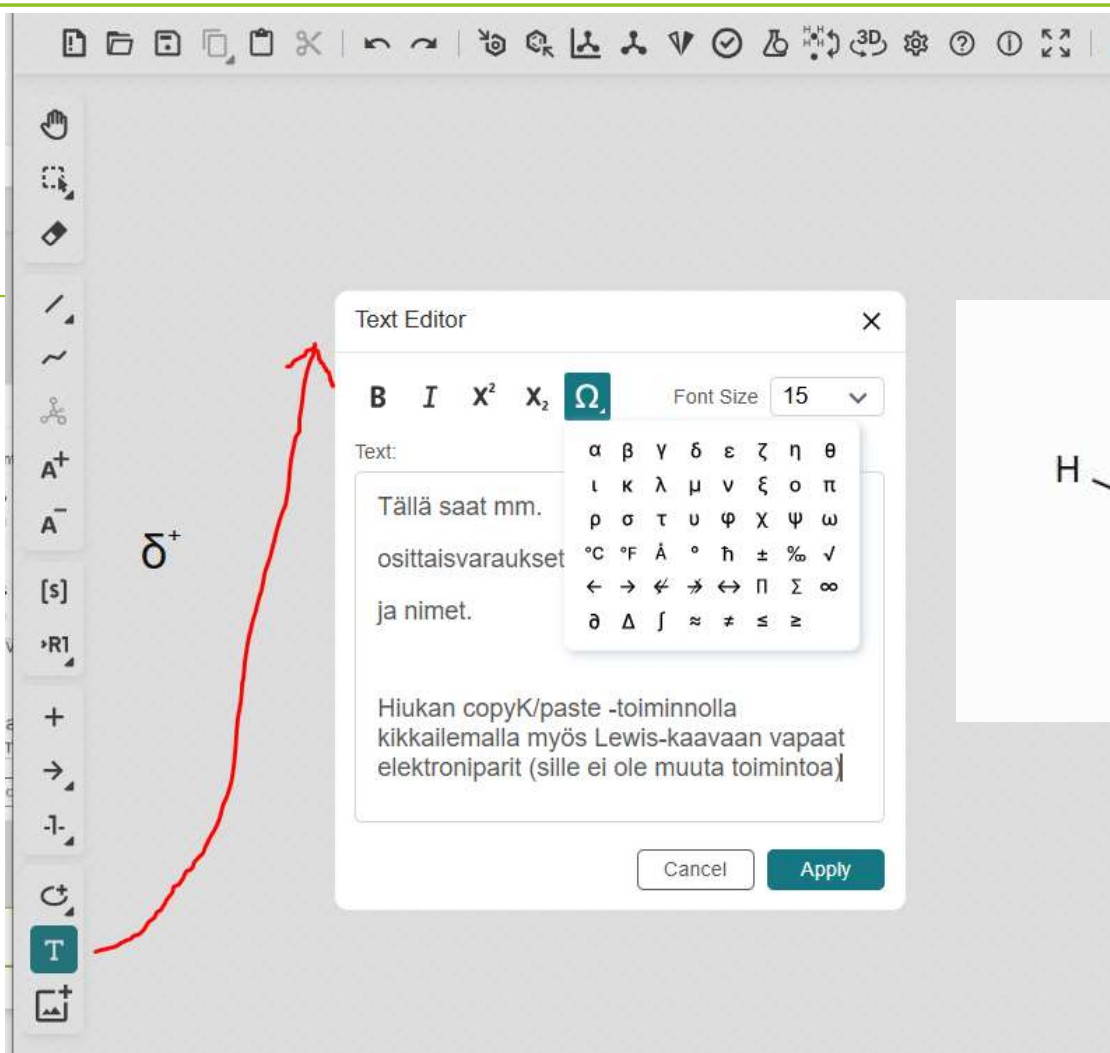
Ketcherin tärkeimmät painikkeet sivupalkki (1/2)

The image shows the Ketcher software interface. At the top is a horizontal toolbar with various icons for file operations, editing, and chemical structure manipulation. Below this is a sidebar with a list of tools and their descriptions:

- liikuttaminen** (moving):
 - valinta** (selection): 1 ja 2 valitse osa molekyylistä, 3 koko molekyylä
 - pyyhekumi** (eraser)
 - sidokset** (bonds): A row of icons for different bond types (single, double, triple, aromatic, etc.).
 - hiiliketju** (carbon chain): An icon showing a zigzag line representing a carbon chain.
- varaukset** (charges): (lisää tai poistaa H⁺ automaattisesti)
- [s]** hakasulkeet esimerkiksi polymeereihin
- R1**
- +** reaktioyhtälöihin
- reaktioolet: A row of icons for different reaction arrow types.
- ▼** lisää toimintoja

Ketcherin tärkeimmät painikkeet: sivupalkki (2/2)

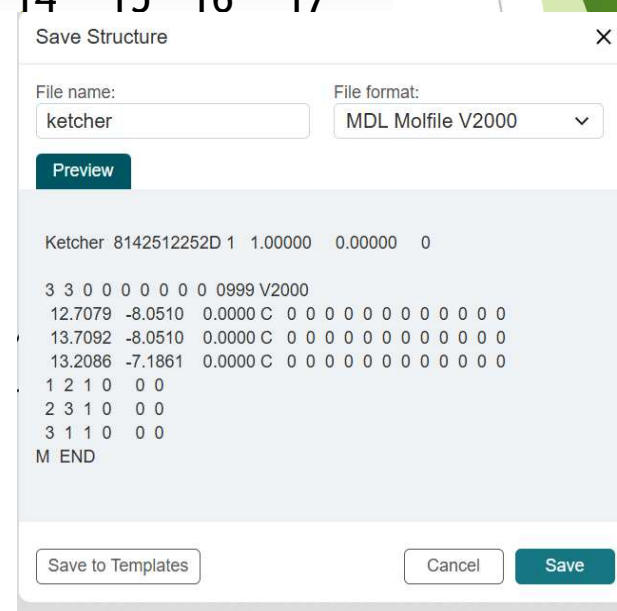
Tekstieditori



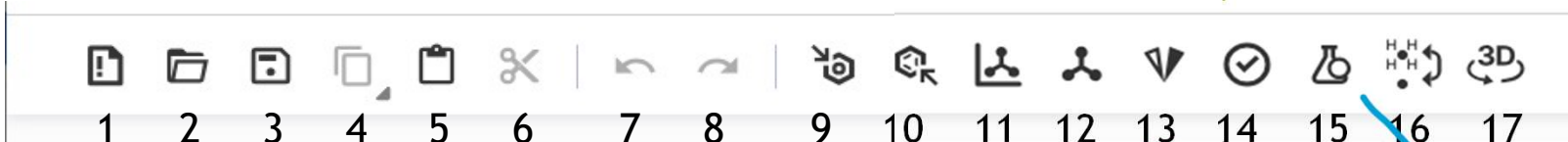
Ketcherin tärkeimmät painikkeet: yläpalkki (1/2)



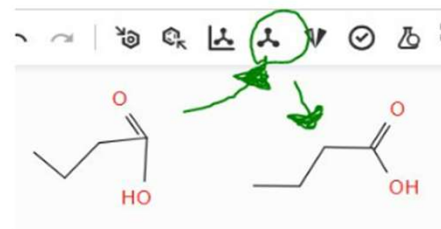
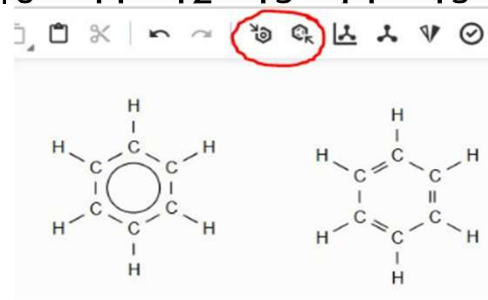
1. Näkymän tyhjennys
2. Tiedostojen avaus
3. Tiedostojen tallennus
Tarjotussa tallennusmuodossa voi avata Ketcherissä,
mutta myös MarvinSketchissä
Toki voi tallentaa myös .KET tiedostona
4. Copy
Valitse sivupalkin rengastustyökalulla kopioitava alue
(keskimmäinen valinta eli kopiointi KET versiona)
5. Paste
Liitä valittu alue CTRL-V näppäin yhdistelmällä työpöydälle ja siirrä se
haluamaasi paikkaan
6. Cut leikkaa valinnan pois.



Ketcherin tärkeimmät painikkeet: yläpalkki (2/2)



- 7. Eiku
- 8. Eiku ei sittenkään eiku
- 9. ja 10. Aromaatriseen renkaan esitysmuodon vaihtaminen
- 11. Työpöydän asemoinnin siistiminen
- 12. Molekyylien siistiminen (sidospituudet ja kulmat)
- 13. Stereorakenteiden määrittäminen *R/S* ja *E/Z*
- 14. Rakenteiden tarkastaminen
- 15. Molekyylin analyysi
- 16. Vedyt (ja sidokset) päälle / pois
- 17. Avaruusrakenteet - tosi turha, ei kykene kolmiulotteisiin.
Tasomaiset molekyylit onnistuvat.



Calculated Values

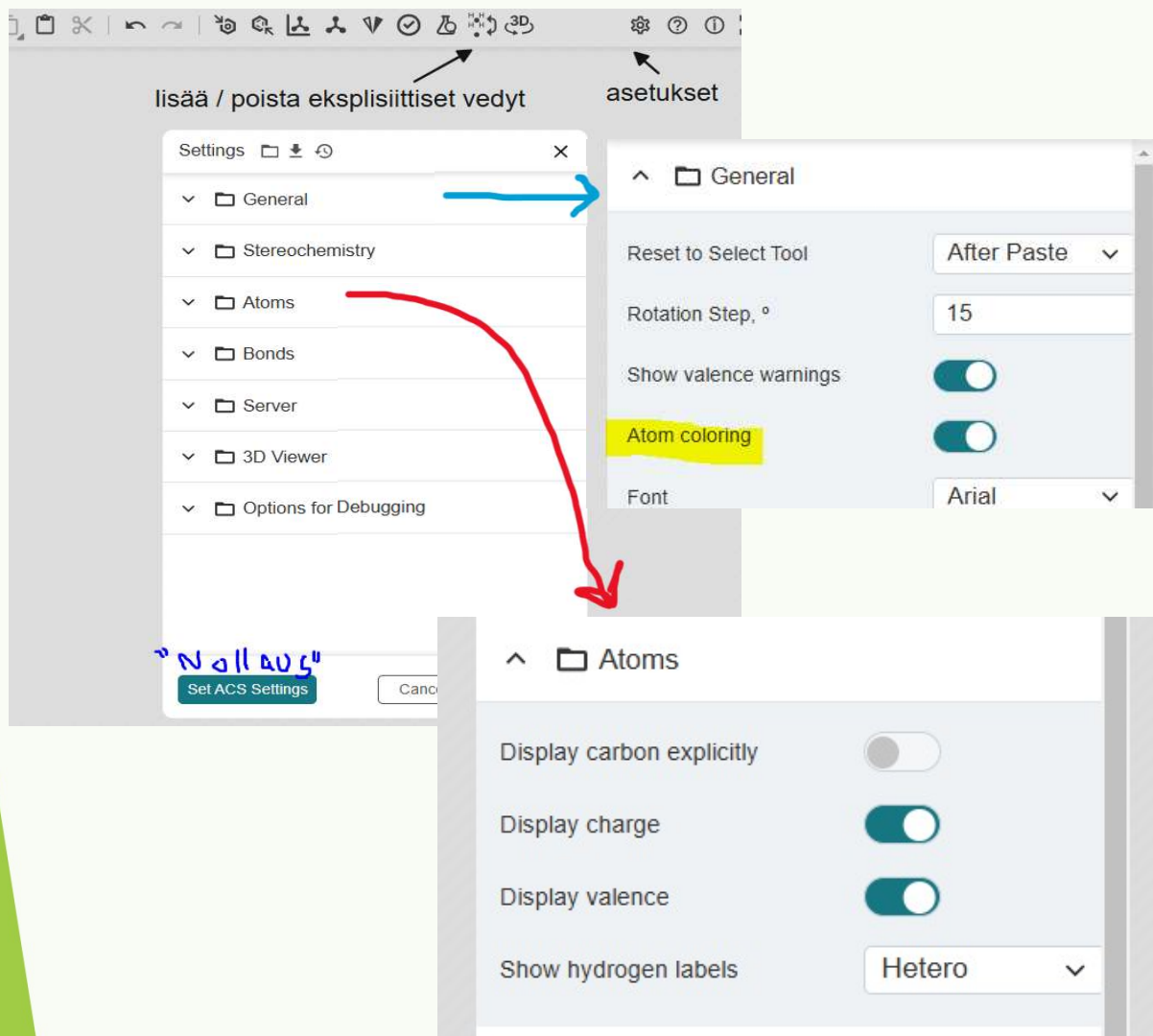
Chemical Formula:
C2H6O

Molecular Weight: 46.068 Decimal places: 3

Exact Mass: 46.042 Decimal places: 3

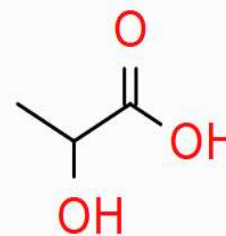
Elemental Analysis:
C52.1H13.1O34.7

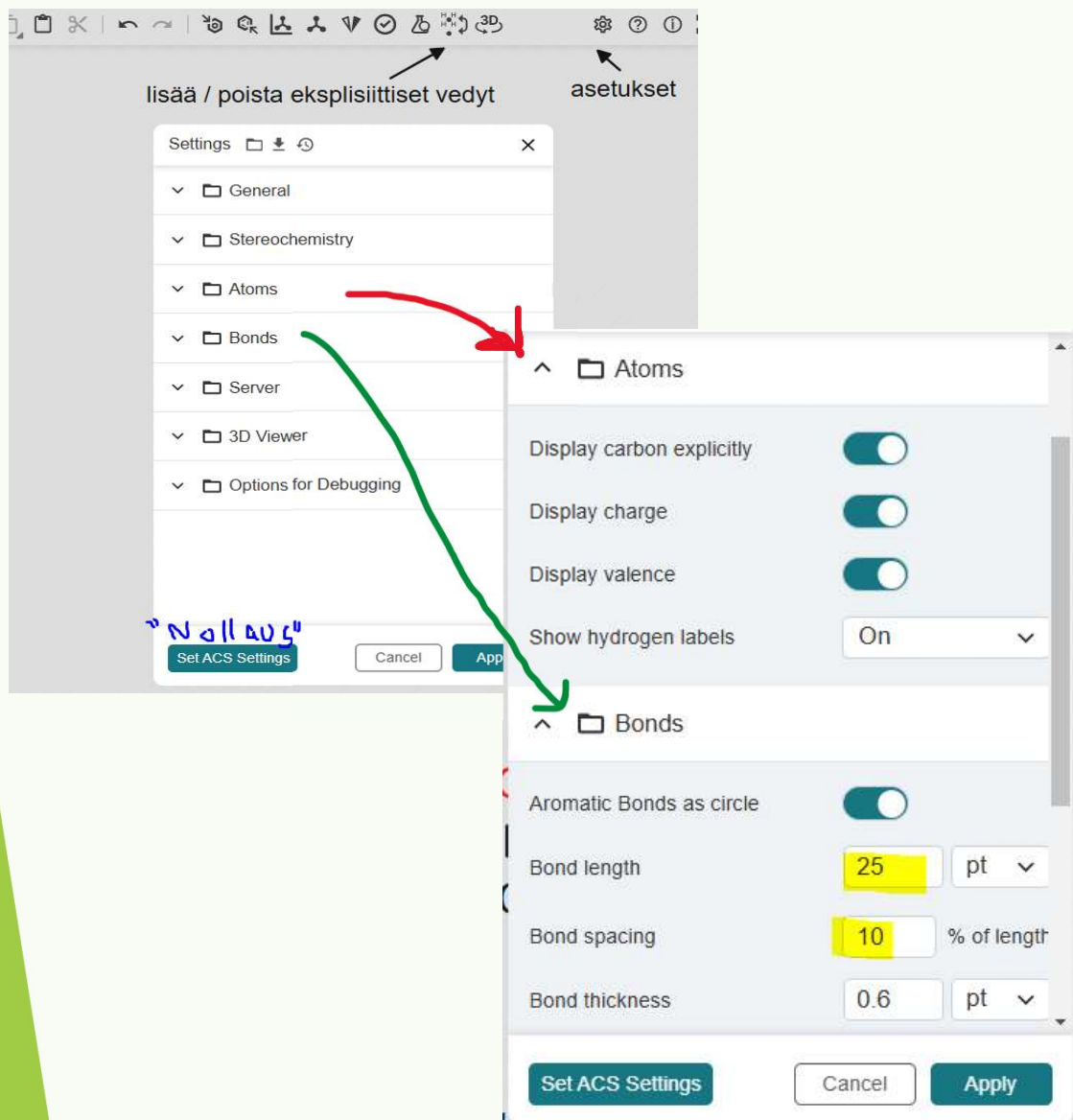
Close



Viiivakaava

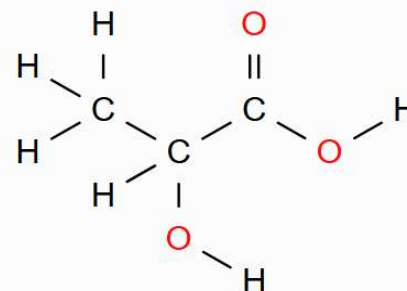
- Asetuksista muokataan
 - hiilet pois
 - vedyt vain heteroatomeihin

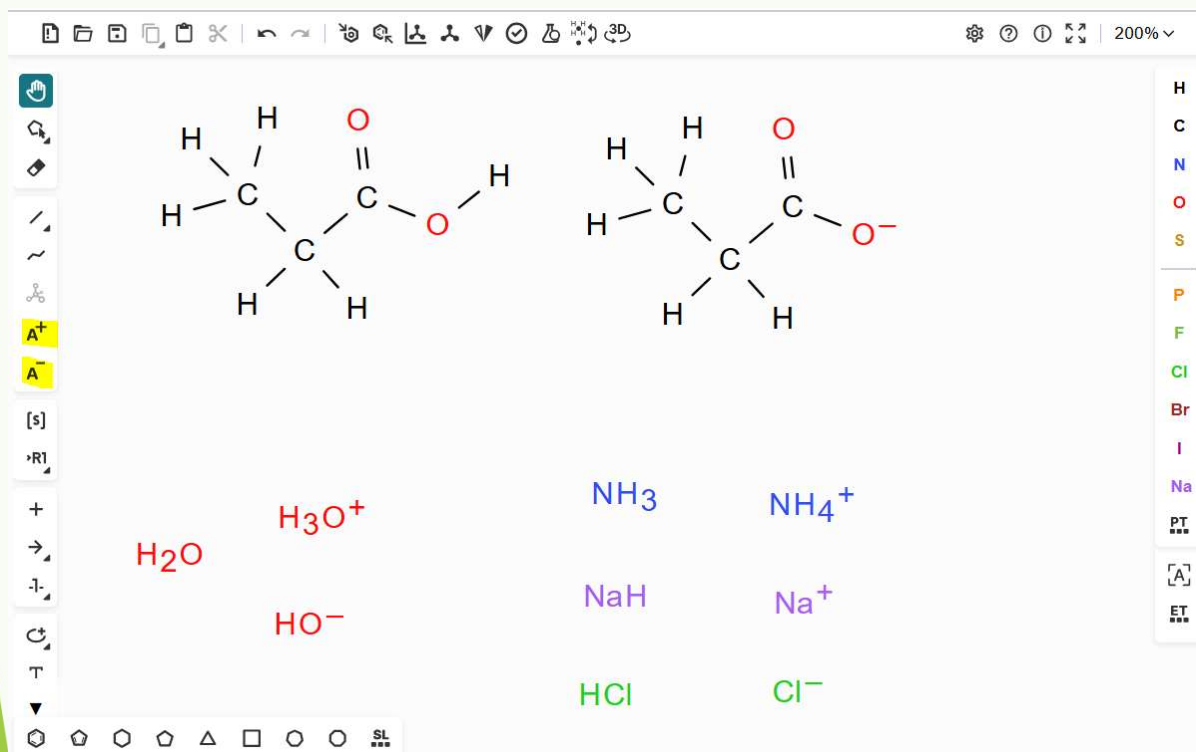




Sidosviivakaava

- Asetuksista muokataan
 - hiilet näkyviin
 - vedyt kaikkialle ("on")





Varaukset

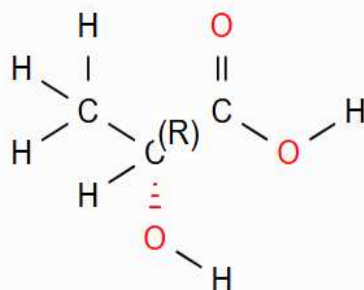
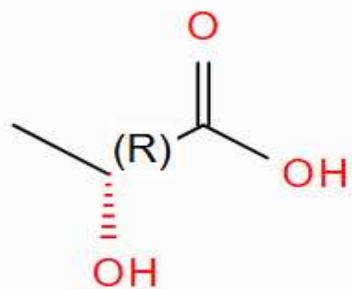
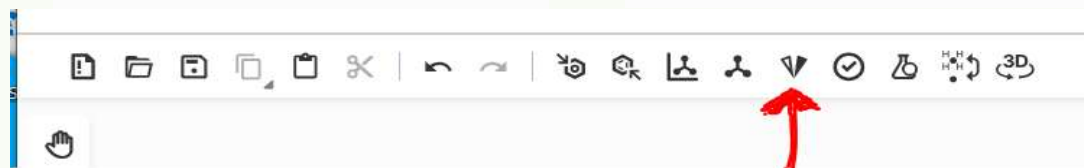
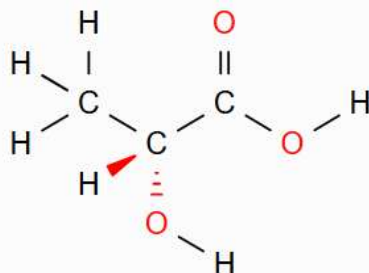
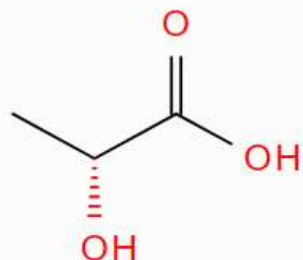
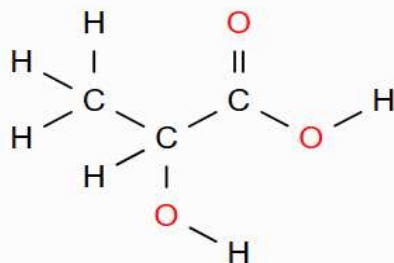
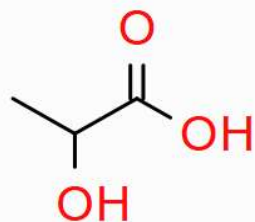
Piirrä kaava haluamallasi tavalla.

Lisää + tai - varaus atomille.

Vetyjä (yleensä) lähtee pois tai tulee lisää automaattisesti.

Tarkasta kuitenkin vetyjen määrä.

Yläpalkin eksplisiittisten vetyjen painikkeesta saat puuttuvia sidosviivoja näkyviin.



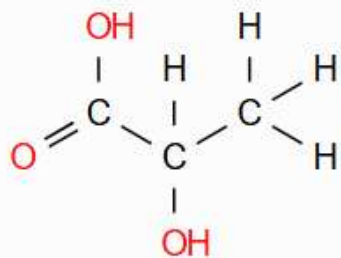
R/S isomeerit eli ENANTIOMEERIT

Piirrä kaava haluamallasi tavalla.

Merkitse sidosten suunta.

Klikkaa R- tai S-symboli näkyviin yläpalkista.

MarvinSketchiin verrattuna tämä EI näytä kysymysmerkillä kiraalista hiiltä, jos sidoksille ei ole merkitty suuntia.



Structure Check

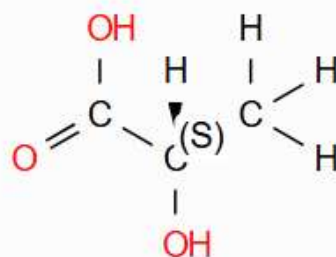
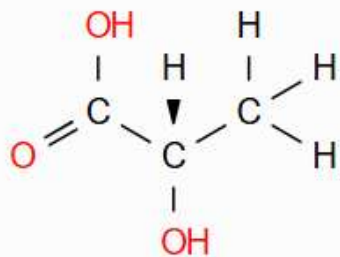
Settings

- ☒ Valence
- ☒ Radical
- ☒ Pseudoatom
- ☒ Stereochemistry

Last check: 14:10:54 26.08.2025

Stereochemistry warning:

Structure contains stereocenters with undefined stereo configuration: (0)



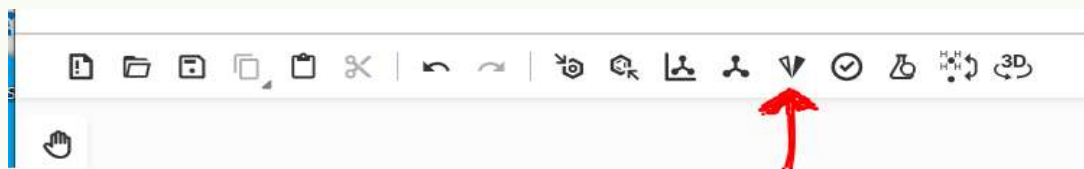
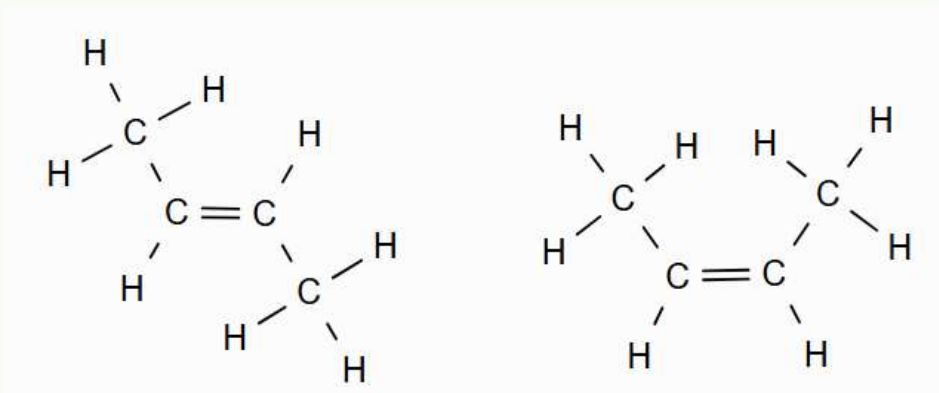
R/S isomeerit eli ENANTIOMEERIT

Epäiletkö enantiomeriaa, mutta et ole varma?

Tarkasta rakenne!

Etsi kirallinen hiili ja anna sidokselle suunta.

Tämän jälkeen Ketcher tunnistaa kiraalisen hiilen

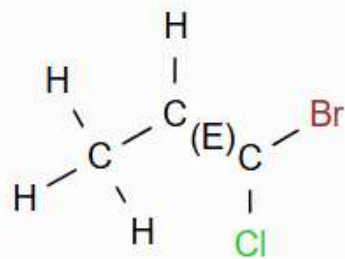
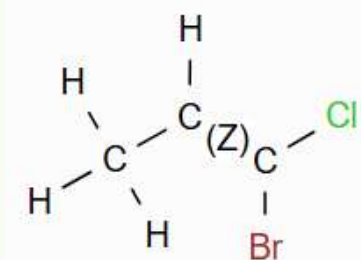
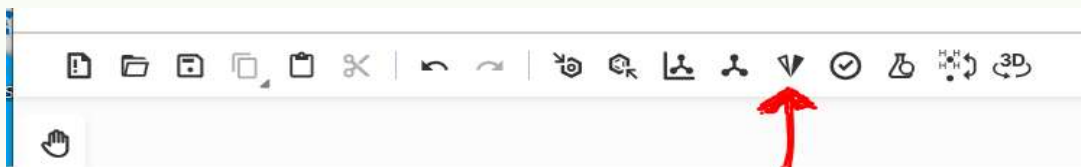
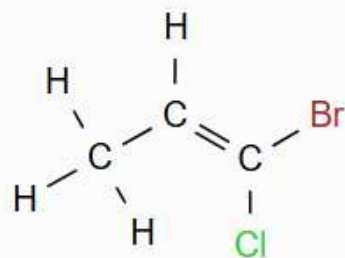
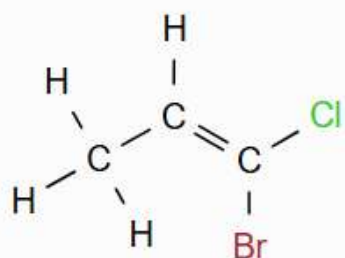


Cis-trans- (*E/Z*-) isomeria

Piirrä kaava haluamallasi tavalla

Klikkaa *E* tai *Z* symboli näkyviin yläpalkista

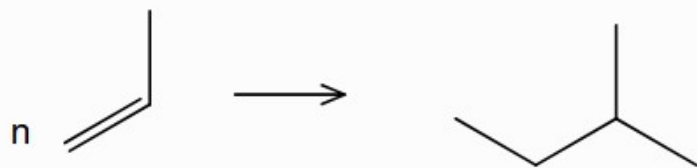
Rengasrakenteisista tämä ei tunnista *E/Z* (*cis-trans*) -isomeriaa (kuten ei myöskään MarvinSketch).



E/Z-isomeria

Piirrä kaava haluamallasi tavalla

Klikkaa *E* tai *Z* symboli näkyviin
yläpalkista



Polymeerin piirtäminen

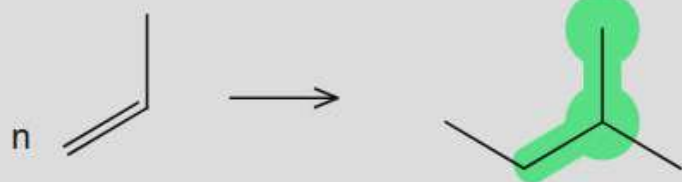
Piirrä polymeerin kaava viivakaavana ja lisää toistuvaan yksikköön ylimääräiset hiilet.

Valitse sivupalkista hakasulkeet [S]. Maalaa polymeeristä toistuvan yksikön atomit (ilman siitä lähteviä sidoksia).

Tee valinnat -> Apply

Klikkaa kahdesti yläpalkin eksplisiittisten vetyjen painiketta.

Jos haluat sidosviivakaavan, tee lopuksi muutokset asetuksista



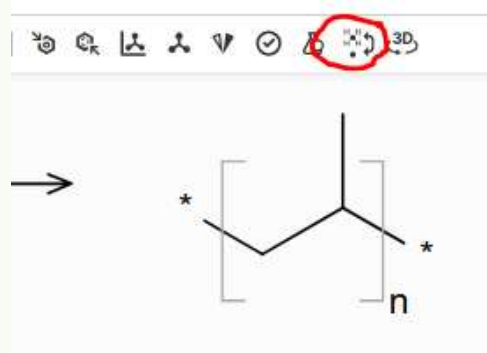
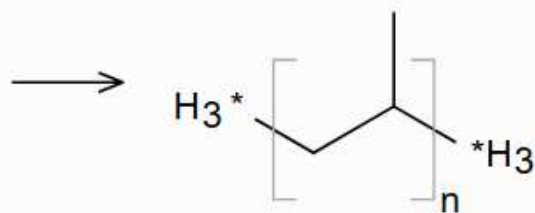
S-Group Properties

Type
SRU polymer

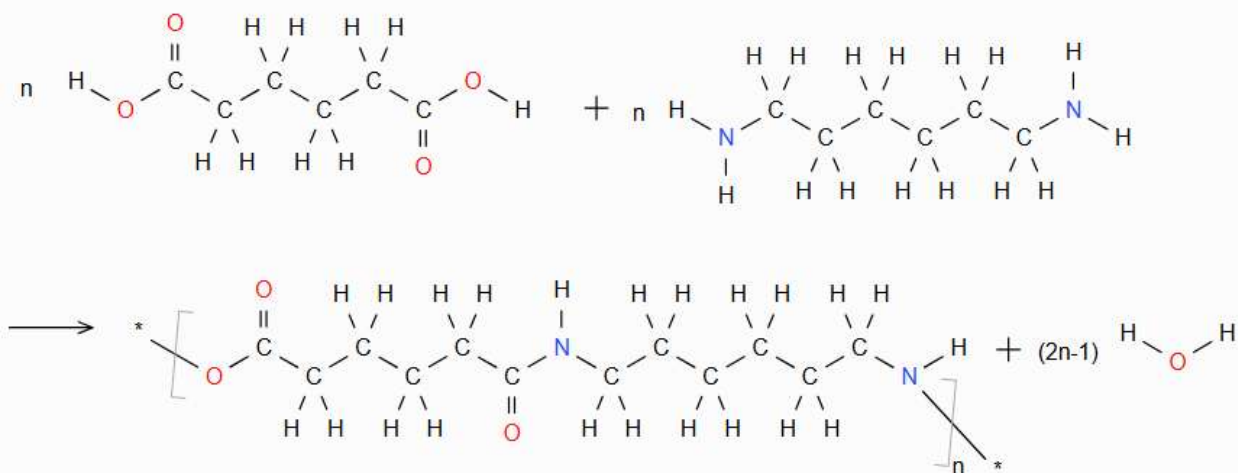
Polymer label
n

Repeat Pattern
Head-to-tail

Cancel Apply



Reaktioyhtälön laatiminen



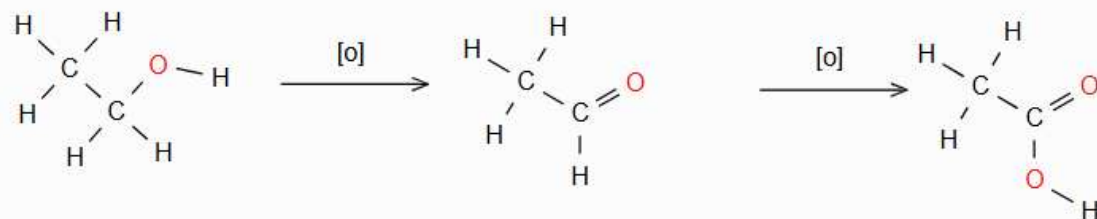
Piirrä haluamassasi järjestyksessä lähtöaineet ja tuotteet.

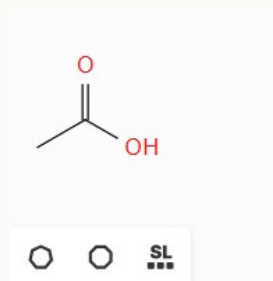
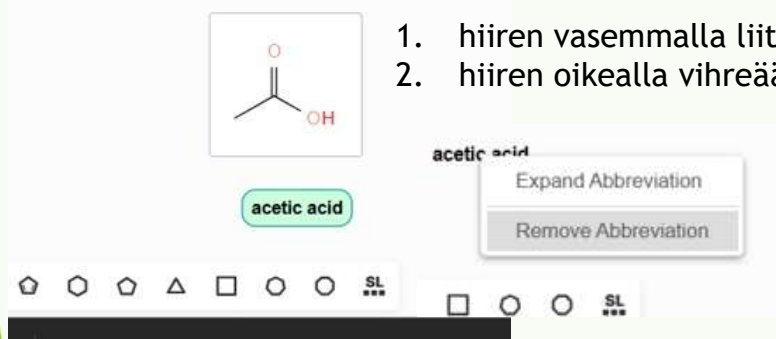
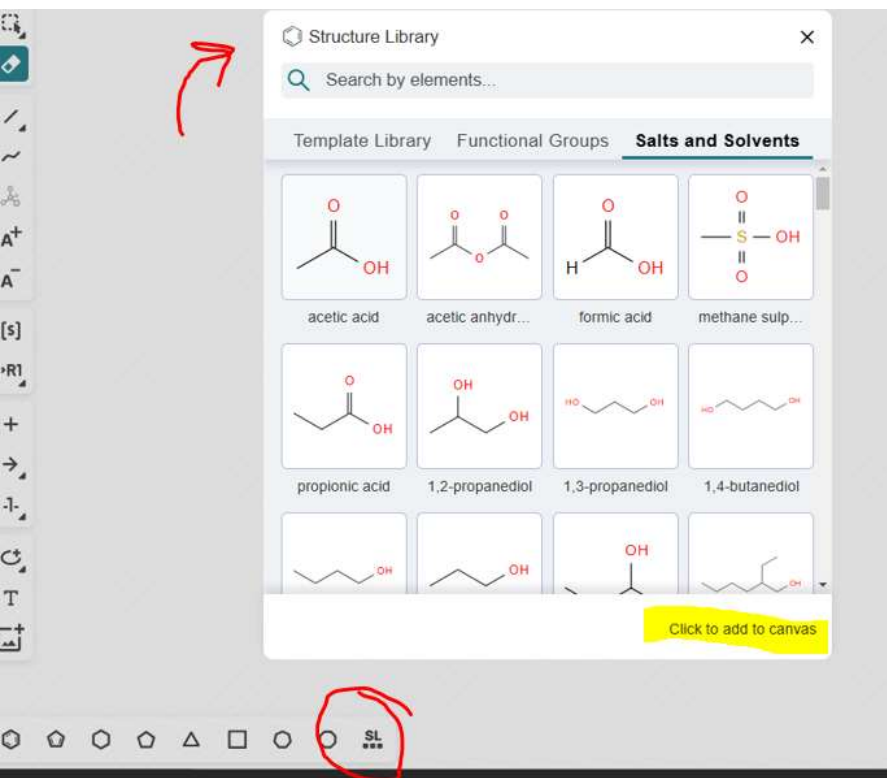
Lisää reaktionuoli ja + merkit omista painikkeistaan haluamaasi kohtaan. (toisin kuin MarvinSketch tämä ei lisää + merkkejä omavaltaisesti)

Kertoimet saat tekstitoiminnolla.

Voit siirrellä kaikkia reaktioyhtälön osia alustalla tarpeen mukaan.

Asemointia voi (jos uskaltaa) myös parantaa automaattisesti yläpalkista





Ketcherin valmiit rakennekaavat

Alapalkin kahdeksan valmiin kaavan lisäksi Structure Librarystä löytyy vaikka mitä.

- Template Library = valmiita rakennekaavoja 269 kpl (mm. aminohapot, sokerit)
- Functional Groups = funktionaalisia ryhmiä 62 kpl
- Salts and Solvents = tavallisimpia liuottimia 124 kpl (eli monta hyödyllistä yhdistettä)

<https://lifescience.opensource.epam.com/ketcher/demo.html>

<https://github.com/epam/ketcher/blob/v2.27.0/documentation/help.md#ketcher-overview>

<https://www.ylioppilastutkinto.fi/fi/tutkinnon-toimeenpano/kokeen-tekniset-jarjestelyt/koejarjestelman-oheisohjelmat>

Eerika Häkkinen • eerika.hakkinen@opedu.kuopio.fi