

Release Notes zu Version 3.1

Das elektronische Laborjournal ensochemLab wurde in der Version **3.1** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. **Rechenvorschriften**

Die automatischen Berechnungseinstellungen bei den Referenz-Edukten wurden erweitert. Wenn sich die Stoffmenge ändert, können als weitere Möglichkeit die Äquivalente aller Edukte angepasst werden. Die allgemeinen Einstellungen für Berechnungen bieten die Möglichkeit, Werte automatisch an einen Bereich zwischen 0,001 und 999 anzupassen.

Berechnungseinstellungen können zu Berechnungsvorlagen zusammengefasst werden und ermöglichen das schnelle Umschalten zwischen verschiedenen Berechnungseinstellungen. Automatische Berechnungen können beim Bearbeiten eines Experiments temporär ein- bzw. ausgeschaltet werden. Nach dem Bearbeiten des Experiments wird automatisch wieder die Original-Einstellung aktiviert.

2. **Binärdaten**

Die Eingabemöglichkeiten für Binärdaten wurden erweitert. Analog zu den Binärdaten der Durchführungsbeschreibung können die Binärdaten für Analytik und Fraktionen mit einem Titel und einer kurzen Beschreibung versehen werden. Im Einstellungs-Dialog auf der Seite "Voreinstellungen" kann nun festgelegt werden, ob ein Vorschaubild, ein Vorschaubild mit Dateinamen oder ein Icon mit Dateinamen angezeigt wird. Als weiteres Dateiformat, das direkt in ensochemLab angezeigt werden kann, ist das PNG-Format hinzugekommen.

3. **Textbausteine**

Textbausteine sind jetzt nicht nur im Experimentassistenten, sondern auch in der Direkteingabe verfügbar. Das Layout der Direkteingabe wird beim Beenden gespeichert.

4. **Fraktionsdaten**

Die Eingabemaske für Fraktionsdaten lässt sich durch einen Doppelklick auf ein Fraktionsfeld in der Normalansicht öffnen. Dies entspricht dem Verhalten aller anderen Datenfelder, bei denen durch einen Doppelklick der Experimentassistenten gestartet wird. Die Fraktionskomponenten im Kapitel Fraktionsdetails wurden um das Feld "Relative Menge" erweitert. Die Seite "weitere Komponentendaten" im Eingabedialog für Fraktionsdaten wurde ebenfalls um dieses Feld erweitert.

5. **Kontextmenüs bei der Dateneingabe**

Das Kontextmenü der Durchführungsbeschreibung bietet als weitere vordefinierte Werte den Benutzernamen und Verweise auf Binärdaten an. Der Edukttyp bzw. Produkttyp können über das Kontextmenü der Reaktionen festgelegt werden.

6. **Experimentlisten**

Das Abschließen, das Ändern der Sichtbarkeit, die Übernahme und die Weitergabe von Experimenten kann auf eine Liste von Experimenten angewendet werden. Es muss nicht mehr jedes Experiment einzeln bearbeitet werden. Diese Funktionalitäten müssen vom Administrator freigegeben sein.

7. **Drucken**

Es ist möglich, alle Experimente eines Ordners mit einem Menübefehl zu drucken. Außerdem können aus der Druckvorschau heraus einzelne Seiten eines Experiments gedruckt werden. Diese Funktionalitäten müssen vom Administrator freigegeben sein.

8. **Zwischenspeicher**

Die Größe des Zwischenspeichers für Experimente lässt sich im Einstellungs-Dialog auf der Seite "Allgemeinen" einstellen. Es ist möglich den Zwischenspeicher auf eine bestimmte Anzahl von Experimenten oder Speichergröße in MB begrenzen. Der Zwischenspeicher kann über die F5-Taste geleert werden.

9. **Berichte**

Um die Übersichtlichkeit beim Arbeiten mit Berichten zu erhöhen, wurde der Navigator um eine eigene Navigator-Gruppe für Berichte erweitert. Es ist jedoch nach wie vor möglich, Berichte unter der Gruppe "Eigene Experimente" anzulegen. Temporäre Berichte, die nicht in der Datenbank gespeichert werden und nach dem Beenden von ensochemLab nicht mehr zu Verfügung stehen, sind ebenfalls Bestandteil der Erweiterungen. Nicht temporäre Berichte können als öffentlich markiert werden, sodass sie für alle Benutzer zugänglich sind. Um einen Bericht weitergehend beschreiben zu können, wurde die Möglichkeit geschaffen, einen beschreibenden Kommentar anzugeben. Mit den Erweiterungen der Berichtsfunktionalität wurde das Datenformat geändert, dies bedeutet, dass beim Start von ensochemLab ein Assistent angezeigt wird, der bei Bedarf die Konvertierung vom alten in das neue Datenformat vornimmt. In einem separaten Dialog sind alle vorhandenen Berichte übersichtlich aufgelistet. Sie lassen sich per Drag & Drop in den Navigator kopieren.

10. **Drag & Drop im Navigator**

Einträge im Navigator können per Drag & Drop nicht nur verschoben, sondern auch kopiert werden. Zum Kopieren von Einträgen muss die Steuerungstaste gedrückt sein. Eingefügt werden die Einträge an der Position, an der der Mausbutton losgelassen wurde. Drag & Drop ist über verschiedene Navigatorgruppen möglich. Einträge können z.B. über die Gruppe „Eigene Experimente“ gezogen und dort abgelegt werden. Navigatorgruppen und Ordner öffnen sich automatisch, wenn man beim Drag & Drop einen kurzen Moment wartet während sich der Maus-Cursor über der jeweiligen Navigatorgruppe bzw. dem Ordner befindet.

11. **Tabellarische Durchführung, Reaktionsparameter und Versuchsverlauf**

Die gesamten Daten der tabellarische Durchführung, der Reaktionsparameter bzw. des Versuchsverlaufs können als Tabelle über die Zwischenablage in andere Anwendungen, wie z.B. Excel, exportiert werden. Auch der Import aus anderen Anwendungen ist möglich. Ein Hinweisfenster warnt beim Import vor nicht übereinstimmenden Spaltenzahlen. Diese Warnung lässt sich auch abschalten. Um versehentliches Einfügen von Daten aus anderen Anwendungen zu vermeiden, lässt sich dieser Vorgang rückgängig machen. Der Versuchsverlauf verfügt über den neuen Spaltentyp "Memo". Dieser Spaltentyp ermöglicht mehrzeilige Eingaben.

12. **Protokoll- und Versionsinformationen**

Protokollinformationen sind Teil des Experiments und werden in einem separaten Block des Experiments angezeigt und ausgedruckt. Sowohl die Protokoll- als auch die Versionsinformationen (falls vorhanden) können als Textdatei gespeichert werden.

13. Administrator-Einstellungen

- a) Besitzer ändern
Der Administrator kann Experimente von einem Benutzer auf einen anderen Benutzer übertragen.
- b) Sichtbarkeit ändern
Falls die Benutzerverwaltung aktiviert ist, lässt sich die Sichtbarkeit aller Experimente eines Benutzers ändern.
- c) Größe der Binärdaten für Uploads
Auf der Seite „Benutzerstandards“ des Administrationsdialogs lässt sich die Größe der Binärdaten, die in der Datenbank gespeichert werden dürfen, beschränken.
- d) Berechnungsvorlagen
Der Administrator verfügt über diverse Einstellmöglichkeiten. Er kann Rechenvorlagen in verschiedenen Sprachen erstellen. Wenn er eigene Rechenvorlagen erstellt hat, kann er Nutzern auch verbieten, die automatischen Berechnungseinstellungen zu ändern. Die Benutzer können lediglich die automatischen Berechnungseinstellungen der Rechenvorlagen verwenden. Der Administrator kann den Nutzern auch erlauben, eigene Rechenvorlagen zu erstellen und diese gegebenenfalls der Allgemeinheit zu Verfügung zu stellen. Er ist ebenfalls in der Lage die Standardeinstellungen, die bei einem Klick auf den Button "Zurücksetzen" verwendet werden, über eine Rechenvorlage zu definieren.
- e) Funktionen
Die Seite „Funktionen“ des Administrationsdialogs enthält die Einstellungen für die E-Mail-Unterstützung und die Einstellungen für das Aktivieren der Benutzerverwaltung. Diese beiden Funktionalitäten waren in der Vorversion unter Berechtigungen zu finden.
- f) Berechtigungen
Die Seite „Berechtigungen“ des Administrationsdialogs wurde um folgende Einstellungen erweitert:
 - Listen von Experimenten übernehmen
 - Listen von Experimenten drucken
 - Einzelne Seiten eines Experiments drucken
 - Liste von Experimente abschließen
 - Sichtbarkeit einer Liste von Experimenten ändern (falls die Benutzerverwaltung aktiviert ist)
 - Experimente weitergeben
 - Liste von Experimenten weitergeben
- g) Benutzerobjekte verwalten
In einem Dialog können Datenbankobjekte (Berichte, Textbausteine und Vorlagen), die ein Benutzer erstellt hat, angezeigt und modifiziert, d.h. gelöscht, übernommen oder weitergegeben, werden.
- h) Verwendbare Struktureditoren
Die Auswahl Struktureditoren, die dem Benutzer im Einstellungs-Dialog zur Verfügung stehen, kann im Administrations-Dialog auf der Seite „Chemieeditoren“ eingeschränkt werden.
- i) Modul für Versionsverwaltung
Wenn das Modul für Versionsverwaltung installiert ist, kann der Administrator auf der Seite „Benutzerstandards“ festlegen, wer die Versionsinformationen eines Experiments sehen darf.