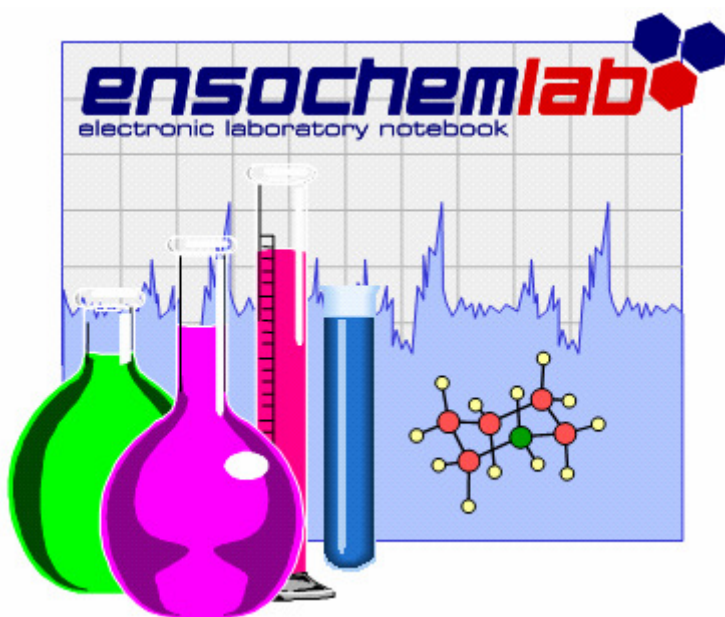


ensochemLab

Version 6.0

Release Notes



enso Software GmbH

Schulhohlstraße 10a
64711 Erbach

Tel. +49 (6062) 910888

Fax +49 (6062) 910886

E-mail Kontakt@enso-software.com

Inhalt

1.	Über dieses Handbuch	1
2.	Release Notes	2
2.1.	Neu in Version 6.0	2
2.2.	Neu in Version 5.2	4
2.3.	Neu in Version 5.0	5
2.4.	Neu in Version 4.1	8
2.5.	Neu in Version 4.0	9
2.6.	Neu in Version 3.2	11
2.7.	Neu in Version 3.1	14
2.8.	Neu in Version 3.0	17
2.9.	Neu in Version 2.2	18
2.10.	Neu in Version 2.1	19
2.11.	Neu in Version 2.0.4 A	20
2.12.	Neu in Version 2.0	21
2.13.	Neu in Version 1.5	22
2.14.	Neu in Version 1.4	23

1. Über dieses Handbuch

Dieses Dokument beschreibt die Entwicklung von ensochemLab über die letzten Versionen hinweg. Das folgende Kapitel bietet eine Aufstellung der jeweils neuen Funktionen und Möglichkeiten, ohne sie jedoch im Einzelnen zu beschreiben. Nähere Informationen und Tipps zur Bedienung entnehmen Sie bitte dem entsprechenden Handbuch.

Bitte beachten Sie, dass an dieser Stelle nur auf die Aspekte der Basisversion eingegangen wird. Es kann daher sein, dass einzelne Funktionen in der speziell für Ihr Unternehmen angepassten Programmversion nicht oder nur mit Einschränkungen verfügbar sind. Genauso werden kundenspezifische Erweiterungen nicht in der Liste aufgeführt.

Informationen zu neueren Versionen des Produkts finden Sie im Internet unter:

<http://www.enso-software.com>

2. Release Notes

2.1. Neu in Version 6.0

ensochemLab wurde in der Version **6.0** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. Experimentinfo im Navigator

Als zusätzliche Informationen zu einem Experiment werden im Navigator beim positionieren der Maus über dem Status- oder Buchsymbol die jeweiligen Werte für Projekt, Zweck, Versuchsreihe, Verantwortlicher und Datum der Generierung des Experiments in einem Hinweisfenster angezeigt.

2. Anpassung von Datum / Uhrzeit im tabellarischen Versuchsverlauf

Wird ein Experiment als Vorlage genutzt war es zur Dokumentation des Reaktionsverlaufes zumeist sehr mühsam die Datum- und Uhrzeitangaben für einzelne Schritte anzupassen. Es steht nun ein Assistent zur Verfügung der anhand einer neuen Referenzangabe die vorherigen Werte neu berechnet. Hierbei werden die sich ergebenden Zeitabschnitte entsprechend berücksichtigt. Diese Möglichkeit besteht sowohl im "tabellarischen Versuchsverlauf", als auch in der "tabellarischen Versuchsbeschreibung".

3. Feldlänge für Versuchsreihe

Die Eingabemöglichkeit wurde von bisher 50 auf nun 120 Zeichen erhöht.

4. Neuer Datentyp "Link" bei den weiteren Daten

Der neue Datentyp Link entspricht einem Textfeld. Der Inhalt wird als Hyperlink angesehen der durch Anklicken oder per Kontextmenü im Browser geöffnet werden kann. Die Hervorhebung des Links kann in den Einstellungen der Schriften festgelegt werden.

5. Standardnavigatorbereich und Experimentanzeige beim Start

Als Standardnavigatorbereich kann jetzt auch das zuletzt geöffnete Kapitel ausgewählt werden. Zusätzlich kann angegeben werden ob das zuletzt ausgewählte Experiment wieder automatisch angezeigt werden soll (sofern es im eingestellten Kapitel enthalten ist).

6. Binäranhänge für Literaturdaten

Auch für die Literaturdaten sind jetzt beliebige binäre Anhänge möglich. Eingabe und Bearbeitung entspricht den bisher vorhandenen Binärdaten bei Durchführung, Analytik etc.

Metallchemie Erweiterung (optional)

1. Automatische Berechnung des Metallgehaltes

Für als Metallverbindung markierte Komponenten wird bei verfügbarer Struktur oder eingegebener Summenformel der jeweilige theoretische Metallgehalt automatisch ermittelt. Grundlage für die Berechnung bilden die beteiligten Übergangsmetalle.

2. Neue Einsatzstoffe / Produkte standardmäßig als Metallverbindung

Bei aktivierter Metallchemie Option werden nun neue Einsatzstoffe und Produkte immer als Metallverbindungen markiert und die jeweiligen zusätzlichen Datenfelder stehen unmittelbar zur Eingabe bereit.

Versionsverwaltung (optionales Modul "Revisionen")

1. Sichtbarkeit früherer Experimentversionen

Die Sichtbarkeit von Versionen kann für einzelne Anwender als Hauptbenutzer-Berechtigung vergeben werden. Benutzer mit dieser Berechtigung können Experimentversionen sehen wenn der Zugriff allgemein für die Gruppe der Administratoren freigegeben ist.

2.2. Neu in Version 5.2

ensochemLab wurde in der Version **5.2** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. Reihenfolge von weiteren Daten

Im Dialog zur Verwaltung, bzw. Administration von weiteren Daten ist es nun möglich die Reihenfolge der einzelnen Definitionen vorzugeben. Damit besteht die Möglichkeit die bisherige alphabetische Sortierung durch eine z.B. Gruppen-orientierte zu ersetzen.

Diese Vorgabe wird sowohl bei der Anzeige, als auch Eingabe der Daten berücksichtigt.

Anmerkung: Version **5.1** war ein nicht offizielles Zwischen-Release

2.3. Neu in Version 5.0

ensochemLab wurde in der Version **5.0** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. Mehrstufige Reaktionen

Mit der Erfassung von mehrstufigen Reaktionen ohne aufgearbeitete Zwischenprodukte in einem Experiment ist nun der erste Schritt zur Unterstützung von Stufenweisen Synthesen verfügbar. Die neue Funktionalität erlaubt die Verwaltung von entsprechenden Reaktionsschritten und Zwischenprodukten, bzw. deren Eingabe und Pflege im Eingabeassistenten. Die Anzeige von Reaktionen wurde für diesen neuen Typ von Experimenten erweitert und listet unter der resultierenden Gesamtreaktion die Zwischenschritte auf.

2. Formatierter Text im Versuchsverlauf

Im Dialog zur Bearbeitung des Versuchsverlaufs kann für eine Spalte der neue Typ "Formatierter Text" angegeben werden. Auf der Seite zur Bearbeitung von Daten stehen über eine spezielle frei positionierbare Schalterleiste neben den Funktionen "Ausschneiden", "Kopieren", "Einfügen" und "Rückgängig" folgende Optionen zur Textformatierung zur Verfügung:

- Schriftart
- Schriftgröße, einstellbar zwischen 8 und 12 Punkt.
- Attribute fett, kursiv und unterstrichen
- Schriftfarbe

3. "Seite einrichten" für Ausdrucke

Über die neue Funktion "Seite einrichten" kann ein Ausdruck unabhängig vom aktuellen Layout gestaltet werden.

Neben der Einstellung der Seitenränder und der Auswahl von Hoch- oder Querformat kann das zu verwendende Layout ausgewählt werden. Eine Druckvorschau ermöglicht es Seitenumbrüche zu setzen, analog der Druckvorschau im Hauptfenster von ensochemLab. Der Ausdruck wird dann aus dieser Vorschau heraus gestartet.

Im Dialog für die Benutzer-Einstellungen kann auf der Seite "Drucken" das bevorzugte Layout ausgewählt werden. Wenn die Checkbox "aktives Layout verwenden" markiert ist (Voreinstellung) verhält sich ensochemLab beim Ausdrucken wie bisher. Um den neuen Dialog zu verwenden muss der Befehl "Seite einrichten" im Datei-Menü verwendet werden. Ist die Checkbox nicht markiert dann wird beim Drucken immer der "Seite einrichten" Dialog geöffnet und das voreingestellte Layout (bzw. das zuletzt verwendete) ausgewählt.

Das Layout im Hauptfenster von ensochemLab bleibt unverändert, egal wie der Ausdruck über den "Seite einrichten" Dialog erfolgt.

4. Suchanfragen speichern

Im Dialog zur Eingabe einer Suchanfrage (Query Builder) können Anfragen in der Datenbank gespeichert und wieder eingelesen werden.

Die jeweils zuletzt eingegebenen Daten werden automatisch gespeichert und in der nächsten Sitzung wieder angezeigt. Das gilt analog auch für die anderen Suchdialoge.

5. Suchergebnisse sortieren

In den Benutzereinstellungen kann angegeben werden ob die durch eine Suchfunktion erhaltenen Experimentlisten aufsteigend oder absteigend sortiert sein sollen.

6. Superuser Funktionalität

Einige der bisher einem Administrator vorbehaltenen Funktionen können jetzt an "normale" Anwender mit Schreibrechten delegiert werden. Diese können über ein eingeschränktes Administrations-Menü als "Superuser" auf eine oder mehrere der folgenden Funktionalitäten zugreifen:

- Pflege der Reagenziendatenbank
- Administration und Definition der weiteren Daten
- Verwaltung vom Zielmolekülen

Die Berechtigungen werden vom Administrator für jede dieser Funktionen separat an einen oder mehrere Anwender vergeben.

7. Laborwerkzeuge

Im Eingabeassistenten und in der Anzeige eines Experiments gibt es auf den Seiten von Edukten und Produkten einen Schalter mit dem der Dialog zur Berechnung der Zusammensetzung aufgerufen werden kann. Der Schalter ist aktiv wenn eine Summenformel vorhanden ist.

Der Dialog zur Berechnung der Zusammensetzung enthält eine Liste aller Edukte und Produkte für die eine Summenformel vorhanden ist. Wenn ein Eintrag ausgewählt wird berechnet ensochemLab automatisch dafür die Zusammensetzung.

Über ein Kontextmenü können sowohl einzelne Werte als auch die gesamte Tabelle in die Zwischenablage kopiert werden.

Die bisher über verschiedene Untermenüs von "Laborwerkzeuge" aufrufbaren Dialoge sind jetzt in einem einzigen mehrseitigen Dialog zusammengefasst der sowohl über den Menüpunkt "Laborwerkzeuge" als auch über einen Schalter im Eingabeassistenten aufgerufen wird.

8. Edukte aus automatischen Berechnungen ausschließen

Im Eingabeassistenten auf der Eduktseite können einzelne Edukte über einen Schalter oder per Kontext-Menü als "nicht automatisch berechnen" markiert werden. Bei allen automatischen Berechnungen werden diese Edukte ignoriert.

9. Reihenfolge bei Binärdaten der Durchführungsbeschreibung

Im Eingabeassistenten auf der Seite der Durchführungsbeschreibung können angehängte Binärdaten in einer bestimmten Reihenfolge angeordnet werden.

10. Übernahme weiterer Daten von Zielmolekülen

Im Dialog zum Vergleich der zusätzlichen Daten eines Produkts mit denen des zugehörigen Zielmoleküls können die Daten des Zielmoleküls für das Produkt übernommen werden.

Nach einem Klick auf den entsprechenden Schalter werden alle für das Zielmolekül definierten weiteren Daten in einem Dialog zur Auswahl angeboten. Jedes Datenfeld kann einzeln für die Übernahme der Daten markiert werden.

11. Neues Feld für Literaturdaten

Die Literaturdaten wurden um das Feld "Literatur-Quelle" (z.B. Buch, Journal, Patent etc.) erweitert. Für "Literatur-Quelle" kann der Administrator eine Vorschlagsliste pflegen.

12. Übernahme von Literaturdaten aus anderen Experimenten

Literaturdaten können aus anderen Experimenten übernommen werden. Das ist in zwei Varianten möglich:

- Kopieren von Literaturdaten aus der Experimentanzeige in eine spezielle Zwischenablage von ensochemLab mit der Möglichkeit diese Daten im Eingabeassistenten wieder einzufügen. Diese Zwischenablage kann die Literaturdaten von bis zu 10 Experimenten aufnehmen.
- Nachschlagen von Literaturdaten anderer Experimente über die Experimentnummer aus dem Eingabeassistenten heraus.

13. Literaturdaten in RIS-Dateien exportieren

Sowohl aus der Experimentansicht als auch aus dem Eingabeassistenten heraus können die Literaturdaten eines Experiments in eine RIS-Datei exportiert werden.

14. Literaturdaten aus RIS-Dateien importieren

Im Eingabeassistenten ist der Import von Literaturdaten aus einer RIS-Datei möglich. Dabei werden alle Inhalte übernommen für die ein korrespondierendes Datenfeld in ensochemLab existiert.

15. Abschaltbare Features

Verschiedene Features können vom Administrator komplett und für alle Anwender deaktiviert werden. Die zugehörigen Schalter und/oder Menübefehle werden ausgeblendet.

In Version 5.0 ist diese Möglichkeit für folgende Features möglich:

- Verwendung von Fraktionen
- Verwendung von Berichten (Reports)
- Verwendung von Zielmolekülen (Targets)

16. Neuer Typ "Auswahl" bei den weiteren Daten

Bei den weiteren Daten gibt es den neuen Typ "Auswahl". Ein Administrator kann dazu eine Liste von Auswahl- oder Vorschlagswerten definieren. Falls für ein Feld die Angabe einer Bedingung definiert ist kann auch dafür eine Liste von Vorschlagswerten angelegt werden.

17. Sonstiges

- Bei der Bearbeitung von formatiertem Text (RTF) ist jetzt auch die Auswahl einer Schriftfarbe über die Schalterleiste möglich.
- In der Experimentanzeige kann mit der Tastenkombination Strg-Pos1 an den Anfang und mit Strg-Ende an das Ende eines Experiments gesprungen werden. Zusätzlich erlaubt die Nutzung der Strg-Bild Tasten eine seitenweise Navigation.
- In Versionen vor 5.0 konnte bei der Definition eines Berichts für ein Datenfeld nur eine einzelne Bedingung angegeben werden. Jetzt kann ein Datenfeld auch in mehreren Bedingungen verwendet werden.

2.4. Neu in Version 4.1

ensochemLab wurde in der Version **4.1** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. **Anhänge zu Experimenten erstellen**

Seit dieser Version können einem bestehenden Experiment unabhängig von Eigentümer und Status beliebig viele Anhänge mit Titel, Kommentar und einer optionalen Binärdatei angefügt werden. Sobald die Funktionalität vom Administrator freigegeben wurde, steht sie allen Benutzern über "Anhang erstellen" im Experiment-Menü zur Verfügung.
Einmal eingegebene Anhänge können später nicht mehr verändert oder gelöscht werden.

2.5. Neu in Version 4.0

ensochemLab wurde in der Version **4.0** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. **Frei definierbare List & Label Berichte**

Seit dieser Version können einem bestehenden ensochemLab Bericht nun beliebig viele List & Label Berichte zugeordnet werden. Diese ermöglichen über die in das Programm integrierte Reporting-Software List & Label eine frei definierbare Aufbereitung der Daten des Basisberichts, wozu ein umfangreicher Designer bereitsteht.

Dieser neue Berichtstyp ist direkt in das bestehende Konzept eingebunden und wird daher auch zusammen mit dem Basisbericht aktualisiert. Er kann zudem ebenfalls als öffentliches Objekt bzw. als Vorlage für alle Benutzer gespeichert werden. Ein spezieller in Anzeige und Bearbeitung integrierter Verwaltungsdialog ermöglicht die einfache und schnelle Handhabung.

2. **Übersichtsliste in der Standardbenutzerverwaltung**

Die Standardbenutzerverwaltung beinhaltet nun eine tabellarische Übersichtsliste aller angelegten Benutzer. Dies ermöglicht in Verbindung mit den Sortiermöglichkeiten ein schnelles Auffinden von Einträgen, auch wenn Standort, Abteilung oder Labor nicht bekannt sind.

3. **Unterstützung von InfoChem ICEdit als Chemieeditor**

Seit dieser Version wird InfoChem ICEdit als Editor für alle chemischen Zeichenvorgänge unterstützt. Hierbei handelt es sich um ein externes Produkt eines Drittanbieters, das gesondert lizenziert und installiert werden muss.

4. **Neuer integrierter ensochemEditor 3.0**

Der integrierte ensochemEditor wurde auf Version 3.0 aktualisiert. Hierdurch stehen zahlreiche neue Funktionen zur Verfügung, wie z.B. das Zeichnen kovalenter Bindungen, die Verwendung von Chiral Flags sowie eine Symbolleiste für Bindungstopologien.

5. **Erstellung öffentlicher Datensätze für Benutzer aktivierbar**

Der Administrator kann seit dieser Version einstellen, ob das Anlegen von öffentlichen, nicht experimentbezogenen Datensätzen (Vorlage für Versuchsverlauf, Textbaustein, Bericht) für reguläre Benutzer ebenfalls möglich sein soll. Diese Einstellung kann für jeden betreffenden Datentyp getrennt festgelegt werden.

Ist die Option deaktiviert, kann ein Benutzer nur private Datensätze erstellen, die für alle anderen Benutzer unsichtbar sind.

Hierdurch können Unternehmensrichtlinien noch besser umgesetzt und der Administrator entlastet werden.

6. **Standardnavigatorbereich einstellbar**

Jeder Benutzer kann nun den Navigatorbereich einstellen, der nach der Anmeldung zuerst aktiv (d.h. aufgeklappt) sein soll. Hierbei ist sind alle verfügbaren vier Bereiche auswählbar.

7. **Auswahl des ersten Datenfelds im Eingabeassistenten**

Bei der Erzeugung eines neuen Experiments im Eingabeassistenten wird der Eingabefokus nun auf das Feld für die Experimentnummer gesetzt, sofern diese nicht automatisch erzeugt wird. Somit kann nun direkt ohne weitere Klicks mit der Dateneingabe begonnen werden.

Startet der Benutzer den Assistenten per Doppelklick auf einem Datenfeld aus der Experimentanzeige heraus, erhält wie gewohnt das entsprechende Feld den Eingabefokus.

8. **Automatische Drehung von eingebetteten PDF Dokumenten**

Mit einer optionalen Einstellung kann ein Benutzer ab dieser Version angeben, ob ensochemLab in eingebetteten PDF Dokumenten automatisch Seiten im Querformat erkennen und um 90° gedreht ausdrucken soll, wenn der Experimentdruck im Hochformat erfolgt. Dies ermöglicht eine optimale

Anpassung des eingebetteten Dokuments an das Layout des Ausdrucks. Hierdurch wird ein Qualitätsverlust durch zu starke Verkleinerung vermindert und die Lesbarkeit besser erhalten. Drucken Sie Ihr Experiment im Querformat, werden bei aktiver Einstellung PDF Seiten im Hochformat entsprechend gedreht.

Ist die Einstellung deaktiviert, wird die eingebettete Seite wie in vorherigen Versionen so verkleinert, dass sie ohne Änderung der Ausrichtung in den Ausdruck eingefügt werden kann.

9. Prüfung auf doppelte Namen bei öffentlichen Datensätzen

Beim Speichern neuer öffentlicher nicht experimentbezogener Datensätze (Berichte, Anzeigelayouts, Textbausteine, Vorlagen für Berechnungseinstellungen, Vorlagen für Versuchsverläufe) wird nun sichergestellt, dass der jeweilige Name eindeutig ist. Dies soll die Identifizierung solcher für jeden Benutzer sichtbaren Datensätze erleichtern und Verwechslungen vorbeugen.

10. Verbesserte Unterstützung für Textbausteine

Das Fenster zum Einfügen von Textbausteinen in die Versuchsbeschreibung wurde erweitert und enthält nun auch generische Daten (aktuelles Datum, aktuelle Uhrzeit, Name des angemeldeten Benutzers) sowie eine Auswahl der wichtigsten Edukt- und Produktdaten, die völlig analog zu den vom Administrator vordefinierten sowie den eigenen privaten Textbausteinen verwendet werden können. Darüber hinaus können auch Referenztexte auf angehängte Binärdaten (z.B. „siehe Aufbau“ wenn eine Datei mit dem Namen „Aufbau“ angehängt wurde) eingefügt werden.

Eine Unterteilung in aufklappbare / schließbare Kategorien erhöht dabei die Übersichtlichkeit. Das Einfügen ist nun zudem per Drag & Drop möglich.

Im Versuchsverlauf wird das Fenster seit dieser Version für den schnellen Zugriff auf verschiedene Experimentdaten ebenfalls angezeigt.

11. Ersetzungswarnung für tabellarische Daten

Es ist bisher bereits möglich, die tabellarischen Daten des Versuchsverlauf, der tabellarischen Durchführungsbeschreibung sowie der Reaktionsparameter über die Zwischenablage mit anderen Programmen wie z.B. Microsoft Excel auszutauschen. Bei der Rückübernahme (d.h. beim Einfügen) erhält der Benutzer nun eine Rückfrage, ob die bestehenden Daten tatsächlich überschrieben werden sollen. Diese Meldung kann optional abgeschaltet werden.

12. Nachfrage zum Speichern temporärer Berichte

Benutzer können bereits bisher temporäre Berichte erzeugen, die nur für die Dauer der aktuellen Sitzung gültig sind und bei der Abmeldung automatisch gelöscht werden. Seit dieser Version wird in diesem Fall ein Dialog mit einer Rückfrage angezeigt, der alle betroffenen Berichte auflistet und auch das komfortable Abspeichern ausgewählter Datensätze ermöglicht.

2.6. Neu in Version 3.2

ensochemLab wurde in der Version **3.2** um folgende Funktionalität ergänzt:

- 1. Unterstützung von Accord Draw als Chemieeditor**
Seit dieser Version wird Accord Draw als Editor für alle chemischen Zeichenvorgänge unterstützt. Hierbei handelt es sich um ein externes Produkt, das gesondert lizenziert und installiert werden muss.
- 2. „Gehe zu“ aus Experimentübersicht**
Es ist nun möglich, aus der Übersichtsliste eines Experimentordners direkt zum jeweiligen Experiment zu springen, indem man entweder auf der zugehörigen Reaktion doppelklickt oder den entsprechenden Befehl im Kontextmenü verwendet.
- 3. Tastaturkürzel**
Für eine Vielzahl häufig verwendeter Funktionen des Programms stehen nun Tastaturkürzel zur Verfügung. Eine komplette Referenz über alle Tastaturkürzel finden Sie im Benutzerhandbuch. Analoge Operationen (neues Edukt / neue Vorlage / neue Zeile usw.) verwenden dabei gleiche Tastaturkürzel, um die Einarbeitungszeit der Benutzer zu minimieren.
- 4. Neuer Hauptmenüeintrag**
Das Hauptmenü wurde um einen Eintrag „Liste“ erweitert, unter dem die bisher unter „Experiment“ befindlichen Listenoperationen zwecks besserer Übersichtlichkeit zusammengefasst wurden.
- 5. Standardsuchfunktion einstellbar**
Jeder Benutzer kann nun die standardmäßig verwendete Suchfunktion in seinen persönlichen Einstellungen angeben. Die Standardsuche wird gestartet, wenn der Anwender in der Symbolleiste des Hauptfensters auf „Suchen“ klickt, ohne das aufklappbare Auswahlmenü zu benutzen.
- 6. Höhe des Reaktionsblocks wird im Layout gespeichert**
Die eingestellte Höhe des Reaktionsblocks ist nun Teil des Anzeigelayouts, d.h. sie wird mit diesem gespeichert und geladen. Die bisher eingestellte Höhe wird übernommen, wenn im aktuellen Layout keine andere Höhe angegeben wurde.
- 7. Hinweisfenster für Zielmolekül**
In der Experimentanzeige wird nun ein Hinweisfenster angezeigt, wenn Sie die Maus über die Angabe des Zielmoleküls im Experimentkopf oder das entsprechende Symbol in der Produkttabelle bewegen. Das Fenster beinhaltet neben der Struktur des Zielmoleküls auch alle ihm zugeordneten Namen (Synonyme).
- 8. Änderungen der Experimentversion kann kopiert und gespeichert werden**
Wenn das optionale Modul der Versionsverwaltung installiert ist, kann die Liste der Änderungen zwischen zwei Versionen eines Experiments nun vom entsprechenden Anzeigedialog aus in die Zwischenablage kopiert sowie als Textdatei gespeichert werden.
- 9. Benutzerliste im Administrationsdialog sortierbar**
Die Benutzerliste im Administrationsdialog kann nun durch einen Klick auf die Überschrift der gewünschten Spalte sortiert werden. Die Richtung (aufsteigend / absteigend) kann durch einen erneuten Klick auf die Titelzeile geändert werden.
- 10. Besitzer von öffentlichen Berechnungsvorlagen werden angezeigt**
In den Hinweisfenstern der Verwaltungsdialoge für Berechnungsvorlagen werden nun neben den Beschreibungen auch die Besitzer öffentlicher Vorlagen angezeigt. Die Hinweisfenster werden geöffnet, wenn Sie die Maus über das Informationssymbol bewegen.
- 11. Einstellungen der automatischen Berechnung in der Direkteingabe änderbar**

In der Direkteingabe („Eingabe in der Anzeige“) steht nun eine Funktion zum Ändern der aktuell verwendeten Einstellungen für die automatische Berechnung zur Verfügung.

12. Export und Import der tabellarischen Daten nach und von CSV

Die tabellarischen Daten des Versuchsverlaufs und der Durchführungsbeschreibung können ab dieser Version in eine CSV-Datei exportiert werden. Dies ermöglicht dem Benutzer, in ensochemLab erfasste Daten in anderen Programmen wie z.B. Tabellenkalkulationen oder anderen Unternehmenslösungen weiter zu verarbeiten. Die Ergebnisse können dann durch einen erneuten Import einer CSV Datei bequem zurück ins Programm übernommen werden.

Durch die freie Wahl von Begrenzer und Trennzeichen beim Import und Export können alle möglichen Varianten des CSV-Formats korrekt verarbeitet werden, was die Auswahl an Programmen, mit denen Daten ausgetauscht werden können, stark erhöht.

13. Export und Import von Experimentdaten

Es ist nun möglich, wahlweise Edukt- oder Produktdaten in eine CSV Datei zu exportieren. Dabei wählt der Benutzer zuerst den Modus (Edukte oder Produkte) und anschließend die nach Experimenten gruppierten Datensätze aus. Eine automatische Auswahl bestimmter Typen (Reagenzien, Zielmoleküle usw.) ist möglich.

Nach einer etwaigen externen Bearbeitung kann die Datei dann über die Importfunktion wieder eingelesen werden. Die geänderten Daten ersetzen die jeweils bisherigen Daten der Experimente. Der Benutzer wird beim Export wie beim Import von einem komfortablen Assistenten unterstützt. Diese Funktion muss vom Administrator zuerst explizit frei geschaltet werden.

14. Zusätzliche Datenfelder durchsuchbar

Über die „Suchanfrage“ und den Berichtsassistenten können Sie ab dieser Version den Inhalt der zusätzlichen Datenfelder zu Edukten und Produkten durchsuchen. Diese Funktion umfasst alle Ihre über das entsprechende Administrationsmodul erstellten Datenfelder.

Im Berichtsassistenten sind die zusätzlichen Datenfelder in Bezug auf die Anzeige an ihre jeweilige Kategorie (Edukte oder Produkte) gekoppelt.

14. Symbolleiste für Reaktionsseite im Eingabeassistenten

Auf der Reaktionsseite im Eingabeassistenten stehen nun alle über das Kontextmenü verfügbaren Funktionen auch über eine Symbolleiste zur Verfügung.

15. Reaktionsparameter: Vorschlagsliste für Einheiten

Im Eingabeassistenten wurde die Seite „Reaktionsparameter“ so erweitert, dass für das Feld „Einheit“ nun eine Vorschlagsliste der vom Administrator vordefinierten Maßeinheiten angeboten wird. In diese Liste werden zudem alle in der Beschreibung des aktuellen Experiments bereits verwendeten benutzerdefinierten Einheiten aufgenommen.

16. Datumsvorbelegung für tabellarische Beschreibung geändert

Auf der Seite „Tabellarische Beschreibung“ im Eingabeassistenten wurde das Datumsfeld bisher immer mit dem aktuellen Datum vorbelegt. Um die nachträgliche Dokumentation vergangener Experimente zu vereinfachen, ist dies nun nur noch beim ersten Eintrag der Fall. Für alle weiteren Zeilen wird das Datum der vorherigen Zeile verwendet.

17. Navigatoranimationen abschaltbar

Für langsamere Systeme und den Einsatz auf Terminal Servern ist es nun möglich, die Navigatoranimationen in den persönlichen Einstellungen der Benutzer abzuschalten.

18. Öffentliche Layouts für Standardbenutzer freischaltbar

Bisher war es nur Administratoren möglich, öffentliche Anzeigelayouts zu erstellen. Diese Funktion kann nun auch optional für Benutzer frei geschaltet werden.

19. Zielmoleküle

- a) Anzeige der Referenzen von Zielmolekülen

Im Administrationsdialog für Zielmoleküle ist es nun möglich eine Liste der Experimente anzuzeigen, die ein bestimmtes Zielmolekül verwenden.

b) Markierung als „nicht aktiv“

Ab dieser Version können Zielmoleküle als „nicht aktiv“ gekennzeichnet werden. Diese Daten stehen in bereits existierenden Experimenten weiterhin zur Verfügung, sind bei neuen Experimenten aber nicht mehr sichtbar.

c) Zusätzliche Daten

Zu den Zielmolekülen können nun zusätzliche Daten angegeben werden. Dabei handelt es sich um die vom Administrator frei definierbaren zusätzlichen Datenfelder. Wird ein solcher Wert als übertragbar gekennzeichnet, bietet die Software Benutzern bei der Auswahl des Zielmoleküls an, ihn in das zugehörige Produkt zu übertragen. Diese Übertragung ist immer optional. Über eine spezielle Funktion können die zusätzlichen Daten von Produkt und Zielmolekül tabellarisch verglichen werden.

20. Erweiterungen für Metallchemie

Spezielle Erweiterungen für Metallchemie können nun optional angefordert werden. Diese Erweiterungen beinhalten die folgenden Datenfelder:

Edukte:

Ist Metallverbindung

Metallgehalt

Produkte:

Ist Metallverbindung

Metallgehalt

Metallausbeute

21. Weitere Suchmodi für Chemie

Abhängig von der verwendeten Chemiedatenbank stehen nun weitere Suchmodi bei der Chemiesuche zur Verfügung. Die Standarddatenbank ensochemSearchEngine unterstützt hierbei die „exakte Fragmentsuche“. Bei diesem Modus werden alle Fragmente eines Moleküls in der Datenbank exakt mit der Suchstruktur verglichen. Stimmt mindestens ein Fragment überein, handelt es sich um einen Treffer.

22. Weitere unterstützte Binärformate

Zusätzlich zu den bereits unterstützten Binärformaten können nun auch MOL, RXN und PDF Dateien direkt in ensochemLab angezeigt und innerhalb eines Experiments ausgedruckt werden.

23. Optionale Begründung für Wiederherstellung einer Experimentversion

Wenn das zusätzlich erhältliche Modul zur Versionsverwaltung aktiviert ist, kann nun eine optionale Begründung für die Wiederherstellung einer alten Experimentversion angegeben werden.

24. Zusätzliche Datenfelder sortiert

Die Liste der zusätzlichen Datenfelder wird nun bei der Bearbeitung im Eingabeassistenten sowie bei der Administration alphabetisch sortiert angezeigt. Für die Anzeige in der Administration kann der Benutzer die Sortierreihenfolge ändern.

25. Prüfung von Berechnungsergebnissen

ensochemLab prüft Ergebnisse von automatischen Berechnungen seit dieser Version auf ihre Größenordnung. So wird z.B. ein Fehler angezeigt, wenn der berechnete Wert eines Edukts oder Produkts so groß wird, dass er nicht mehr in der Datenbank gespeichert werden kann. Zudem erhalten Sie eine Warnung, wenn ein Wert so nahe an 0 ist, dass er mit den aktuellen Einstellungen für die Anzeige von Dezimalstellen in der Experimentanzeige nur noch als 0,0 zu sehen wäre.

2.7. Neu in Version 3.1

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

1. **Rechenvorschriften**

Die automatischen Berechnungseinstellungen bei 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 so das schnelle Umschalten zwischen verschiedenen Einstellungssätzen.

Automatische Berechnungen können beim Bearbeiten eines Experiments temporär ein- bzw. ausgeschaltet werden. Nach dem Bearbeiten des Experiments wird dann automatisch wieder die Originaleinstellung 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 sowie einer kurzen Beschreibung versehen werden.

Im Einstellungs-Dialog kann nun auf der Seite "Voreinstellungen" festgelegt werden, ob ein Vorschaubild, ein Vorschaubild mit Dateinamen oder ein Symbol mit Dateinamen angezeigt wird. Als weitere Dateiformate, die direkt in ensochemLab angezeigt werden können, sind die Bildformate PNG, EMF, GIF, ICO, WMF und TIFF hinzugekommen.

3. **Textbausteine**

Textbausteine sind jetzt nicht nur im Experimentassistenten, sondern auch in der Direkteingabe verfügbar. Außerdem wird das Layout der Direkteingabe 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 Experimentassistent 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 Edukt- 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 können 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.

Das aktuelle Experiment kann über die Taste F5 neu vom Server geladen werden.

9. Berichte

Um die Übersichtlichkeit beim Arbeiten mit Berichten zu erhöhen, wurde der Navigator um eine eigene 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 die 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 die Maustaste 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 tabellarischen 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. Eine Hinweisfenster warnt beim Import vor nicht übereinstimmenden Spaltenzahlen. Diese Warnung lässt sich abschalten. Um versehentliches Einfügen von Daten aus anderen Anwendungen zu vermeiden, lässt sich dieser Vorgang rückgängig machen.

Der Versuchsverlauf verfügt über den neuen Spaltentyp "Mehrzeiliger Text". Dieser Spaltentyp ermöglicht mehrzeilige Eingaben.

12. Protokoll- und Versionsinformationen

Protokollinformation 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 maximale 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 in

diesem Fall lediglich die automatischen Berechnungseinstellungen der Rechenvorlagen verwenden. Der Administrator kann den Nutzern auch erlauben, eigene Rechenvorlagen zu erstellen und diese gegebenenfalls der Allgemeinheit zur Verfügung zu stellen. Daneben ist er 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 Experimenten abschließen
- Sichtbarkeit einer Liste von Experimenten ändern (falls die Standardbenutzerverwaltung 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 Chemieeditoren

Die Auswahl an Chemieeditoren, die dem Benutzer im Einstellungs-Dialog zur Verfügung stehen, kann im Administrationsdialog 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.

2.8. Neu in Version 3.0

ensochemLab wurde in der Version **3.0** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. **Integration von Microsoft Word und Excel**

Sie können nun direkt aus ensochemLab heraus Microsoft Word Dokumente und Microsoft Excel Arbeitsmappen erstellen und bearbeiten, ohne diese manuell zuerst exportieren und dann wieder importieren zu müssen. Die Experimentanzeige und die Druckfunktionen können diese nun auch genauso komfortabel wie Bilddateien in Ihr Experiment einbinden.

2. **Erweiterbare zusätzliche Datenfelder**

Sie können über das Administrationsmodul nun beliebige weitere Datenfelder für Edukte und Produkte erstellen. Diese Daten können Sie aus einer SD-Datei in den integrierten Reagenzienkatalog importieren.

3. **Textbausteine**

Für die Experimentbeschreibung und andere Textdatenfelder können Sie nun Textbausteine verwenden. Dabei handelt es sich um Textteile, die Sie zur häufigen Verwendung abspeichern und bei Bedarf einfach einfügen können, ohne Sie jedes Mal neu tippen zu müssen. Neben den benutzerspezifischen Textbausteinen kann der Administrator auch allgemeine Textbausteine für alle Benutzer definieren.

4. **Integrierter ensochemEditor**

Mit ensochemLab 3.0 erhalten Sie den integrierten ensochemEditor, mit dem Sie Moleküle und Reaktionen komfortabel und in höchster Qualität zeichnen können.

5. **Automatische Berechnungen**

ensochemLab unterstützt nun vollautomatische Berechnungen. Sie können einstellen, welche Werte angepasst werden sollen, wenn Sie einen anderen Datenwert ändern. Das Programm wird diese Berechnungen dann automatisch bei jeder Änderung durchführen.

6. **Berichtsassistent**

Der Berichtsassistent leitet Sie in wenigen Schritten selbst durch komplexe Suchanfragen an die ensochemLab Datenbank. Durchsuchen Sie in beliebiger Kombination sämtliche Datenfelder inklusive Chemie und zeigen Sie anschließend nur die für Sie wichtigen Ergebnisse als Bericht an. Speichern Sie Ihre Abfragedaten, um später mit wenigen Mausklicks immer aktuelle Live-Berichte zu erzeugen.

7. **Vergleich von Versionen**

In der optional verfügbaren Versionsverwaltung ist nun auch der Vergleich zweier Versionen möglich.

2.9. Neu in Version 2.2

ensochemLab wurde in der Version **2.2** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. **Texte am Reaktionspfeil / bei Molekülen**

Sie können nun Texte angeben, die unter bzw. über dem Reaktionspfeil angezeigt werden sollen. Außerdem ist die Anzeige von Texten unter den Edukt- sowie Produktstrukturen nun möglich.

2. **Modul für Versionsverwaltung**

Wir bieten nun ein optionales Erweiterungsmodul für ensochemLab an, mit dem Sie bei bestimmten, konfigurierbaren Ereignissen automatisch die aktuelle Version Ihres Experiments archivieren können. Sie können auch alte Versionen anzeigen und wiederherstellen.

2.10. Neu in Version 2.1

ensochemLab wurde in der Version **2.1** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. Unterstützung von MySQL

MySQL wird nun als kostengünstige Alternativdatenbank sowohl für Strukturen als auch für alphanumerische Daten unterstützt.

2. Kennzeichnung von Molekülen

Die Komponenten einer Reaktion lassen sich nun anhand ihres Typs (Edukt, Reagenz, Lösungsmittel, Katalysator, Haupt- oder Nebenprodukt, Zielmolekül) farblich kennzeichnen. Diese können je nach Einstellung entweder hinterlegt, in einer Farbe gezeichnet oder eingerahmt werden.

3. Vereinfachter Fraktionsdialog

ensochemLab enthält nun einen weiteren, vereinfachten Fraktionsdialog für Fraktionen mit nur einer Komponente und einheitlichen Massendaten, mit dem Sie in einer flachen Übersichtstabelle effizienter arbeiten können.

4. Nachladen von Binärdatensätzen

Binärdatensätze ab einer einstellbaren Größe werden nun auf Wunsch nicht mehr automatisch vom Server geladen, sondern nur noch, wenn sie wirklich benötigt werden. Dies kann speziell bei langsamen Verbindungen Zeit sparen.

2.11. Neu in Version 2.0.4 A

ensochemLab wurde in der Version **2.0.4 A** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. **Spitze Klammern in Namen**

Es ist nun möglich, in Experimentnummern und Ordnernamen spitze Klammern zu verwenden.

2.12. Neu in Version 2.0

ensochemLab wurde in der Version **2.0** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. Weitere Datenbanken

ensochemLab kann alphanumerischen Daten auf einem Oracle oder der MS SQL-Server speichern. Zusätzlich gibt es eine „Workgroup Edition“, die auf der Basis der MSDE (Microsoft SQL Server Desktop Engine) läuft, keinen Datenbankadministrator voraussetzt und für kleine Arbeitsgruppen von 5 bis 15 Anwendern konzipiert ist. Eine Einzelplatzlösung auf Access-Basis („Personal Edition“) steht ebenfalls zur Verfügung.

2. Benutzerverwaltung

Eine hierarchische strukturierte Benutzerverwaltung erlaubt es dem Benutzer die Sichtbarkeit jedes Experiments genau festzulegen. Es gibt die Ebene der Sites, der Abteilung und des Labors. Die Wiedergabe Ihrer Organisationsstruktur in der Software liegt selbst für unerfahrene Anwender nur ein paar Mausklicks entfernt!

3. Erweiterte Navigatorfähigkeiten

Im Navigator können mehrere Experimente markiert, kopiert oder per Drag and Drop verschoben werden.

Im Bereich „Eigene Experimente“ wird der Status der einzelnen Experimente angezeigt. Außerdem können neue Experimente direkt aus dem Navigator heraus angelegt werden. Die Ordnerstruktur kann exportiert und importiert werden.

2.13. Neu in Version 1.5

ensochemLab wurde in der Version **1.5** um folgende Funktionalität ergänzt:

1. **Versuchsverlauf**

Der Versuchsverlauf ist eine flexiblere Variante der formatierten Durchführungsbeschreibung. Im Versuchverlauf lassen sich alle Spalten frei definieren (Text-, Zahlen-, Datums-, Zeit- und logische Spalten).

Für verschiedene Einsatzgebiete lassen sich verschiedene Vorlagen anlegen, die dann für die jeweilige Versuchsbeschreibung abgerufen werden können.

2. **Verschiedene Layouts**

Zusätzlich zum Standardlayout können weitere Layouts angelegt werden. Beispielsweise ein spezielles für Patentausdrucke oder Analytikabgaben etc.

3. **Drucken**

Ein neuer Modus für Ausdruck und Druckvorschau ermöglicht es, ein gesamtes Experiment auf eine einzige Seite zu skalieren.

4. **Rechenseite**

Der Eingabeassistent wurde um eine Seite ergänzt, auf der alle Edukte und Produkte im Überblick angezeigt werden. Bei Änderung eines Wertes werden alle abhängigen Werte direkt neu berechnet und angezeigt.

5. **Reagenziendatenbank**

ensochemLab wurde um eine Reagenziendatenbank erweitert, die wahlweise benutzt werden kann. Sie erweitert die bisherigen Lösungsmittel- und Katalysatorliste. In der Reagenziendatenbank können Edukte mit Struktur, Dichte, Molmasse, CAS-Nummer, etc. hinterlegt werden. Damit verbunden ist auch eine Autovervollständigungs-Funktion. Während man im Eingabeassistenten einen Eduktnamen tippt, werden direkt Edukte vorgeschlagen, so dass man Normalfall nicht den ganzen Namen eingeben muss. Nach einer Nachfrage, können die Daten aus der Reagenziendatenbank für das Edukt übernommen werden.

2.14. Neu in Version 1.4

ensochemLab wurde in der Version 1.4 um folgende Funktionalität ergänzt:

1. **Fraktionen**

ensochemLab unterstützt nun Fraktionen. Sie können zu einem Experiment bestimmte Edukte und Produkte als Fraktionen definieren und die prozentuale Massen- bzw. Flächenverteilung aus Ihrem Analysesystem als Grundlage für Ausbeuteberechnungen verwenden.

2. **Physikalische Daten**

Sie können nun zu einzelnen Molekülen wie Edukten und Produkten weitere chemisch-physikalische Daten wie Schmelzpunkt, Siedepunkt und Refraktion angeben.

3. **Bearbeiten eines Experiments in der Anzeige**

Es ist nun möglich, ein Experiment auch ohne den Eingabeassistenten direkt in der Anzeige zu erstellen bzw. zu bearbeiten.

4. **Noch flexiblere Druckvorschau**

Die Druckvorschau unterstützt nun eine noch flexiblere Skalierung des Vorschaumodus sowie die Angabe weiterer Optionen (alle Seiten auf einer Seite, mehrere Seiten untereinander, ...)

5. **InfoChem Cartridge als Chemiedatenbank**

ensochemLab unterstützt nun auch die InfoChem Cartridge für Oracle als Chemiedatenbank für Reaktionen und Moleküle.

