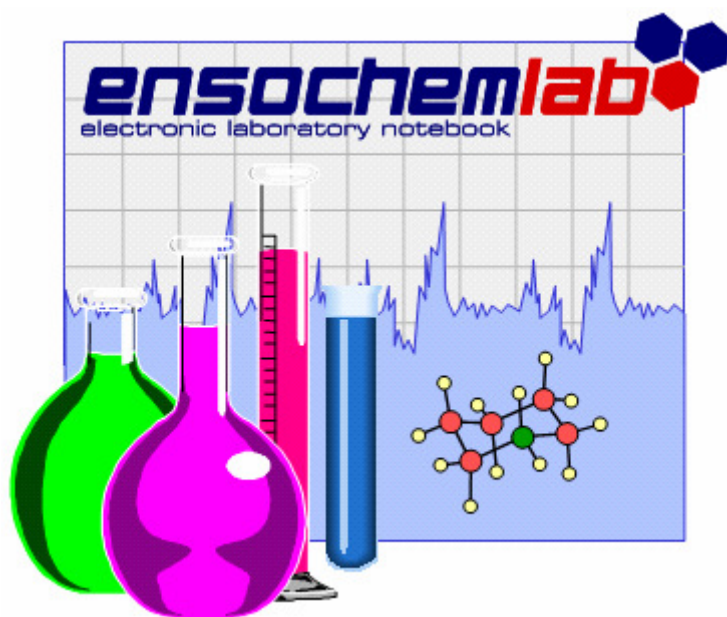


# ensochemLab

Version 6.0

## Administrations-Handbuch



### enso Software GmbH

Schulhohlstraße 10a

64711 Erbach

Tel. +49 (6062) 910888

Fax +49 (6062) 910886

E-mail [Kontakt@enso-software.com](mailto:Kontakt@enso-software.com)

# Inhalt

1. Übersicht .....	1
2. Das Administrationsmenü .....	2
3. Der Administrationsdialog .....	3
3.1. Auswahl-Listen .....	4
3.2. Benutzer .....	6
3.3. Maßeinheiten .....	8
3.4. Voreinstellungen .....	11
3.5. Funktionen .....	13
3.6. Benutzerstandards .....	14
3.7. Berechtigungen .....	16
3.8. Chemieeditoren .....	18
4. Zielmoleküle .....	19
4.1. Zielmoleküle anlegen .....	21
4.2. Zielmoleküle suchen .....	22
4.3. Zielmoleküle verwalten .....	23
5. Reagenzien .....	26
6. Benutzerverwaltung .....	36
7. Definitionen für weitere Daten .....	39
8. Berechnungsvorlagen .....	44
9. Benutzerdaten verwalten .....	46
9.1. Sichtbarkeit ändern .....	47
9.2. Besitzer ändern .....	50
9.3. Benutzerobjekte verwalten .....	53
10. Öffentliche Daten .....	56
11. Benutzerkonten .....	57
12. Die Versionsinformationen .....	59
13. Ende der Anleitung .....	63

# 1. Übersicht

Dieses Handbuch wird Sie bei der Administration von ensochemLab unterstützen. Die Beispiele basieren auf den Standardeinstellungen einer neuen Installation, wie sie vom Server-Installationsprogramm angelegt wird.

Zur Administration von ensochemLab benötigen Sie die folgenden Voraussetzungen. Falls Sie Hilfe bei deren Überprüfung benötigen, wenden Sie sich bitte an Ihren Datenbank- / Systemadministrator. Zusätzlich kann auch die Person, die den ensochemLab Server installiert hat (falls nicht identisch) Auskünfte erteilen.

Sie benötigen:

- Die ensochemLab Windows Client-Software
- Ein Benutzerkonto mit administrativem ensochemLab Zugriff

Nun können wir mit der grundlegenden Administration beginnen.

Nach dem Start von ensochemLab erscheint folgendes Fenster:

Anmeldung


## Elektronische Laborjournalführung

**ensochemlab**  
electronic laboratory notebook

Version 5.0.0  
copyright (c) 2003 - 2010 enso Software GmbH  
PDF Reader powered by Foxit Software Company  
Report-/Print engine List & Label @ Version 10.0:  
Copyright combit@ GmbH 1991-2003

**Logininformationen eingeben**

Bitte geben Sie Benutzername und Kennwort für die Datenbank ein

Benutzername:  

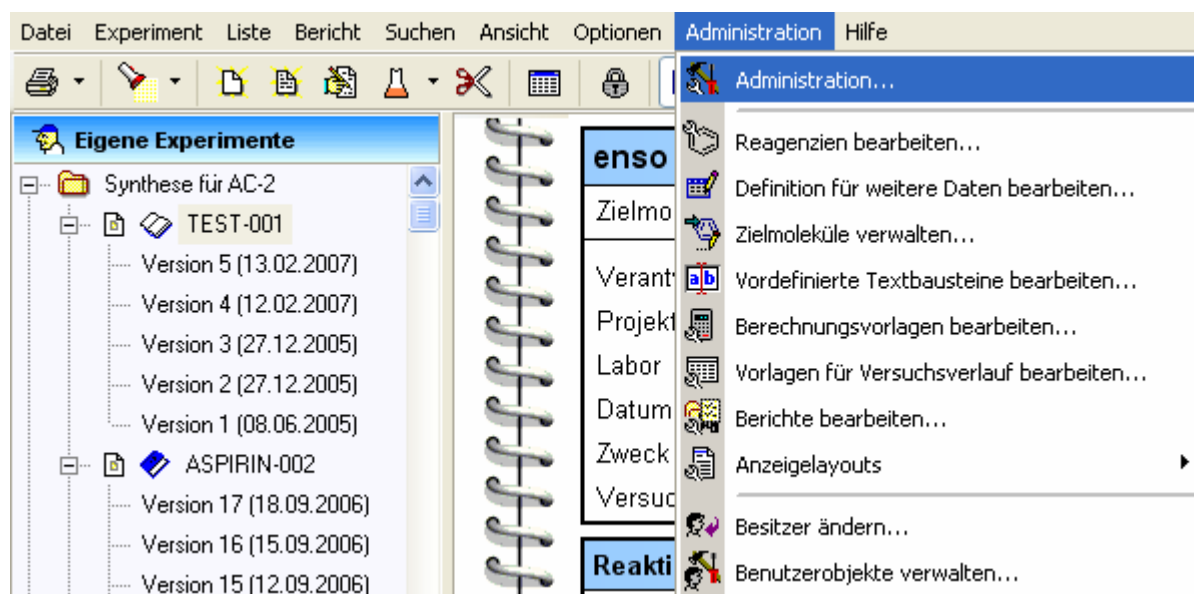
Kennwort:

Abhängig von Ihrer speziell angepassten ensochemLab Edition kann das Aussehen dieses Dialogs leicht vom Foto abweichen. Bitte geben Sie Ihre Benutzerdaten ein und klicken sie auf „Anmelden“.

Ja nach Edition können sie auch automatisch angemeldet werden. Weitere Informationen hierzu finden sie im Benutzerhandbuch.

## 2. Das Administrationsmenü

Nach der Anmeldung befinden Sie sich im Hauptfenster. Als Administrator steht Ihnen hier im Hauptmenü der Bereich „Administration“ zur Verfügung. Die grundlegenden Einstellungen für ensochemLab werden im Administrationsdialog vorgenommen, mit dem sich das nächste Kapitel eingehend befassen wird.



Die weiteren Funktionen des Administrationsmenüs werden dann in den folgenden Kapiteln nach Sachgebieten gruppiert erläutert. Eine Kurzübersicht bietet die im Benutzerhandbuch enthaltene Referenz der Befehle des Hauptmenüs.

# 3. Der Administrationsdialog

---

Bei einer neuen ensochemLab Installation sollten zuerst einige allgemeine Einstellungen festgelegt werden. Klicken Sie daher bitte im Hauptfenster auf das Menü "Administration" und danach auf den Eintrag "Administration", um den Administrationsdialog zu öffnen.

Der Administrationsdialog besteht aus einer Reihe von Seiten, die jeweils ein bestimmtes Thema behandeln:

Benutzer	Hier können Sie Benutzerinformationen bearbeiten, sofern Sie weder die Standardbenutzerverwaltung noch eine kundenspezifische Benutzerverwaltung verwenden.
Auswahllisten	Diese Seite dient zur Eingabe häufig verwendeter oder vorgegebener Werte, die Ihren Benutzern dann zur Auswahl zur Verfügung stehen.
Maßeinheiten	Auf dieser Seite können Sie Maßeinheiten und Faktoren für Ihre Benutzer definieren.
Voreinstellungen	Diese Seite umfasst einige allgemeine Einstellungen und Standards.
Berechtigungen	Hier können Sie Funktionen für alle Benutzer erlauben, bzw. verbieten oder administrative Aufgaben gezielt für einzelne Anwender aktivieren.
Benutzerstandards	Hier können Sie verschiedene Standards vorgeben, Änderungen daran verbieten oder Beschränkungen einstellen.
Funktionen	Auf dieser Seite können ensochemLab Funktionen aktiviert und deaktiviert werden.
Chemieeditoren	Diese Seite ermöglicht Ihnen, einzelne Chemieeditoren freizugeben oder zu sperren.

Dieses Handbuch wird alle Seiten besprechen und neben genauen Informationen zu den einzelnen Einstellmöglichkeiten auf empfohlene Konfigurationen hinweisen.

Die in den ersten Schritten festgelegten Daten werden in den weiteren Schritten teilweise benötigt, daher empfehlen wir die vorgegebene Reihenfolge einzuhalten.

Falls Sie einige optionale Erweiterungen nicht installiert oder Ihr ensochemLab in einer anderen Weise konfiguriert haben, können einige der Seiten fehlen. Auf eine solche Möglichkeit wird im jeweiligen Kapitel hingewiesen. In diesem Fall empfehlen wir, die entsprechenden Beschreibungen in diesem Handbuch einfach zu übergehen.

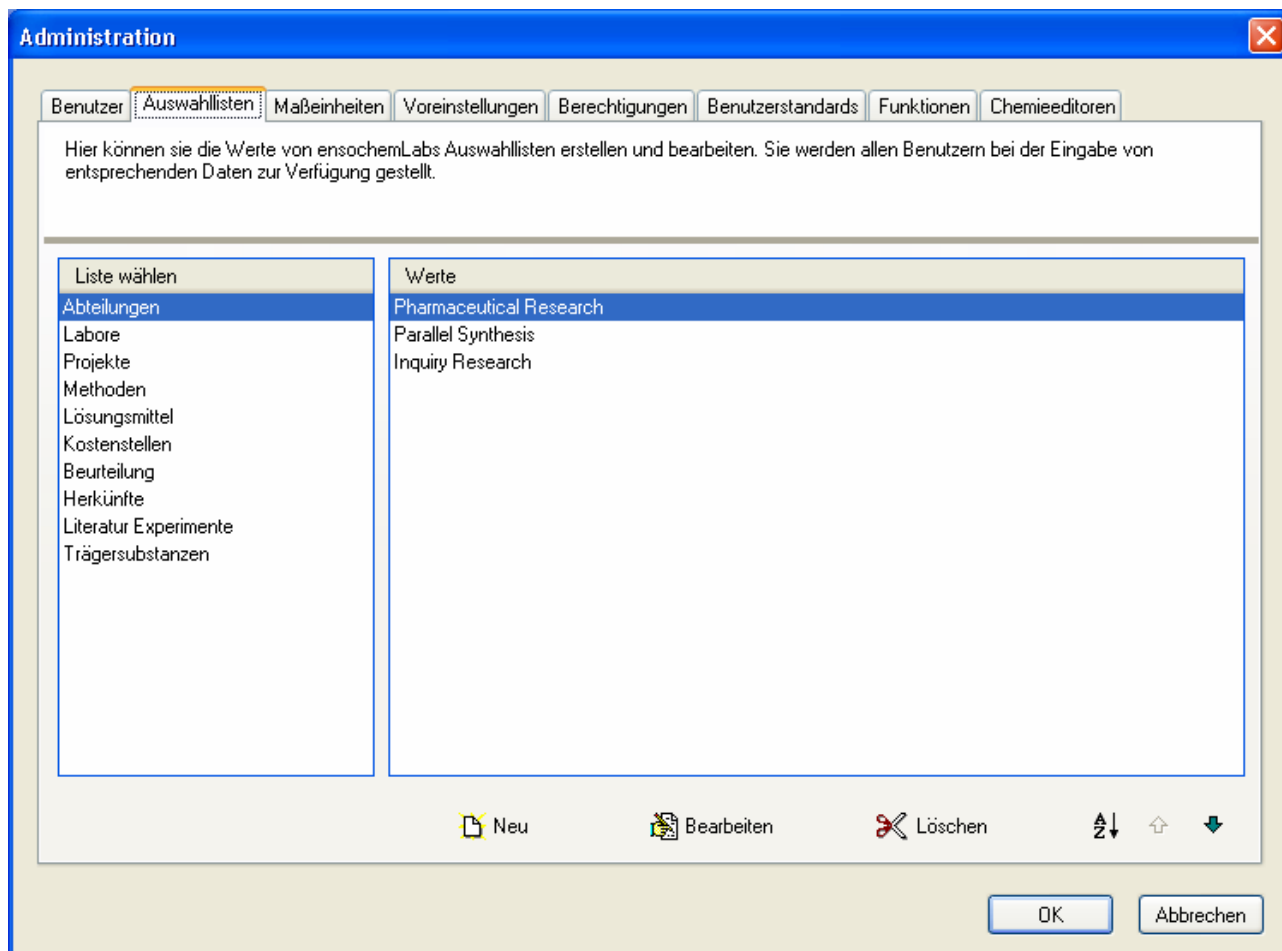
**Wichtig:** Bitte beachten Sie, dass alle Änderungen, die Sie im Administrationsdialog vornehmen erst gespeichert werden, wenn Sie den gesamten Dialog mit „OK“ verlassen. Ein Klick auf „Abbrechen“ macht, sofern nicht explizit anders angegeben, sämtliche Änderungen wieder rückgängig.

Die im Administrationsdialog vorgenommenen Änderungen werden erst bei der nächsten Anmeldung übernommen. Das bedeutet, dass Benutzer, die während Ihrer Arbeit im Administrationsdialog angemeldet sind (also auch Sie selbst), bis dahin weiter mit den alten Einstellungen arbeiten.

### 3.1. Auswahl-Listen

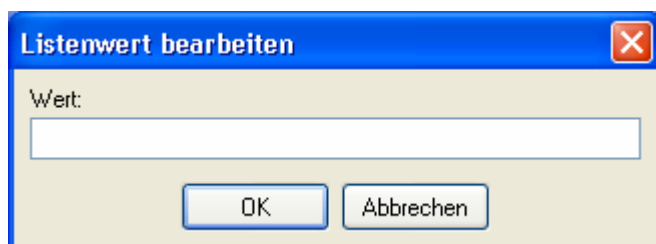
Bitte wechseln Sie zuerst zur Seite „Auswahllisten“. In ensochemLab gibt es verschiedene Listen, aus denen Benutzer Werte auswählen können, um sie nicht jedes Mal erneut eingeben zu müssen. Beispiele hierfür finden sich vor allem im Eingabeassistenten.

Auf dieser Seite können Sie solche Werte für die zur Verfügung stehenden Listentypen angeben:





Um eine Liste anzuzeigen, klicken Sie einfach links auf den Namen der gewünschten Liste. Da jede Liste einem bestimmten Datenfeld oder einer bestimmten Programmfunktion zugeordnet ist, wird das Anlegen eigener Auswahllisten nicht unterstützt.

Klicken Sie auf „Neu“ (📄), um einen neuen Eintrag in der gewählten Liste anzulegen. Das folgende Fenster erscheint:






Geben Sie den gewünschten Wert ein und klicken Sie auf „OK“, um ihn in die Liste zu speichern. Für die nächsten Schritte wird dringend empfohlen, zumindest eine Außenstelle und eine Kostenstelle anzulegen.

Alle Werte können völlig frei definiert werden und aus maximal 255 Zeichen bestehen.

Um den gerade ausgewählten Eintrag zu ändern, klicken Sie bitte auf „Bearbeiten“ () oder doppelklicken Sie auf einem Eintrag in der Liste. Die Funktion „Löschen“ () entfernt einen Eintrag aus der Liste.

**Wichtig:** Bitte beachten Sie jedoch, dass in einem Benutzerdatensatz wie einem Experiment immer eine Kopie des ausgewählten Werts gespeichert wird. Wenn Sie also einen Eintrag für eine Auswahlliste im Administrationsdialog ändern oder gar löschen, so verbleiben die alten Daten in den Experimenten.

Mit den Pfeilfunktionen („Nach oben“ () bzw. „Nach unten“ ()) können Sie den aktuellen Datensatz in der Liste nach oben oder nach unten schieben. Mit „Liste sortieren“ () sortieren Sie die Liste alphabetisch. Dabei wird eine absteigende Reihenfolge verwendet.

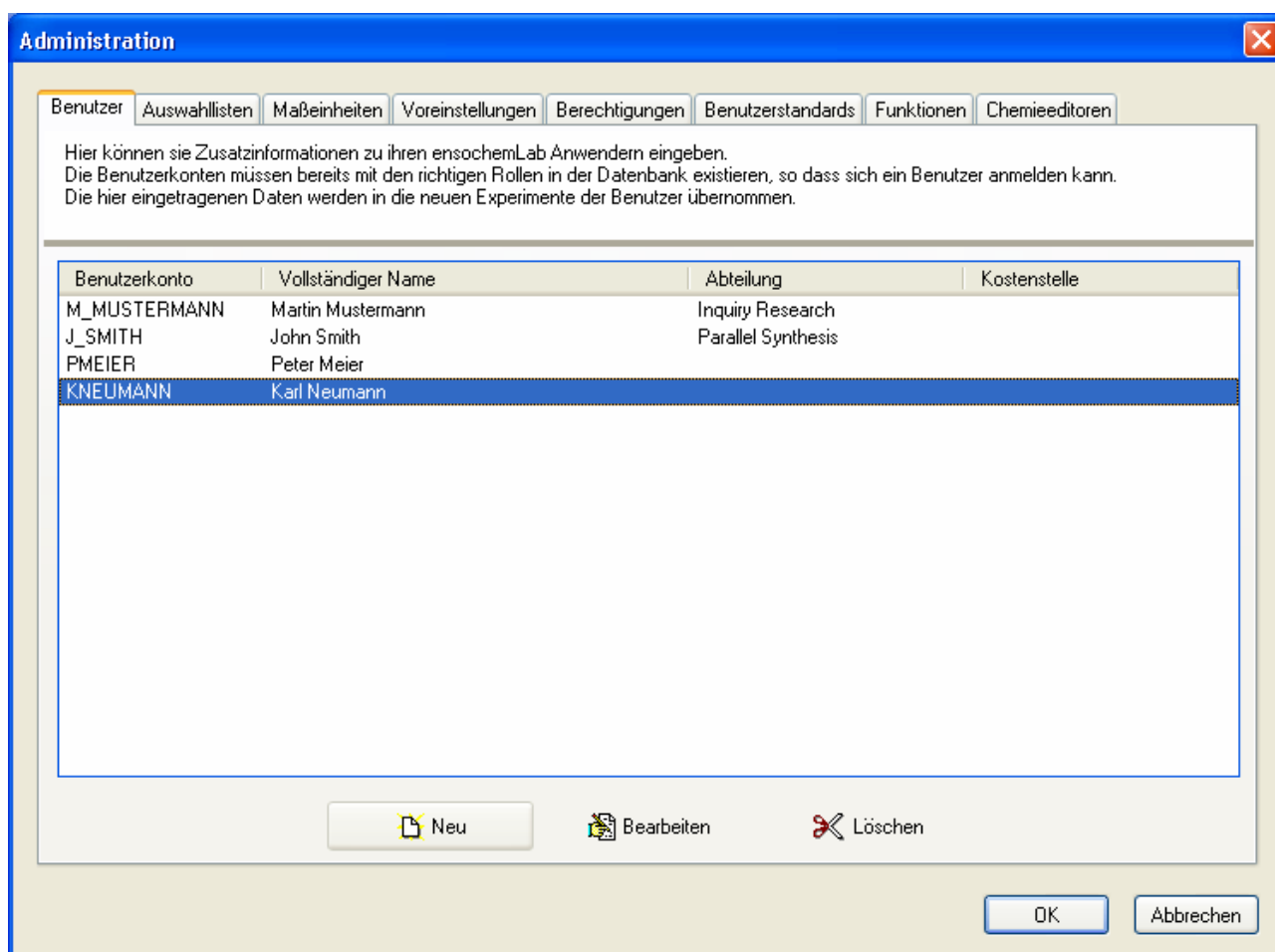
## 3.2 Benutzer

Wählen Sie auf dem Karteireiter (siehe weiter vorne) nun die Seite "Benutzer" an.

Bitte beachten Sie, dass diese Seite nicht verfügbar ist, wenn das Modul zur ensochemLab Standardbenutzerverwaltung aktiviert ist. Die Eingabe von Benutzern mit diesem Modul wird in einem der folgenden Kapitel beschrieben.

Auch bei Verwendung einer kundenspezifischen Benutzerverwaltung steht Ihnen diese Seite nicht zur Verfügung. Benutzen Sie in diesem Fall bitte Ihr gesondertes Administrationsmodul.

Diese Seite sieht wie folgt aus:



Die Liste enthält die vollständigen Namen, Abteilungen und Kostenstellen der ensochemLab Anwender.

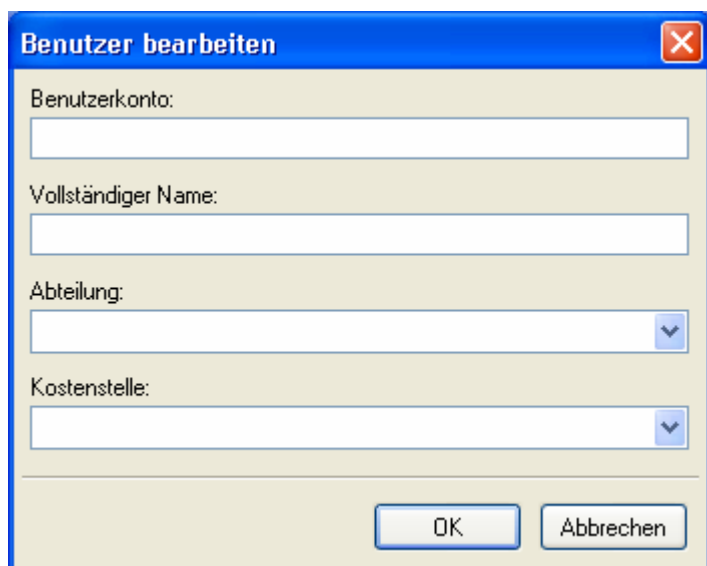
ensochemLab verwendet sie zur Unterstützung der Benutzer, indem es die entsprechenden Felder (z.B. bei einem neuen Experiment) automatisch mit den Benutzerdaten vorbelegt. Wenn Sie hier keine Daten angeben, muss der Benutzer seine Daten jedes Mal selbst in neue Experimente eintragen.

Außerdem wird der im Experiment gespeicherte vollständige Name des Besitzers aus dieser Liste ausgelesen.

Nur Administratoren können die vollständige Liste anzeigen und so an diese Mitarbeiterdaten gelangen.

Um die Liste in der Ansicht zu sortieren, klicken Sie bitte auf die Kopfzeile der entsprechenden Spalte, nach der Sie sortieren möchten. Ein erneuter Klick kehrt die Sortierreihenfolge (aufsteigend / absteigend) um.

Klicken Sie auf "Neu", um einen neuen Eintrag anzulegen. Das Eingabefenster erscheint. Geben Sie das Benutzerkonto des Anwenders (seinen Login Namen) sowie seinen vollständigen Namen an. Wählen Sie dann seine Abteilung und seine Kostenstelle. Die Auswahllisten wurden automatisch mit den Einträgen gefüllt, die Sie im letzten Schritt eingegeben haben. Klicken Sie danach auf „OK“, um den neuen Eintrag in die Liste aufzunehmen.



The image shows a dialog box titled "Benutzer bearbeiten" with a close button (X) in the top right corner. The dialog contains four input fields: "Benutzerkonto:" (text input), "Vollständiger Name:" (text input), "Abteilung:" (dropdown menu), and "Kostenstelle:" (dropdown menu). At the bottom of the dialog are two buttons: "OK" and "Abbrechen".

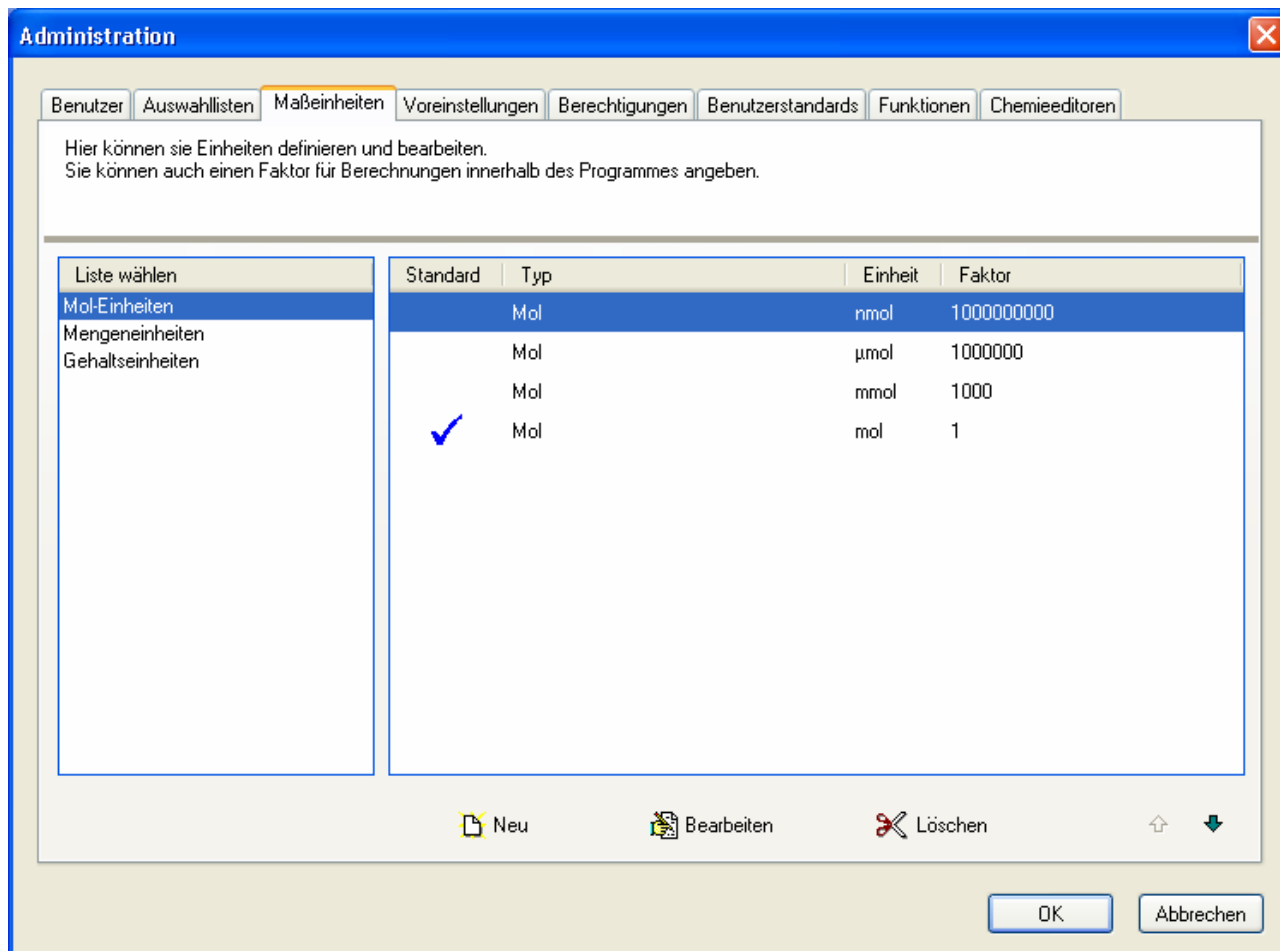
Übrigens, es gibt einen sehr einfachen Weg, diese Daten zu testen: Wenn sich ein Benutzer anmeldet, sieht er seinen vollständigen Namen in der rechten unteren Ecke des Hauptfensters. Sollte dieser Name dort nicht oder falsch erscheinen bzw. er seinen Login Namen sehen, so sind seine Benutzerdatendaten nicht korrekt oder nicht vorhanden.

Das Bearbeiten oder Löschen eines Benutzer-Eintrages verhält sich analog zu den entsprechenden Funktionen der Auswahl-Listen.

**Wichtig:** Bitte beachten Sie, dass diese Liste nicht zur Authentifizierung der Benutzer verwendet wird. Informationen zu diesem Thema finden Sie in einem gesonderten Kapitel dieses Handbuchs.

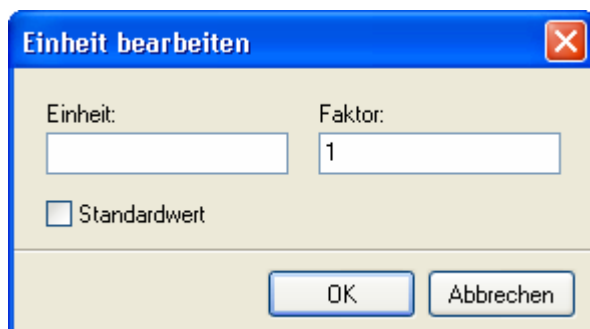
### 3.3. Maßeinheiten

Klicken Sie auf „Einheiten“ in der Tab-Leiste. Die folgende Seite erscheint:



Sie wird verwendet, um die Einheiten und ihre jeweiligen Mengenfaktoren für die Verwendung mit ensochemLab anzugeben. Nach einer Standardinstallation befinden sich bereits die am häufigsten verwendeten Einheiten wie mol, mmol, g, usw. in der Datenbank.

Wählen Sie den Einheitentyp aus der rechten Leiste aus und die zugehörigen Werte werden im rechten Teil des Fensters dargestellt. Um einen neuen Eintrag zu erstellen, klicken Sie auf „Neu“ und es erscheint ein Dialog, der in seinem Erscheinungsbild je nach gewähltem Typ abweicht. Der Dialog für Mol-Einheiten:



Falls noch kein Standardwert existiert, sollten Sie diesen zu Beginn eingeben. Es wird empfohlen, hierfür [mol] zu verwenden. Wählen Sie den Faktor 1 und klicken Sie auf „Standardwert“. Klicken Sie danach auf „OK“, um den Eintrag in die Liste einzufügen.

Weitere Dimensionen können nun erstellt werden. Der Faktor gibt den Wert an, mit dem man die jeweilige Eingabe des Benutzers multiplizieren muss, um den entsprechenden Wert in der Standardeinheit (mol) zu erhalten.

Die folgenden Einheiten werden vom Installationsprogramm standardmäßig registriert:

#### Mol-Einheiten:

Einheit	Faktor	Standard?
Mol	1	X
mmol	1000	
µmol	1000000	
nmol	1000000000	

#### Mengeneinheiten:

Typ	Einheit	Faktor	Standard?
Masse	mg	1000000000	
Masse	µg	1000000	
Masse	M	1000	
Masse	g	1	X
Masse	kg	0,001	
Masse	t	0,000001	
Volumen	nl	1000000	
Volumen	µl	1000	
Volumen	ml	1	
Volumen	l	0,001	
Volumen	hl	0,000001	
Volumen	m <sup>3</sup>	0,0000001	

#### Gehaltseinheiten:

Typ	Einheit	Faktor	Standard?
Prozent	%	100	X
Mol / Volumen	mol/l	1000	
Mol / Volumen	mmol/ml	1000	
Mol / Masse	mol/g	1	
Masse / Masse	g/g	1	
Masse / Volumen	g/ml	1	
Volumen / Volumen	ml/ml	1	
Molprozent	mol%	100	
Flächenprozent	A%	100	

Für die Mengeneinheiten verwenden Sie entsprechen [g] mit dem Faktor 1, mg mit dem Faktor 1000, kg mit dem Faktor 0,001 usw.

Wie man einen Eintrag bearbeitet oder löscht, kennen Sie bereits von den Auswahllisten und Benutzer-Einstellungen.

### 3.4. Voreinstellungen

Wählen Sie den Tab „Voreinstellungen“ an. Die folgende Seite erscheint:

Diese Seite dient zum Definieren der Voreinstellungen Ihrer Benutzer sowie zum Festlegen einiger allgemeiner Programmeinstellungen.

Im oberen Feld können Sie eine URL zu ensochemEditor Web Edition und der zugehörigen Hilfeseite angeben. Diese werden von den Clients zum integrierten Aufruf des Editors verwendet. Normale Anwender können die URLs nicht ändern.

Wenn Sie keine URL angeben, versucht ensochemLab, die benötigten Dateien auf den lokalen Computern der Anwender zu finden. Dies bedeutet jedoch, dass auf jedem dieser PCs ein Unterverzeichnis „ChemEdit“ im ensochemLab Programmordner installiert sein muss. Ein solches Vorgehen wird jedoch nicht empfohlen.

Bei einer Standardinstallation ist die URL bereits korrekt eingetragen. Sie wurde hier nach folgendem Schema erstellt:

<http://<ServerName>/<VirtDir>/ensoChemEdit/ChemEdit.htm>

Die Informationsseite lautet:

<http://<ServerName>/<VirtDir>/ensoChemEdit/ChemEditHelp.htm>

Die Platzhalter müssen dabei nach dieser Tabelle ersetzt werden:

Platzhalter	Bedeutung	Standardwert
<ServerName>	Der vollständige DNS Name oder die vollständige IP Adresse Ihres Servers. Für <u>lokale</u> Tests können Sie „localhost“ verwenden. Bitte beachten Sie, dass Ihre Benutzer den Server nur über seinen vollständigen Namen erreichen können.	Localhost
<VirtDir>	Der Name von ensochemLabs virtuellem Verzeichnis. Er wurde während der Serverinstallation festgelegt.	ensochemLab

Um die Reihenfolge der Kapitel im Eingabeassistenten zu ändern, wählen Sie das gewünschte Kapitel aus der Liste aus und verwenden Sie dann einfach die Pfeile auf der rechten Seite, um es entweder nach oben oder nach unten zu bewegen.

Diese Reihenfolge kann von jedem Benutzer mit seinen persönlichen Einstellungen überschrieben werden.

Der Firmenname sollte den vollständigen Namen Ihres Unternehmens enthalten.

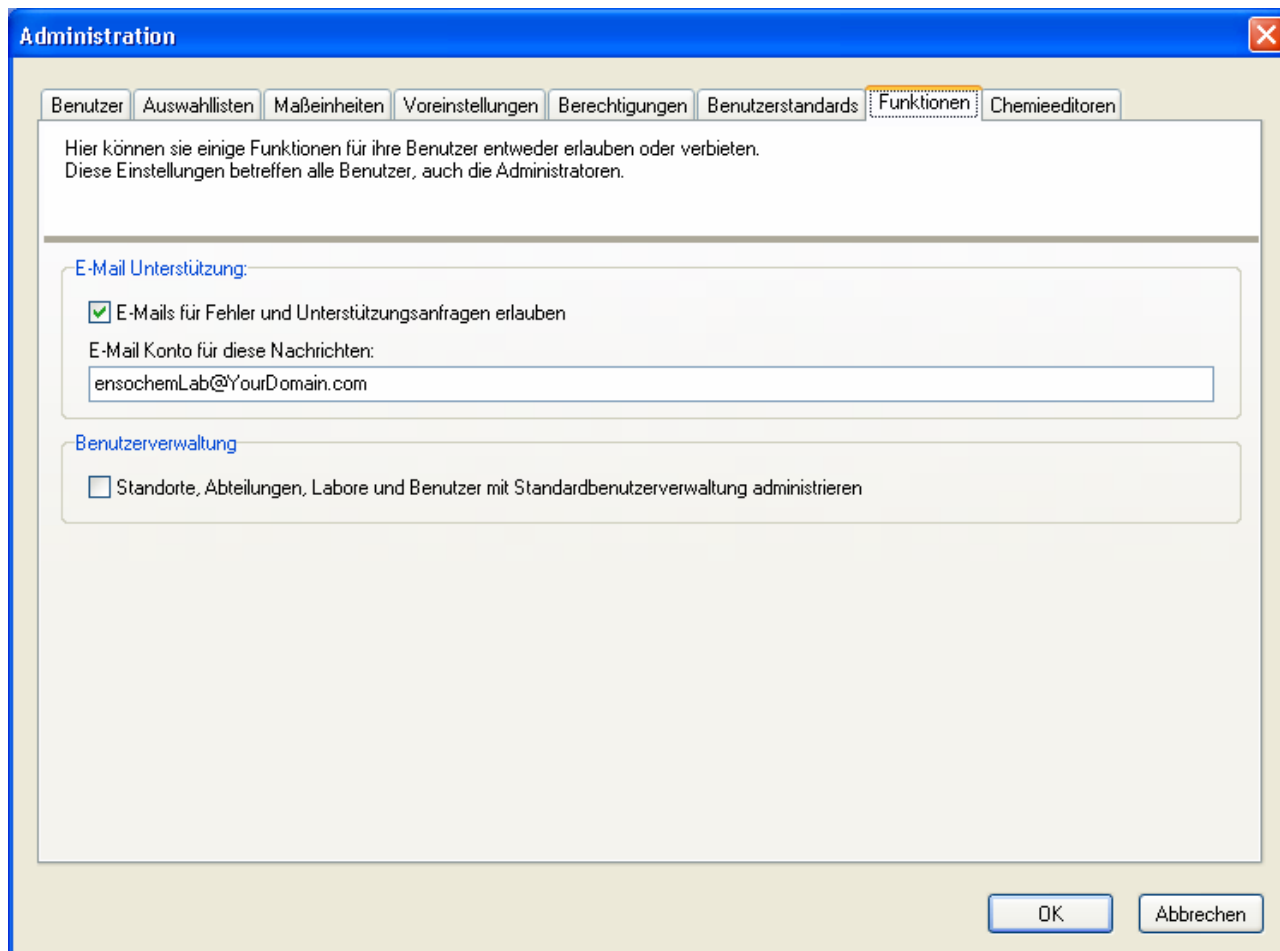
Der Editionstext ist ein frei definierbarer Text, der im Informationsfenster angezeigt wird. Dies kann der Name Ihres Unternehmens oder ein interner Versionsname sein.

Das Feld „Lizenzschlüssel“ dient zur Eingabe der Lizenznummer, die Sie von der enso Software GmbH oder einem unserer Vertriebspartner erworben haben. Dies kann auch eine Demo-Kennung sein. Falls Sie einen ungültigen oder gar keinen Wert angeben, kann ensochemLab nicht verwendet werden, da sich außer einem Administrator niemand bei ensochemLab anmelden kann.

Den eingegebenen Schlüssel können Sie anhand der Anzeige unter dem Feld überprüfen. Dort findet eine Auswertung nach Art und Dauer der Lizenz statt.

### 3.5. Funktionen

Wählen Sie nun den Tab „Funktionen“. Es erscheint folgende Seite:



An dieser Stelle können Sie einige zusätzliche Funktionen von ensochemLab steuern. So können Sie Ihren Benutzern erlauben, Problembeschreibungen und Unterstützungsanfragen an das ensochemLab Unterstützungs-Team zu senden. Hierfür können Sie auch die Zieladresse ändern, wenn Sie über einen eigenen firmeninternen Support verfügen.

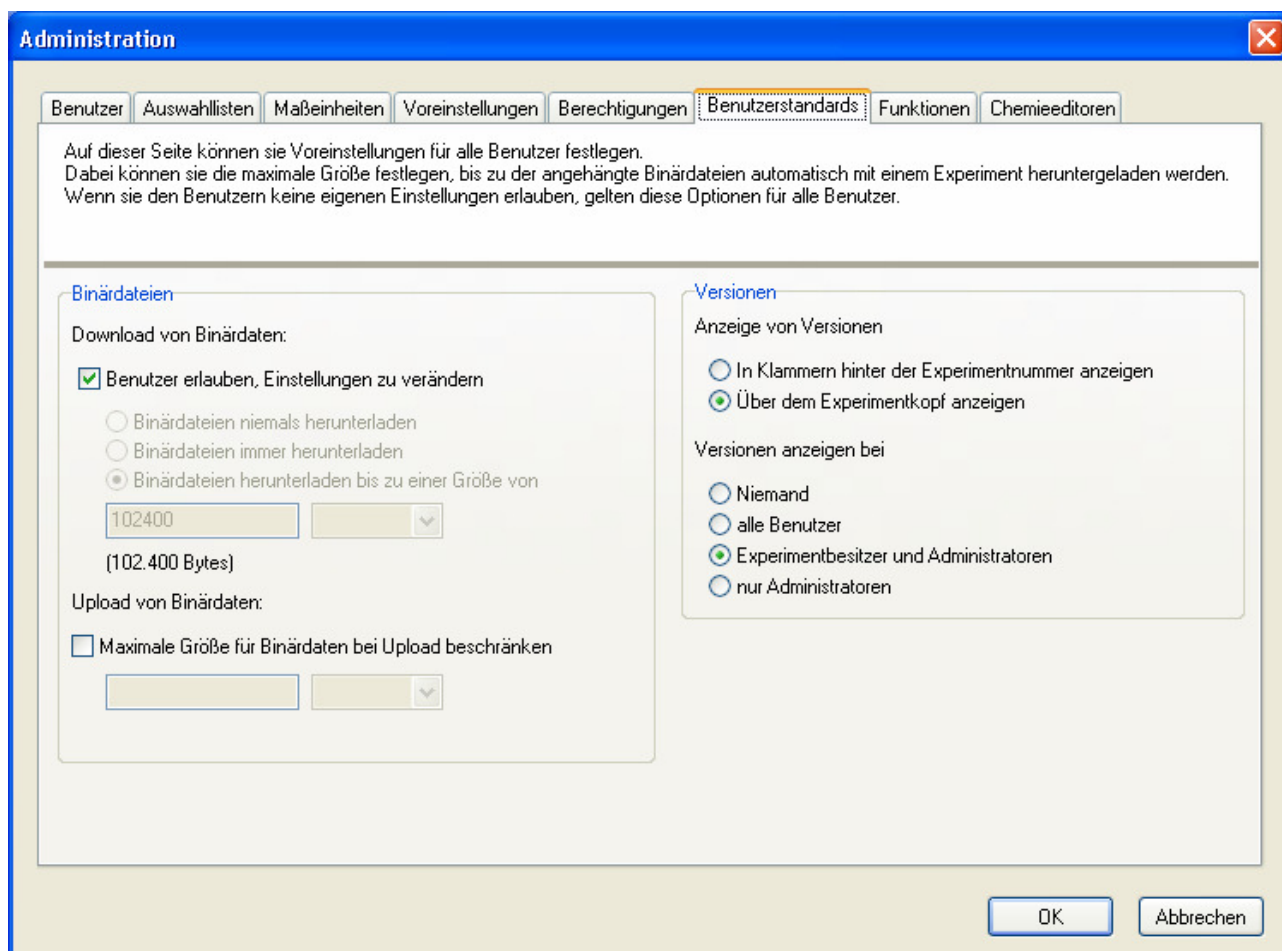
Die Standardbenutzerverwaltung ist ein in ensochemLab integriertes Modul, mit dem Sie bequem und einfach Labore, Standorte, Abteilungen und Benutzer verwalten können. Seine Möglichkeiten gehen damit deutlich über die bereits besprochene Benutzerliste hinaus.

Der Benutzerverwaltung ist ein eigenes Kapitel in diesem Handbuch gewidmet, das näher auf alle Einstellmöglichkeiten eingeht.

Falls Ihre speziell angepasste Unternehmensversion über eine eigene Benutzerverwaltung verfügt, so ist diese getrennt an- und abzuschalten bzw. zu konfigurieren. Weitere Informationen hierzu erhalten Sie über Ihren Vertriebspartner.

### 3.6. Benutzerstandards

Die nächste Seite befasst sich mit Voreinstellungen, die Sie als Administrator für alle Benutzer festlegen können:



Wenn Sie die maximale Größe, bis zu der Binärdaten automatisch mit einem Experiment herunter geladen werden, für Ihre Benutzer vorschreiben möchten, entfernen Sie bitte den Haken bei „Benutzer erlauben, Einstellungen zu verändern“. Wählen Sie anschließend eine der drei Möglichkeiten und geben Sie, falls nötig, eine Maximalgröße ein.

Wenn Sie den Haken nicht entfernen, können Ihre Benutzer diese Option selbst in ihren persönlichen Einstellungen festlegen.

Daneben können Sie auch die maximale Binärdatengröße beim Upload beschränken. Dies kann zum Beispiel genutzt werden, um zu verhindern, dass Benutzer die Datenbank mit zu großen Inhalten unnötig wachsen lassen.

Außerdem können Sie angeben, wie die aktuelle Versionsnummer zu einem Experiment angezeigt werden soll. Hierfür gibt es zwei Möglichkeiten: Sie können die Angabe entweder direkt hinter der Experimentnummer oder im Kopfbereich über den restlichen Daten anzeigen.

Falls gewünscht, kann die Anzeige von Versionsinformationen auch auf bestimmte Benutzerkreise beschränkt werden. Standardmäßig erhalten alle Benutzer Zugriff. Sie können die Anzeige auf den Besitzer und die Administratoren bzw. nur die Administratoren beschränken oder sie auch gänzlich deaktivieren.

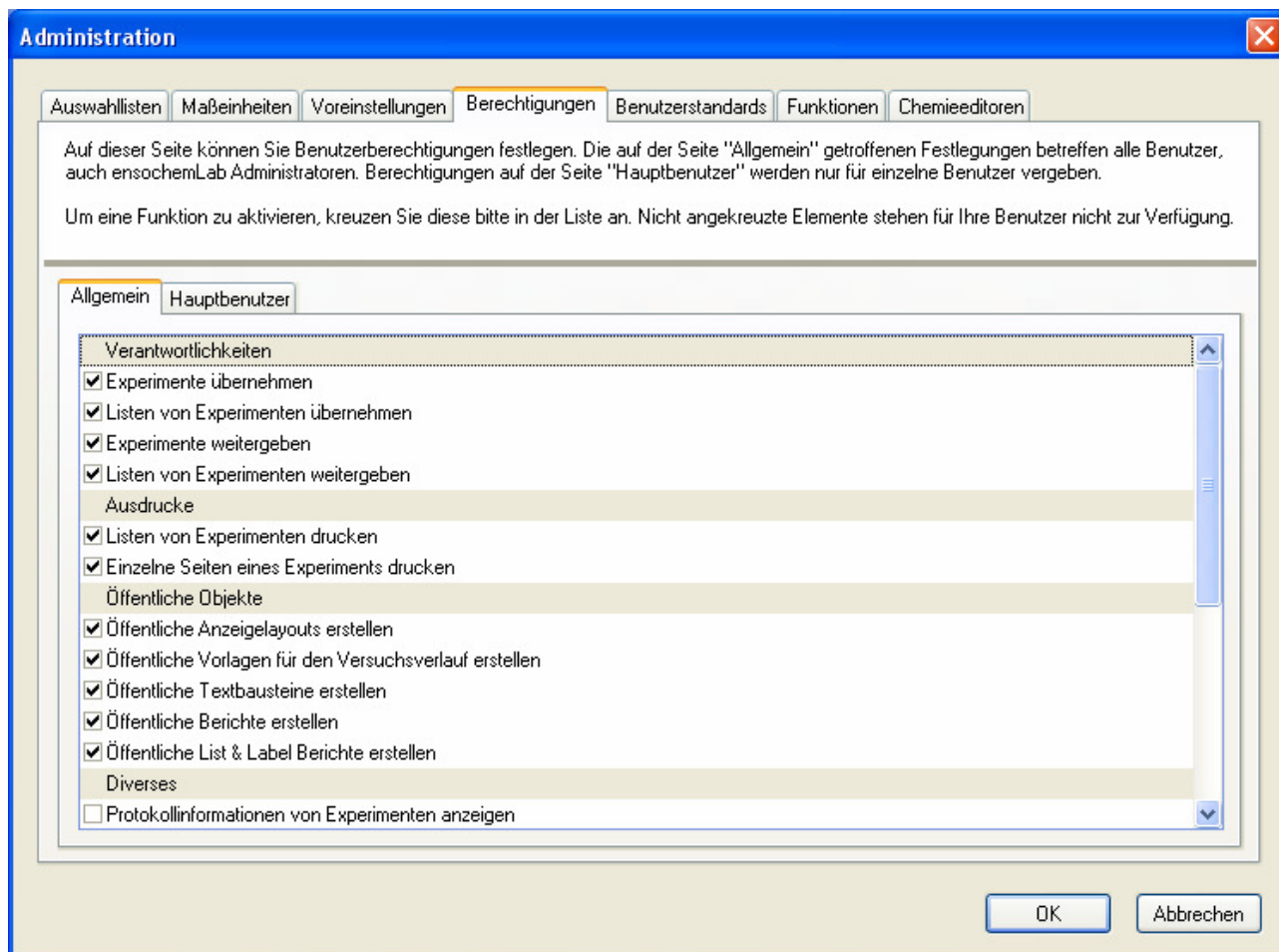
Bitte beachten Sie, dass es sich beim Versionsmodul um eine optionale Erweiterung handelt, die gesondert lizenziert und installiert werden muss. Daher sind die entsprechenden Einstellungen unter Umständen in Ihrer Installation nicht verfügbar.

## 3.7. Berechtigungen

Diese Seite bietet die Möglichkeit einerseits die Verfügbarkeit allgemeiner Features zu steuern und darüber hinaus die Übertragung von administrativen Aufgaben an Hauptbenutzer.

### 3.7.1. Allgemein

Auf dieser Seite können Sie festlegen, welche Berechtigungen Sie Ihren Benutzern erteilen möchten. Bitte beachten Sie, dass diese Einstellungen für alle Benutzer inklusive der ensochemLab Administratoren gelten.



Wenn Sie eine Funktion aktivieren möchten, kreuzen Sie bitte das entsprechende Element in der Liste an. Um eine Funktion zu deaktivieren, entfernen Sie einfach den Haken. Da die meisten Funktionen relativ einfach nachvollziehbar sind, folgen nur einige wenige Erklärungen:

Eine Option ist die Besitzübernahme von Experimenten. Ein Experiment kann nur von seinem Besitzer geändert werden. Das Aktivieren der Besitzübernahme ermöglicht z.B. einer Urlaubs- oder Krankheitsvertretung, das Journal fortzuführen, bis der zuständige Mitarbeiter wieder verfügbar ist.

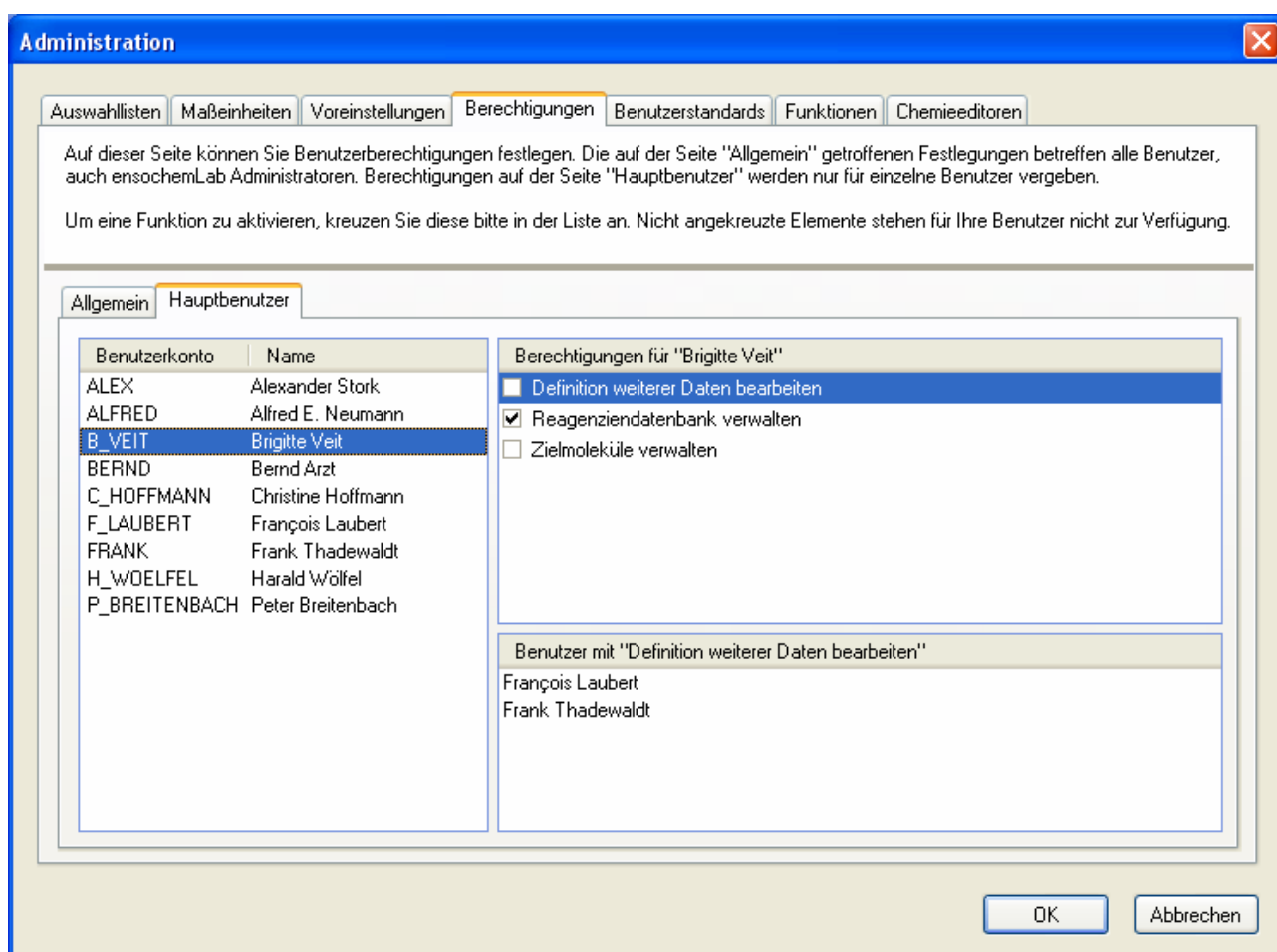
Die Protokollinformationen enthalten alle Änderungen, die explizit in der Datenbank protokolliert werden. Dazu gehören Besitzübernahmen und Rücksetzungen eines Experiments auf den Status „in Arbeit“. Diese Informationen werden normalerweise nur Administratoren angezeigt. Wenn Sie die entsprechende Option im Administrationsdialog aktivieren, können auch Benutzer das Protokoll einsehen. Das Protokoll kann jedoch weder von Administratoren noch von Benutzern geändert oder gelöscht werden.

Wenn die Option "Anwendern erlauben Nachträge an Experimente anzuhängen" aktiviert ist darf jeder Benutzer mit Schreibrechten Anhänge bestehend aus Titel, Kommentar und optionaler Datei mit Binärdaten an beliebige Experimente anhängen. Diese Möglichkeit besteht unabhängig davon vom Eigentümer oder Status des Experiments. Einmal eingegebene Anhänge können nicht mehr verändert oder gelöscht werden.

Außerdem können Sie die Verfügbarkeit von optionalen Programmteilen steuern. Derzeit handelt es sich hierbei um die Funktionsblöcke: Fraktionen, Berichte, Direkteingabe, Zielmoleküle, Import/Export von Literaturdaten und Mehrstufige Reaktionen.

### 3.7.2. Hauptbenutzer

Auf dieser Seite können Sie festlegen, welche Berechtigungen Sie ausgewählten Hauptbenutzern erteilen möchten. Die entsprechenden Anwender haben daraufhin ein, auf die zugeteilten Aufgaben beschränktes, Administrationsmenü zur Verfügung.

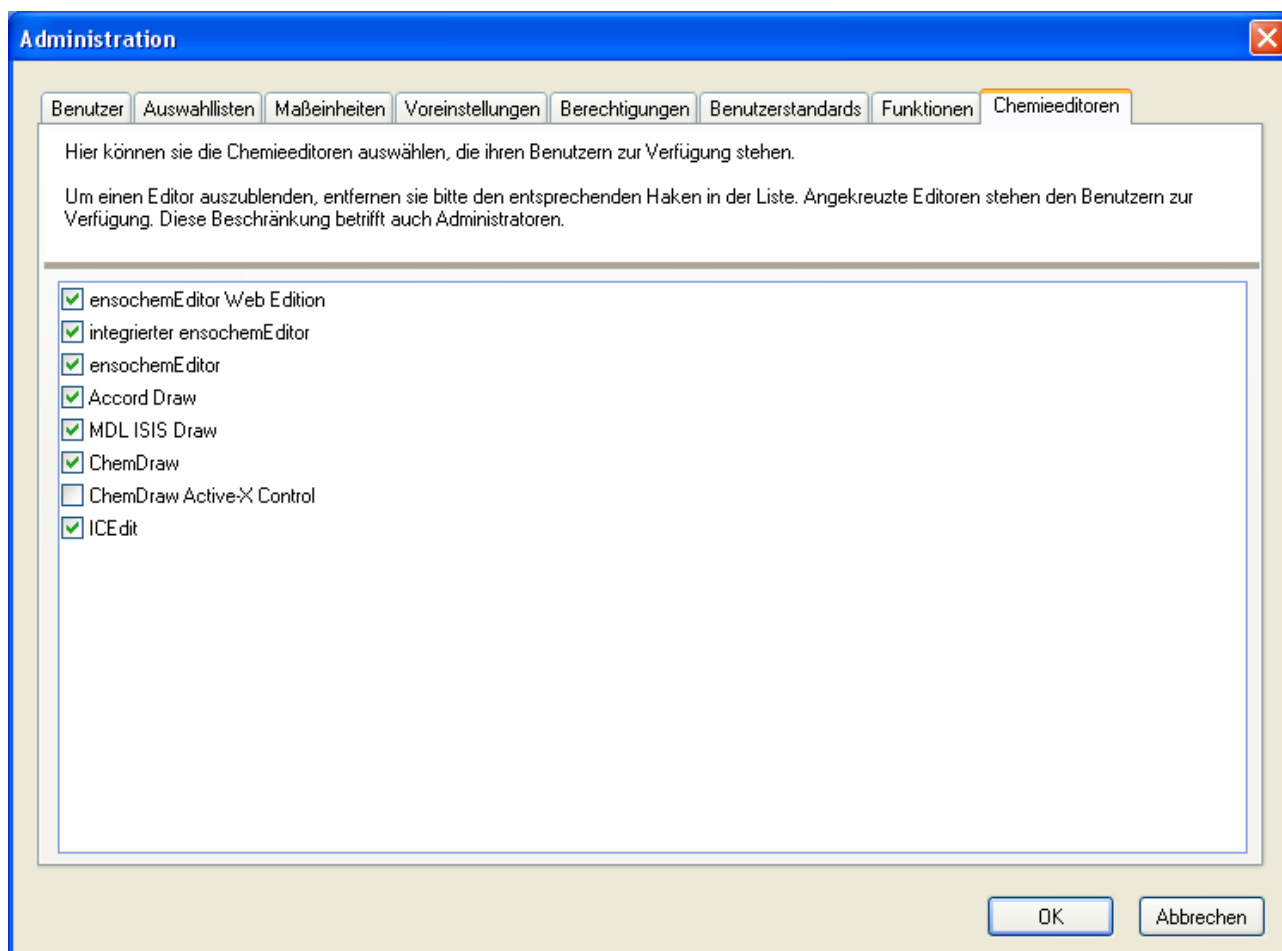


Wählen Sie zunächst den entsprechenden Benutzer in der Liste aus. Die derzeit vergebenen Berechtigungen werden daraufhin angezeigt und zusätzlich zur jeweils ausgewählten Aufgabe alle benannten Hauptbenutzer.

Wenn Sie eine Berechtigung vergeben möchten, kreuzen Sie bitte das entsprechende Element in der Liste an. Um eine solche zu entziehen, entfernen Sie einfach den Haken.

### 3.8. Chemieeditoren

Betrachten wir nun die Seite „Chemieeditoren“. Sie dient dazu, die Liste der Ihren Benutzern zur Verfügung stehenden Chemieeditoren einzuschränken.



Um einen Editor zu deaktivieren, entfernen Sie bitte den entsprechenden Haken in der Liste. Es stehen immer nur angekreuzte Editoren zur Verfügung.

Bitte beachten Sie, dass diese Beschränkungen auch für Administratoren gelten und dass ein Editor auf dem jeweiligen Client installiert sein muss, um verwendet werden zu können.

ensochemEditor Web Edition ist der Standardeditor und kann somit nicht deaktiviert werden. Er kommt immer dann zum Einsatz, wenn ein Benutzer in seinen persönlichen Einstellungen keinen anderen Editor ausgewählt hat oder ein alternativer Editor nicht zur Verfügung steht. Ein Austausch des Standardeditors ist leider nicht möglich.

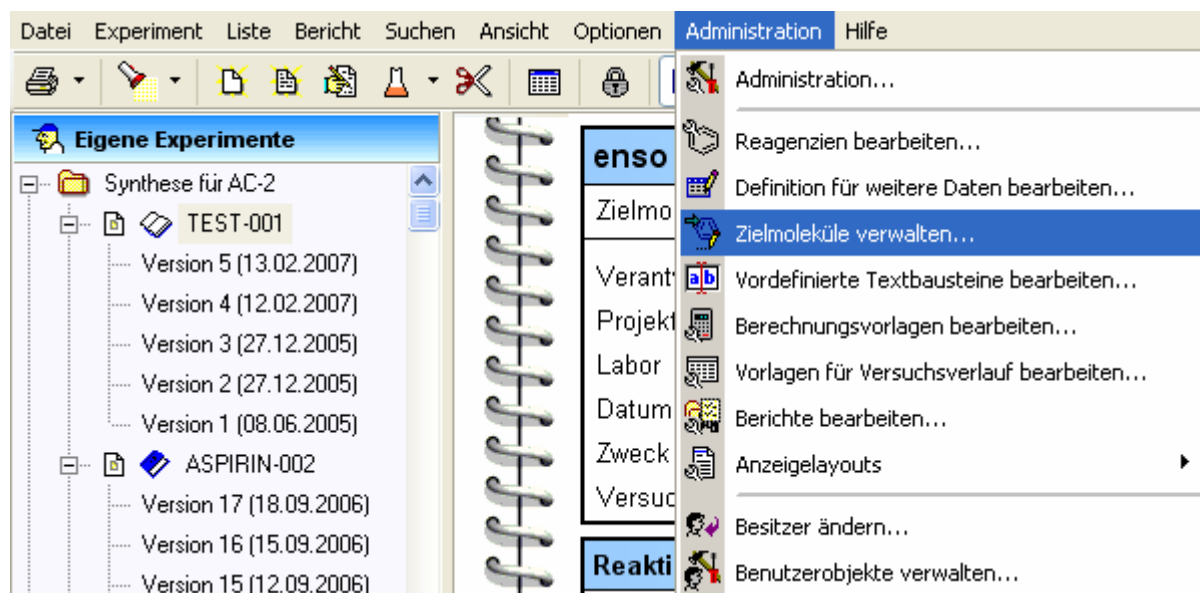
## 4. Zielmoleküle

Benutzer können Produkte als allgemeine Zielmoleküle registrieren und sie mit Namen versehen. Dies geschieht immer aus der Bearbeitung eines Experiments heraus. Einmal gespeicherte Daten können dabei nicht mehr verändert werden.

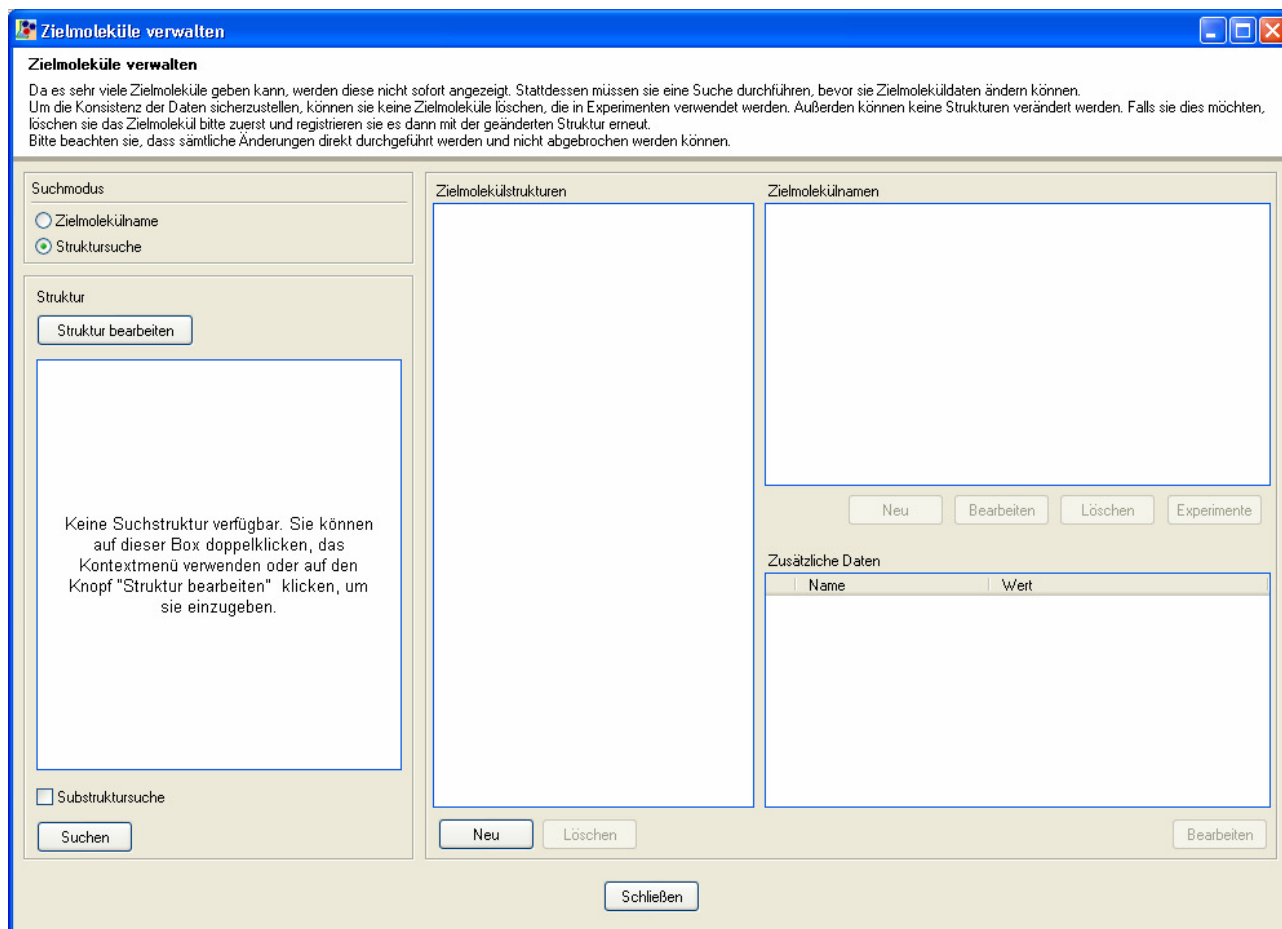
Als Administrator haben Sie zusätzlich noch die Möglichkeit, die komplette Liste der Zielmoleküle zu verwalten. Hierbei können auch Elemente verändert oder gelöscht werden.

Eine Einschränkung gibt es jedoch auch für den Administrator: Sie können keine Daten löschen, die in Experimenten verwendet werden. Ist Produkt A aus Experiment B als Zielmolekül mit dem Namen C registriert, so kann weder das Zielmolekül A noch der Name C gelöscht werden. Hierfür muss zuerst explizit das Experiment bearbeitet und die Zuordnung aufgehoben werden. Diese Einschränkung ist nötig, um die Integrität der Daten innerhalb der Anwendung sicherzustellen.

Seit Version 2.1 befindet sich die Administration der Zielmoleküle in einem separaten Dialog. Sie können diesen im Hauptmenü unter „Administration \ Zielmoleküle verwalten“ finden:



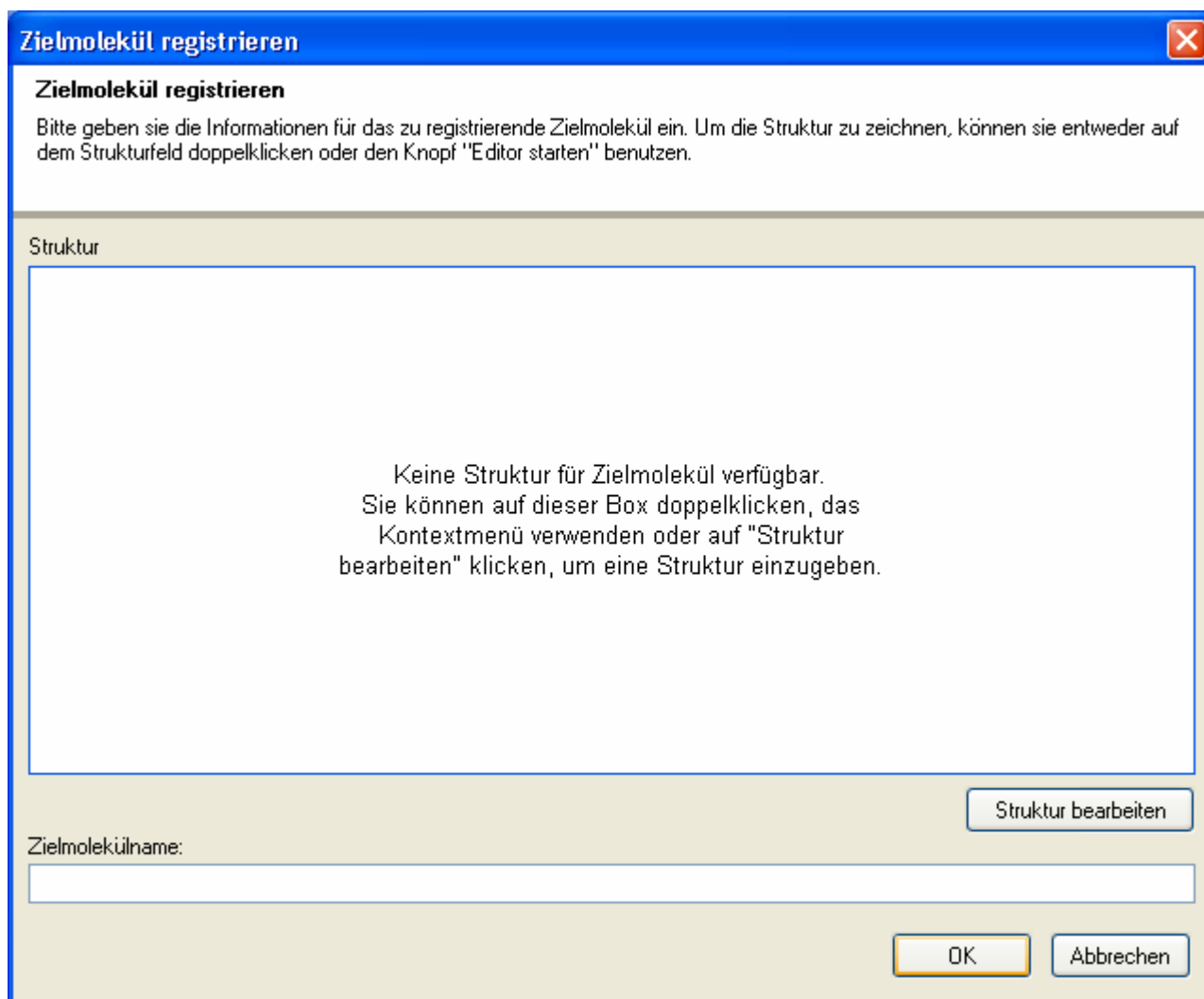
Das Fenster startet mit der folgenden Ansicht:



Da es sehr viele Zielmoleküle in einer ensochemLab Datenbank geben kann, werden nach dem Aufruf des Dialogs nicht alle Datensätze automatisch geladen und angezeigt. Sie können entweder direkt ein neues Zielmolekül anlegen oder nach dem gewünschten Datensatz suchen.

## 4.1. Zielmoleküle anlegen

Wir beginnen damit, ein neues Zielmolekül anzulegen. Klicken Sie dazu bitte auf den „Neu“ Knopf unterhalb der linken Liste („Zielmolekülstrukturen“). Der Dialog zum Registrieren von Zielmolekülen entspricht exakt dem Dialog für Standardbenutzer, der im Benutzerhandbuch eingehend erklärt wird. Dennoch sei er im Folgenden noch einmal dargestellt:



Um Ihre gewünschte Zielmolekülstruktur zu zeichnen, doppelklicken Sie bitte entweder auf dem Strukturfeld, klicken Sie auf „Struktur bearbeiten“ oder verwenden Sie den Eintrag „Struktur bearbeiten“ im Kontextmenü (📏). Es erscheint der in Ihren Benutzereinstellungen definierte Chemieeditor.

Anschließend müssen Sie noch einen ersten Namen für Ihren neuen Datensatz eingeben. Wenn Sie Ihre Eingabe abgeschlossen haben, klicken Sie bitte auf „OK“.

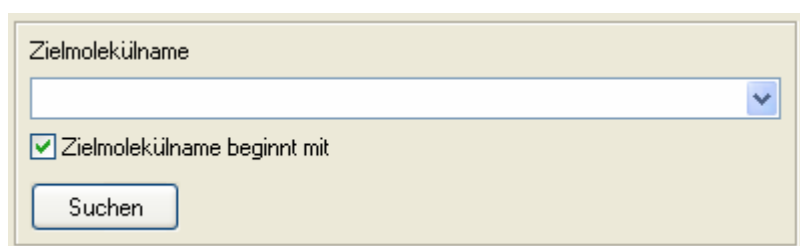
Das neue Zielmolekül wird nun in die Übersichtsliste des ersten Dialogs übernommen.

## 4.2. Zielmoleküle suchen

Um bereits existierende Datensätze anzuzeigen, müssen Sie zuerst eine Suche durchführen. Dies kann entweder eine Chemie- oder eine Textsuche sein. Bitte wählen Sie im Auswahlfeld links oben im Fenster den gewünschten Suchmodus.

Falls Sie eine Struktursuche durchführen möchten, doppelklicken Sie bitte auf dem entweder Strukturfeld oder verwenden Sie den Eintrag „Struktur bearbeiten“ aus dem Kontextmenü (🖋️), um die zu suchende Struktur zu zeichnen. Optional können Sie das Feld „Substruktursuche“ ankreuzen, um nach Teilen einer Zielmolekülstruktur zu suchen.

Bei einer Textsuche können Sie entweder nach einem exakten Text oder nach dem Anfang eines Texts suchen, wenn Sie „Zielmolekülname beginnt mit“ ankreuzen. Es werden hierbei sowohl der Name als auch alle Synonyme durchsucht.



The image shows a search form with a light beige background. At the top, the label 'Zielmolekülname' is positioned above a white text input field with a blue border and a small blue downward arrow on the right side. Below the input field, there is a checked checkbox (indicated by a green checkmark) followed by the text 'Zielmolekülname beginnt mit'. At the bottom of the form, there is a rectangular button with rounded corners and a blue border, containing the text 'Suchen'.

Klicken Sie auf „Suchen“, um Ihre Suche zu starten. Das Ergebnis wird nun in die beiden Listen eingetragen.

### 4.3. Zielmoleküle verwalten

Die Liste auf der linken Seite enthält nun die Strukturen der neu registrierten oder durch Suchen gefundenen Zielmoleküle. Sobald Sie einen Eintrag auswählen, werden in der Liste auf der rechten Seite alle zugehörigen Synonyme angezeigt.

**Zielmoleküle verwalten**

Da es sehr viele Zielmoleküle geben kann, werden diese nicht sofort angezeigt. Stattdessen müssen sie eine Suche durchführen, bevor sie Zielmoleküldaten ändern können. Um die Konsistenz der Daten sicherzustellen, können sie keine Zielmoleküle löschen, die in Experimenten verwendet werden. Außerdem können keine Strukturen verändert werden. Falls sie dies möchten, löschen sie das Zielmolekül bitte zuerst und registrieren sie es dann mit der geänderten Struktur erneut. Bitte beachten sie, dass sämtliche Änderungen direkt durchgeführt werden und nicht abgebrochen werden können.

Suchmodus

Zielmolekülname  
 Struktursuche

Zielmolekülname

Aspirin

Zielmolekülname beginnt mit

Suchen

Zielmolekülstrukturen

Zielmolekülnamen

Aspirin

Neu Bearbeiten Löschen Experimente

Zusätzliche Daten

Name	Wert
Zusätzliche Daten	1258 EJ
Schmelzpunkt	123 - 321 °C

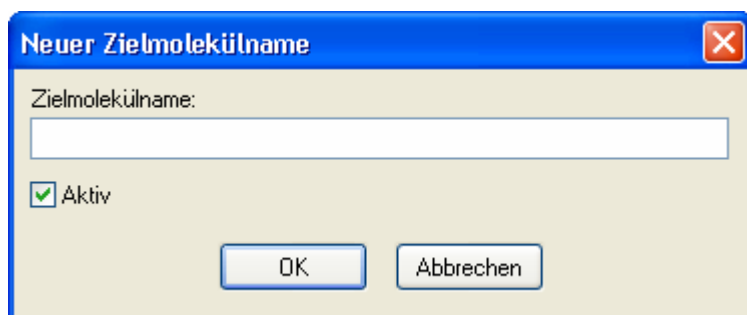
Neu Löschen Bearbeiten

Schließen

Weitere Informationen zu einem Synonym erhalten Sie, wenn Sie die Maus über das Informationssymbol (👤) der entsprechenden Zeile bewegen. Dabei werden der Besitzer des Eintrags sowie das Erstellungsdatum angezeigt.

Wie Sie sicher bereits gehen haben, befindet sich vor dem ersten Namen eines neu registrierten Zielmoleküls ein kleines Symbol: 💡. Dieses Symbol gibt an, dass dieser Zielmolekülname aktiv ist und somit von Benutzern verwendet werden kann. Inaktive Namen sind mit dem Symbol ⚪ gekennzeichnet und werden für Benutzer nicht angezeigt. Sind alle Namen eines Zielmoleküls inaktiv, wird das gesamte Zielmolekül ausgeblendet.

Sie können nun die Treffermenge bearbeiten, indem Sie zum Beispiel neue Synonyme für das Zielmolekül angeben. Klicken Sie hierzu auf den „Neu“ Knopf unterhalb der oberen rechten Liste. Es erscheint ein Fenster zur Eingabe des Synonyms:



Nachdem Sie den Namen eingegeben haben, klicken Sie bitte auf „OK“. Er wird zur rechten Liste mit den Synonymen hinzugefügt.

Wenn Sie ein bereits existierendes Synonym bearbeiten möchten, wählen Sie es bitte aus und klicken Sie danach auf „Bearbeiten“. Der gleiche Dialog wird nun mit den bestehenden Daten geöffnet und Sie können diese bearbeiten.

Um ein Synonym zu löschen, klicken Sie bitte auf „Löschen“.

Wie bereits weiter oben angesprochen kann ein Synonym aber nur dann gelöscht werden, wenn es noch für kein Experiment verwendet wird bzw. darin eine entsprechende Referenz angegeben wurde. Sollte dies der Fall sein, erhalten Sie eine entsprechende Fehlermeldung.

Mit dem Knopf „Experimente“ können Sie eine Liste aller Experimente anzeigen, die auf den aktuell ausgewählten Zielmolekülnamen verweisen. Die Liste enthält jeweils die Experimentnummer, den Besitzer, den Status und, falls das Zusatzmodul für die Versionsverwaltung installiert ist, die aktuelle Versionsnummer. Bitte beachten Sie, dass es sich hierbei nur um eine informative Liste handelt. Ein automatisches Löschen ist bewusst nicht vorgesehen, um Datenverlust zu vermeiden.

Sie können auch gesamte Zielmoleküle löschen, indem Sie diese in der Liste auf der linken Seite auswählen und dann auf „Löschen“ klicken. Es gelten hierbei die gleichen Einschränkungen wie für Synonyme. Außerdem kann die Struktur eines Zielmoleküls nicht bearbeitet werden. Sie können es lediglich löschen und mit einer anderen Struktur neu anlegen.

**Wichtiger Hinweis:** Bitte beachten Sie, dass Änderungen an den Zielmolekülen sofort durchgeführt werden. Sie können ein gelöscht Zielmolekül bzw. Synonym daher nicht durch Abbrechen des Dialogs wiederherstellen.

Die untere Liste auf der rechten Seite zeigt zusätzliche Daten für das aktuelle Zielmolekül an. Hierbei handelt es sich um die vom Administrator definierten Datenfelder (siehe Kapitel „Definitionen für weitere Daten“). Angezeigt werden jedoch nur die Felder, die auch einen Wert enthalten.

Um Daten einzugeben oder zu verändern, klicken Sie bitte auf den „Bearbeiten“ Knopf unten rechts. Um direkt einen bestimmten Wert zu ändern, doppelklicken Sie bitte auf dem entsprechenden Eintrag in der Liste.

Der folgende Bearbeitungsdialog erscheint:

**Weitere Daten bearbeiten** ✖

**Zusätzliche Daten bearbeiten**

Die Felder der zusätzlichen Daten sind vom Administrator vordefiniert. Abhängig von der Definition können sie Werte, Wertebereiche oder Texte eingeben. Einige Felder verfügen zusätzlich über die Möglichkeit, eine Bedingung anzugeben, unter welcher der Wert ermittelt wurde.

Mit dem Auswahlkästchen in der mittleren Spalte können sie festlegen, ob ein Datensatz übernommen werden soll, wenn ein Benutzer ein Produkt als Zielmolekül markiert.

Brechungsindex	<input type="checkbox"/>	
Dampfdruck	<input type="checkbox"/>	
Flammpunkt	<input type="checkbox"/>	
Refraktion	<input type="checkbox"/>	
Schmelzpunkt	<input checked="" type="checkbox"/>	123 - 321 °C
Siedepunkt	<input type="checkbox"/>	
Zündpunkt	<input type="checkbox"/>	
Zusätzliche Daten	<input checked="" type="checkbox"/>	1258 EJ

Die Tabelle enthält links jeweils den Namen des zusätzlichen Datenfelds. Rechts davon können Sie durch einen Klick in die entsprechende Spalte Daten eintragen, verändern oder löschen. Die Eigenschaften des jeweiligen Felds hängen von der Definition des zusätzlichen Datenfelds ab.

Mit dem Ankreuzfeld in der zweiten Spalte der Tabelle können Sie festlegen, ob die entsprechenden Daten Ihren Benutzern im Eingabeassistenten zur Übernahme in die jeweiligen Produkte angeboten werden sollen. Bitte beachten Sie, dass die daher auch nur Felder mit Inhalt ankreuzen können. Ein Löschen des Inhalts entfernt auch die Markierung für die Übernahme.

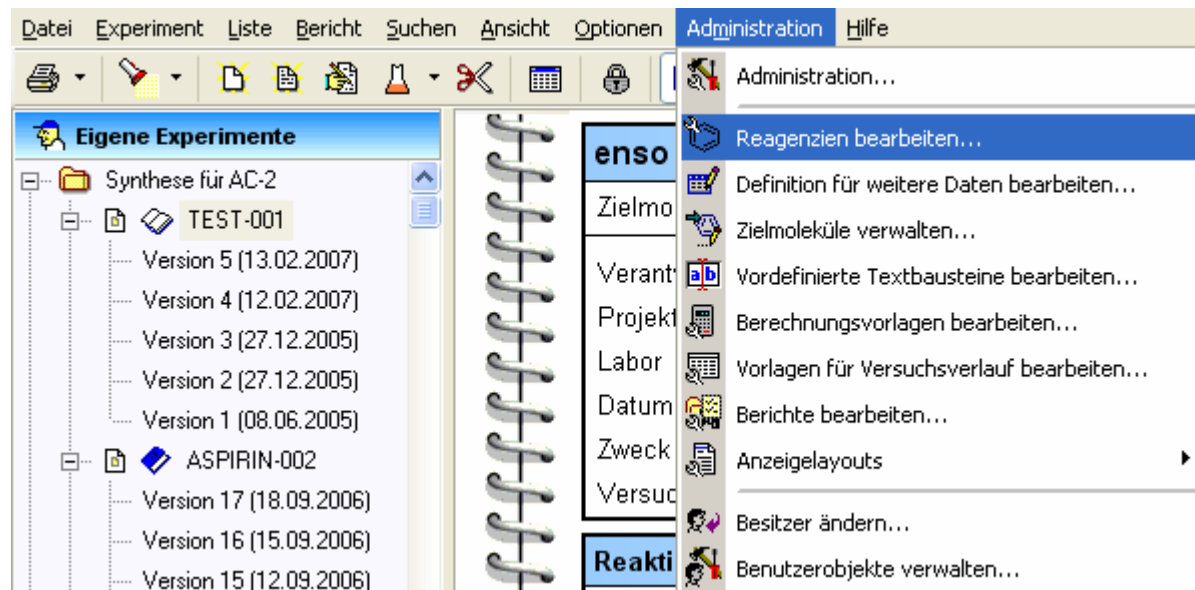
Auch wenn ein Datensatz nicht für Übernahme freigegeben ist, so wird er bei einem Vergleich zwischen Zielmolekül und Produkt dennoch angezeigt.

Bei der Anzeige in der Liste des Administrationsdialogs für Zielmoleküle sehen Sie neben allen für die Übernahme freigegeben Feldern das Symbol einer Büroklammer (📎).

# 5. Reagenzien

Dieses Kapitel wird sich mit der in ensochemLab integrierten Reagenziendatenbank beschäftigen.

Die zugehörige Verwaltung befindet sich seit Version 2.1 ebenfalls in einem gesonderten Dialog, den Sie über die Funktion „Administration \ Reagenzien bearbeiten“ im Hauptmenü aufrufen können:





Hier können Sie die bei Ihrer täglichen Arbeit am häufigsten verwendeten Reagenzien eingeben. Reagenzien ermöglichen Ihnen die Auswahl registrierter Substanzen als Edukte beim Anlegen bzw. Bearbeiten von Experimenten. Durch diese Funktion müssen Sie die Daten nicht jedes Mal von Hand neu eingeben.

Dabei steht allen Anwendern der gleiche Reagenzienkatalog zur Verfügung. Unterscheidungen zwischen Benutzern oder Benutzergruppen können hierbei nicht getroffen werden.

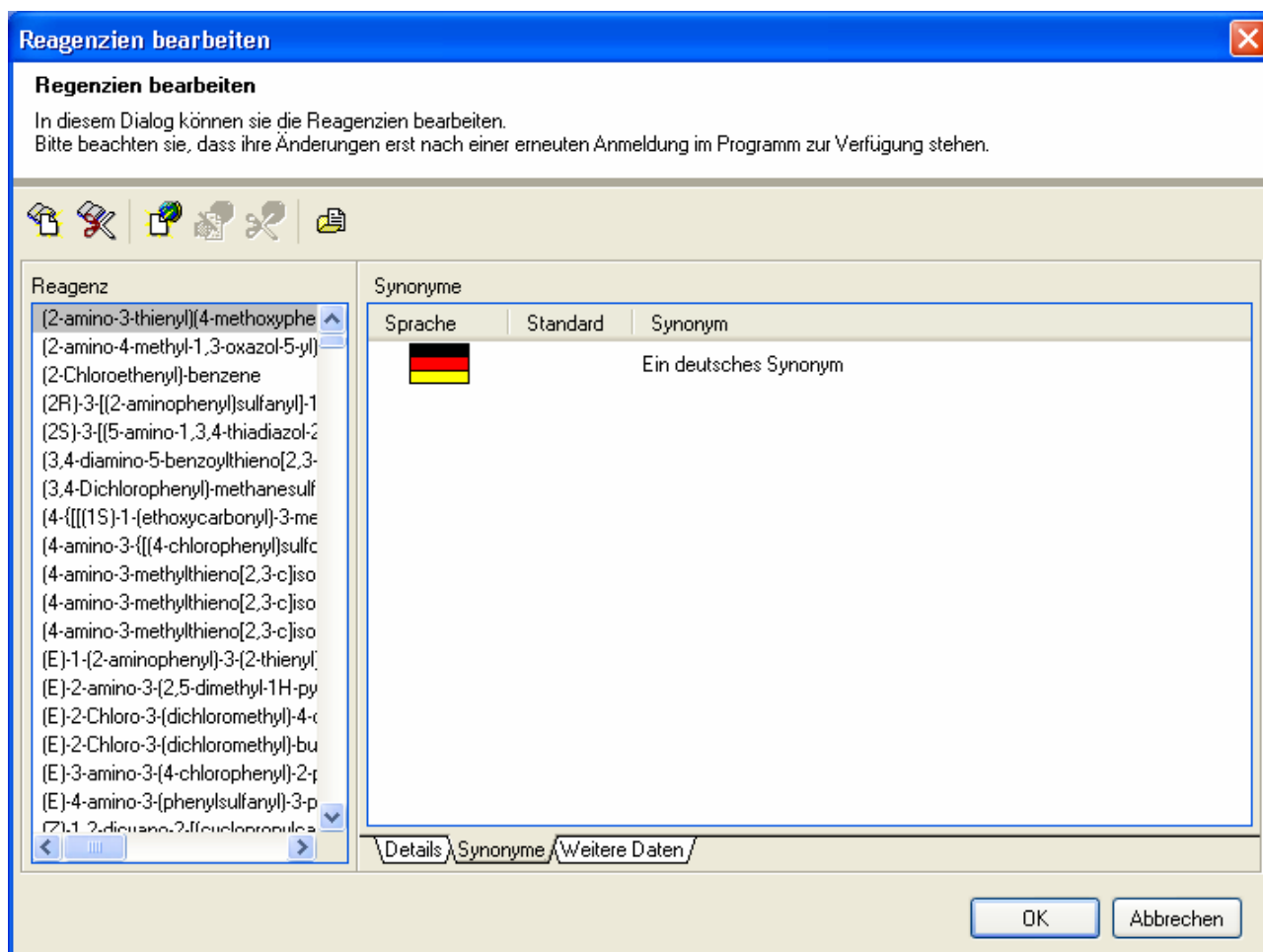
**Wichtig:** Einmal auf ein Edukt eines Experiments angewendete Daten werden unabhängig vom Katalog. Übernimmt ein Benutzer also beispielsweise Aspirin mit einer falschen CAS Nummer aus dem Katalog in sein Experiment und Sie korrigieren den Katalog später, enthält das Experiment immer noch die falschen Daten!

Der Dialog sieht wie folgt aus:

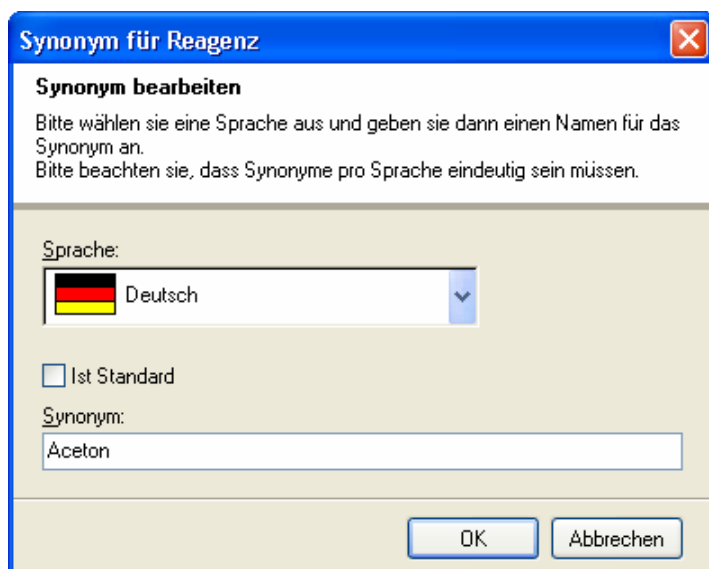
Um ein neues Reagenz zu definieren, klicken Sie bitte auf den „Neu“ Knopf (  ) links in der Symbolleiste. In die Liste wird nun ein neuer Eintrag „<Neues Reagenz>“ eingefügt. Auf der rechten Seite können Sie seine Eigenschaften bearbeiten. Der Name muss angegeben werden, alle weiteren Felder sind fakultativ. Das „Herkunft“ Feld erlaubt sowohl eine Freieingabe als auch eine Auswahl eines Eintrags der zuvor angelegten Auswahlliste „Herkunft“ (siehe Kapitel „Der Administrationsdialog“).

Um die Struktur zu bearbeiten, doppelklicken Sie bitte auf der Strukturbox oder verwenden Sie die Funktion „Struktur bearbeiten“ (  ) aus dem Kontextmenü. Das Programm öffnet dann den Chemieeditor zum Zeichnen einer Struktur.



Ein Reagenz kann eine beliebige Anzahl von Synonymen besitzen. Auf der rechten Seite finden Sie einen Karteireiter mit der Aufschrift „Synonyme“, der die folgende Seite öffnet:




Diese Liste zeigt alle momentan für das Reagenz definierten Synonyme an. Synonyme sind immer sprachabhängig und jede Sprache kann über ein Standardsynonym verfügen, das anstelle des Reagenznamen angezeigt wird. Um ein Synonym hinzuzufügen, klicken Sie bitte auf den Knopf „Neues Synonym“ (📄) auf der rechten Seite der Symboleiste:

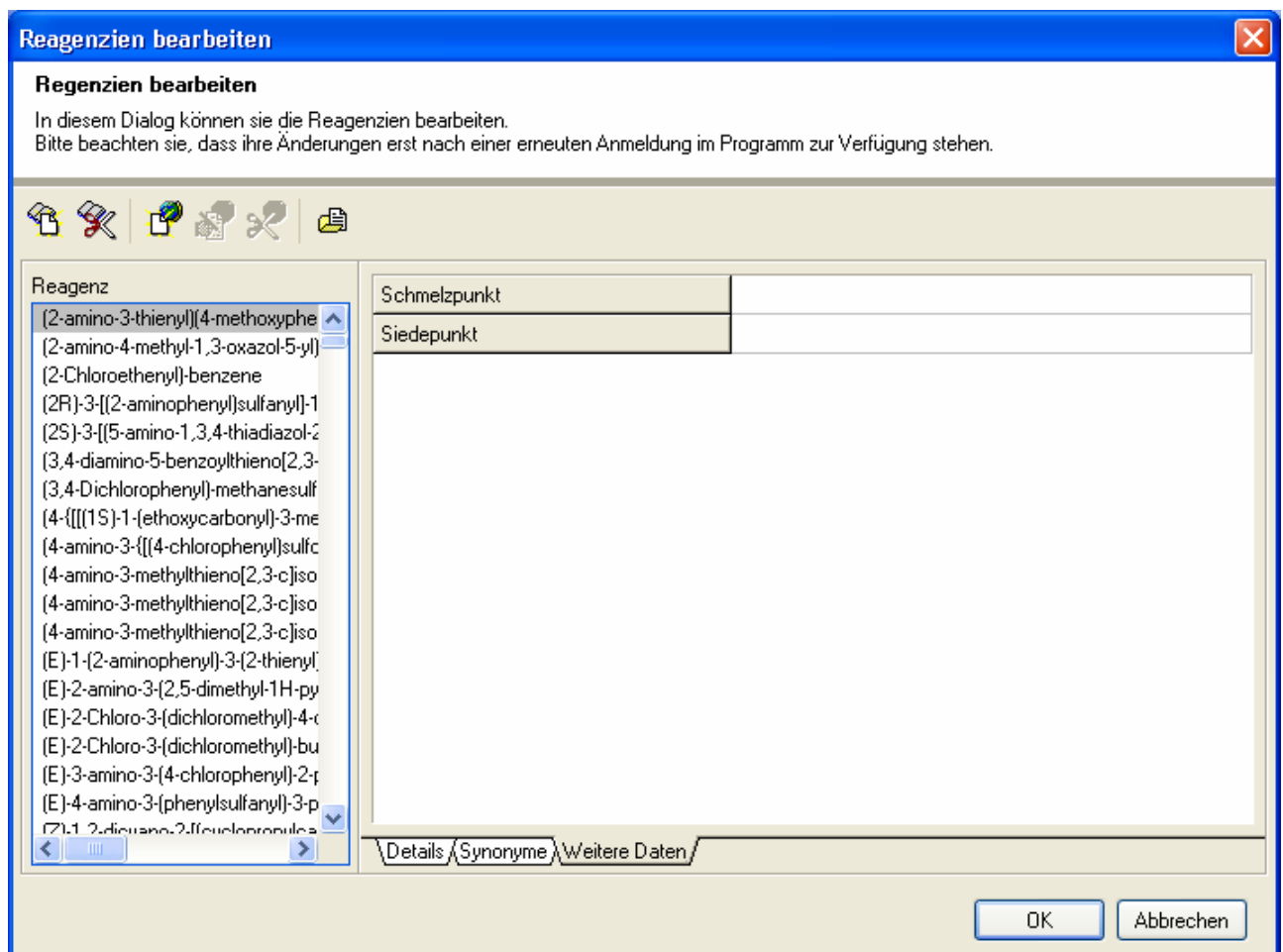


Mit dem oberen Feld wählen Sie die gewünschte Sprache aus. Die Auswahlliste zeigt sowohl die Sprache als auch die entsprechende Landesflagge an. Mit dem Feld „Ist Standard“ legen Sie fest, ob der neue Datensatz der Standard für die ausgewählte Sprache sein soll. Danach geben Sie bitte einen Synonymnamen ein und klicken auf „OK“.

Das Bearbeiten bestehender Synonyme ist ähnlich einfach: Wählen Sie dazu bitte das gewünschte Synonym aus und klicken Sie anschließend auf „Synonym Bearbeiten“ () . Der gleiche Dialog wird mit den Synonymdaten zur Bearbeitung erscheinen. Um ein Synonym zu löschen, wählen Sie es bitte aus und klicken Sie dann auf „Synonym Löschen“ () .

Wenn Sie ein bestehendes Reagenz bearbeiten möchten, wählen Sie bitte in der Liste links den entsprechenden Eintrag aus. Auf der rechten Seite wird ensochemLab die zugehörigen Daten anzeigen, wo sie auch geändert werden können. Ähnlich verhält es sich auch mit dem Löschen eines Reagenz: Wählen Sie es aus und klicken sie dann auf „Reagenz Löschen“ () .

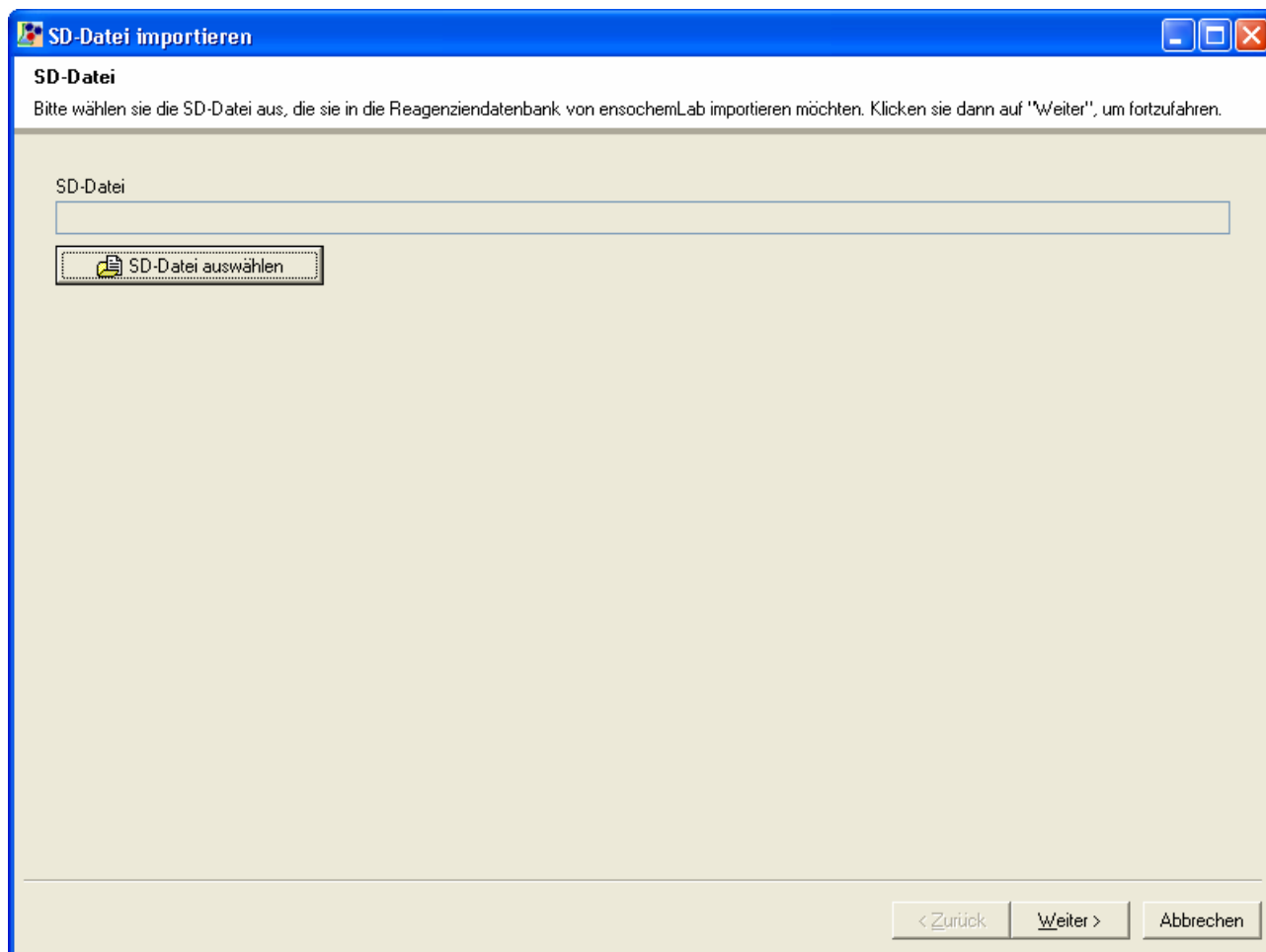
Wie Sie sicherlich bereits gesehen haben, gibt es in diesem Dialog noch einen weiteren Karteireiter: „Weitere Daten“:



In ihm können Sie zu jedem Datenfeld der „Weiteren Daten“ (physikalisch-chemische Zusatzdaten zu Edukten und Produkten) einen Wert angeben. Abhängig von der Definition des Datenfelds kann dieser ein

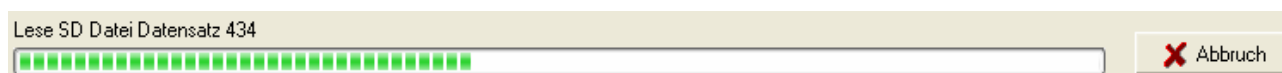
Text, ein Zahlenwert oder ein Bereich sein. Es kann außerdem möglich sein, eine Bedingung hierfür anzugeben.

Außerdem können Sie eine bestehende Reagenziendatenbank aus einer SD-Datei importieren, indem Sie auf den Knopf „SD-Datei importieren“ (📄) in der Symbolleiste klicken. Der folgende Assistent erscheint:



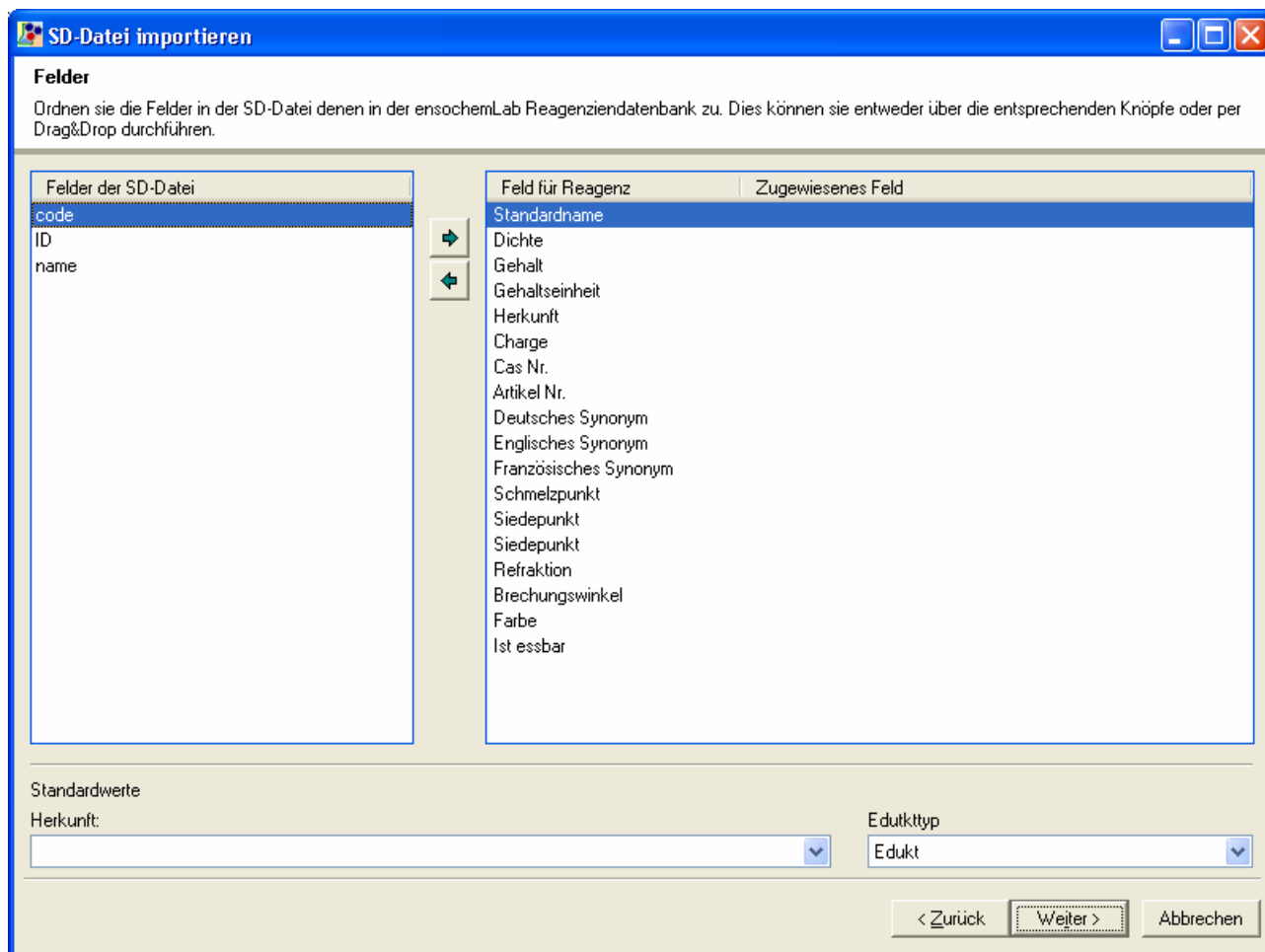
Klicken Sie zuerst auf “SD-Datei auswählen” und wählen Sie die Datei aus, die Sie importieren möchten. Um im Assistenten fortzufahren, klicken Sie bitte auf „Weiter“.

ensochemLab analysiert nun, welche Felder in Ihrer SD-Datei enthalten sind. Dazu müssen sämtliche Datensätze der Datei eingelesen werden. Je größer Ihre SD-Datei und je langsamer Ihr Computer, desto länger dauert der Analysevorgang. Ihnen werden dabei jeweils der aktuelle Fortschritt in einem Fortschrittsbalken sowie die aktuelle Datensatznummer angezeigt. Mit einem Klick auf „Abbrechen“ können Sie den Analysevorgang stoppen und zur Dateiauswahl zurückkehren:



Bitte beachten Sie, dass der Vorgang dabei gänzlich abgebrochen wird und auch keine Weiterarbeit mit den bereits gelesenen Daten möglich ist.

Nachdem die Analyse abgeschlossen ist, müssen Sie die Felder in der Datei den Datenfeldern in ensochemLab zuordnen. Dies geschieht auf der folgenden Seite:



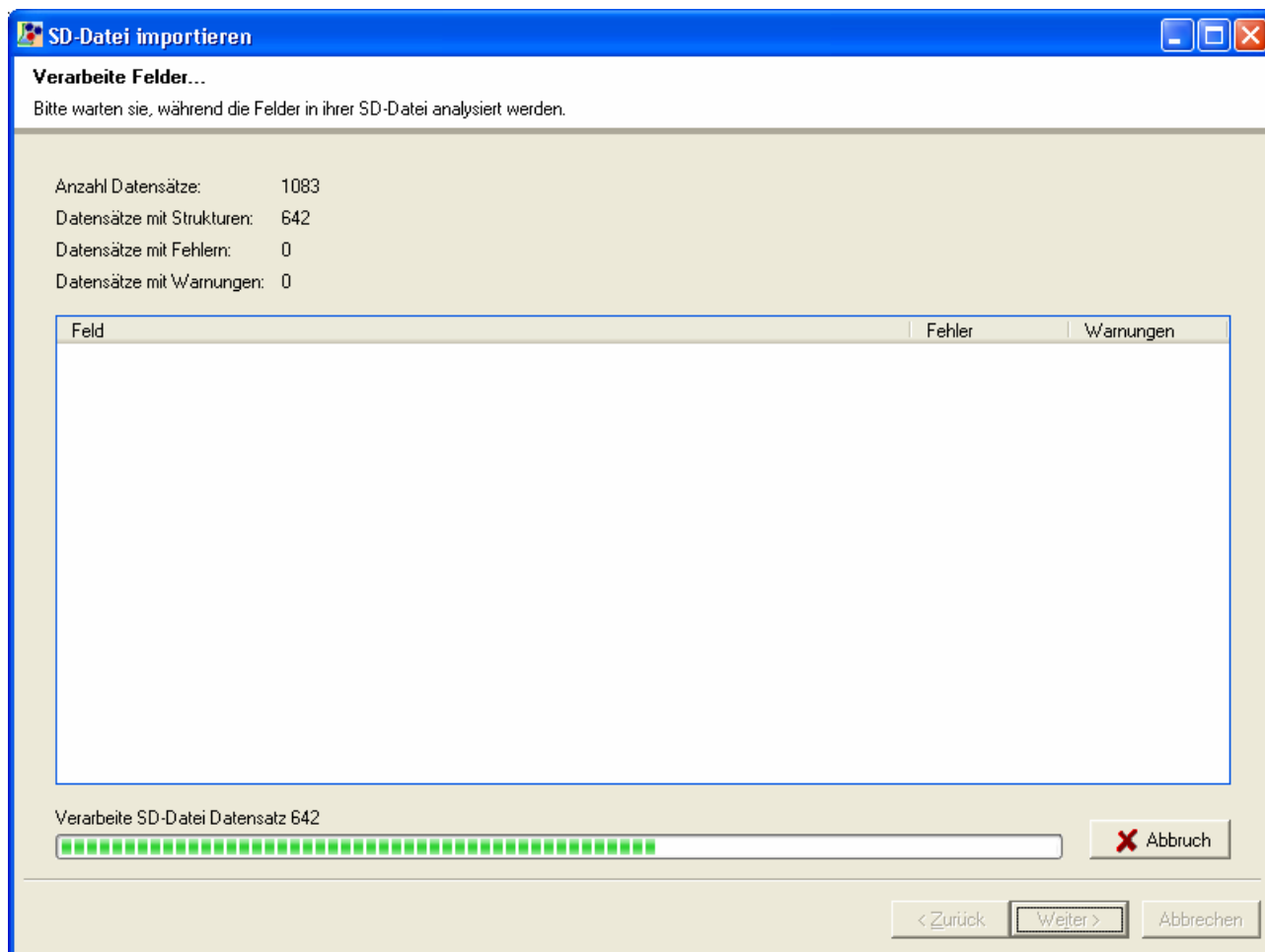
In der Liste auf der linken Seite sehen Sie die Felder in Ihrer SD-Datei. Auf der rechten Seite werden die ensochemLab Datenbankfelder und die jeweiligen Zuordnungen angezeigt. Wählen Sie nun einfach in der Liste auf der linken Seite ein Feld aus, markieren Sie dann rechts das zugehörige Datenfeld in ensochemLab und klicken Sie auf den Knopf „nach rechts“ (→). Um eine Zuordnung zu entfernen, markieren Sie einfach die entsprechende Zuordnung auf der rechten Seite und klicken Sie auf „nach links“ (←).

Alternativ dazu können Sie Einträge auch per Drag & Drop nach rechts bzw. links ziehen.

Bitte beachten Sie, dass dem Standardnamen immer ein Datenfeld zugewiesen werden muss.

Am unteren Rand des Fensters können Sie verschiedene Standardwerte, zum Beispiel für die Herkunft, angeben. Bei diesem Feld handelt es sich um ein Auswahlfeld, das die im Administrationsdialog voreingestellten Werte enthält. Zusätzlich können Sie auch per Hand einen abweichenden Wert eingeben. Beim Edukttyp ist lediglich eine Auswahl aus den von ensochemLab unterstützten Typen möglich.

Nach einem Klick auf „Weiter“ analysiert ensochemLab Ihre SD-Datei erneut, dieses Mal wird auf etwaige Probleme beim späteren Importieren geprüft, damit Sie das spätere Ergebnis ohne bereits erfolgte Änderungen an Ihrer Datenbank einschätzen können.



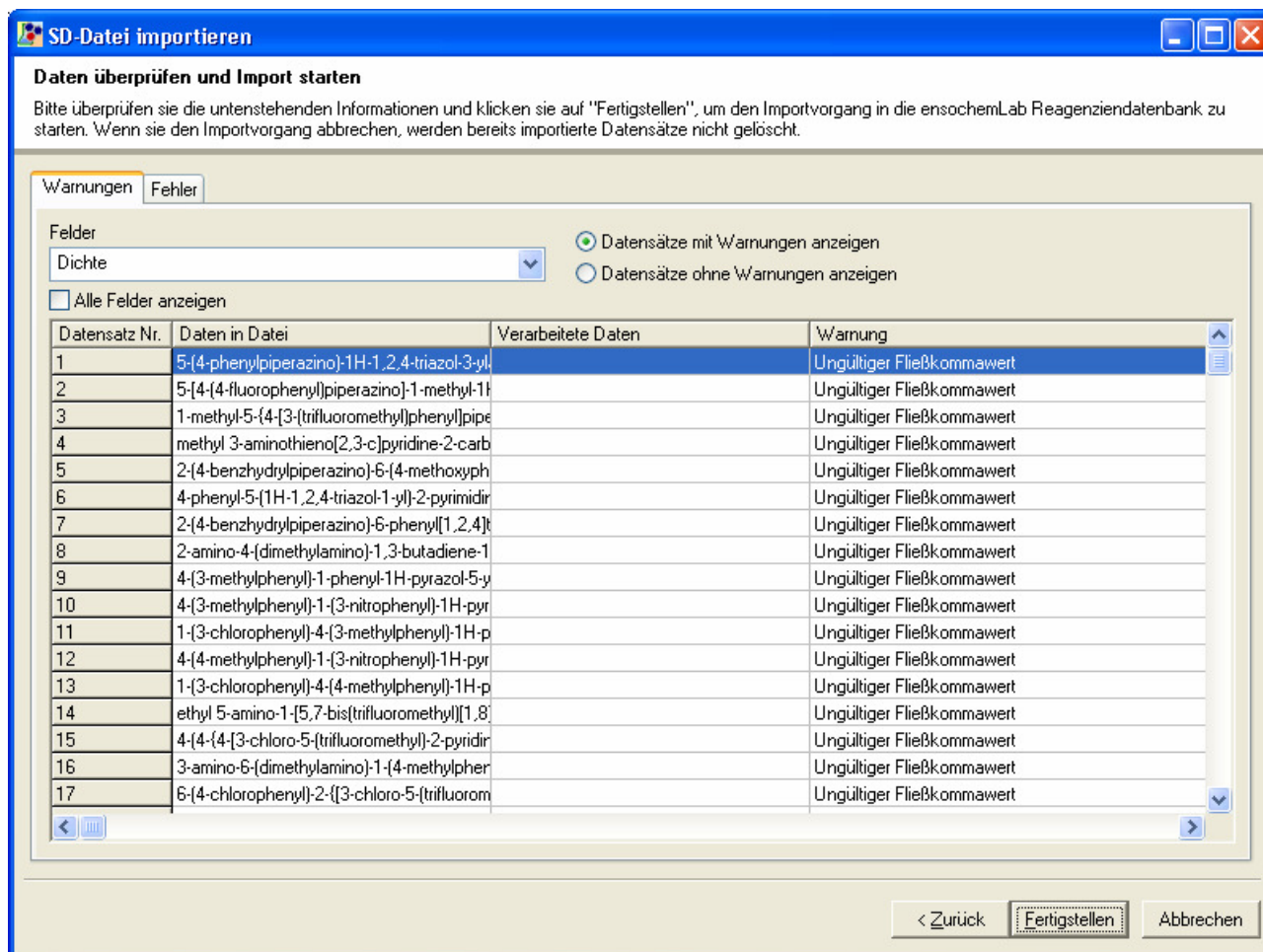
In der obersten Zeile der Informationsbox sehen Sie die gesamte Anzahl von Datensätzen Ihrer SD-Datei. Darunter wird gezählt, wie viele Datensätze Strukturen enthalten. Treten bei einem Datensatz Fehler oder Warnungen auf, werden auch diese gezählt.

In der Liste im mittleren Teil des Fensters wird nach Feldern gruppiert aufgelistet, wie viele Fehler und Warnungen auftreten werden, zum Beispiel:

Feld	Fehler	Warnungen
Standardname	82	0

Es gibt also drei Datensätze, bei denen der Standardname nicht importiert werden kann. Nähere Details zu den einzelnen Fehlern und Warnungen erhalten Sie nach einem Klick auf „Weiter“.

Die folgende Seite enthält zwei Karteireiter: „Warnungen“ und „Fehler“. Bei einer Warnung wird lediglich ein Feld übersprungen, der Datensatz kann jedoch trotzdem in die ensochemLab Reagenziendatenbank importiert werden. Bei einem Fehler ist dies nicht möglich und der gesamte Datensatz wird übersprungen.



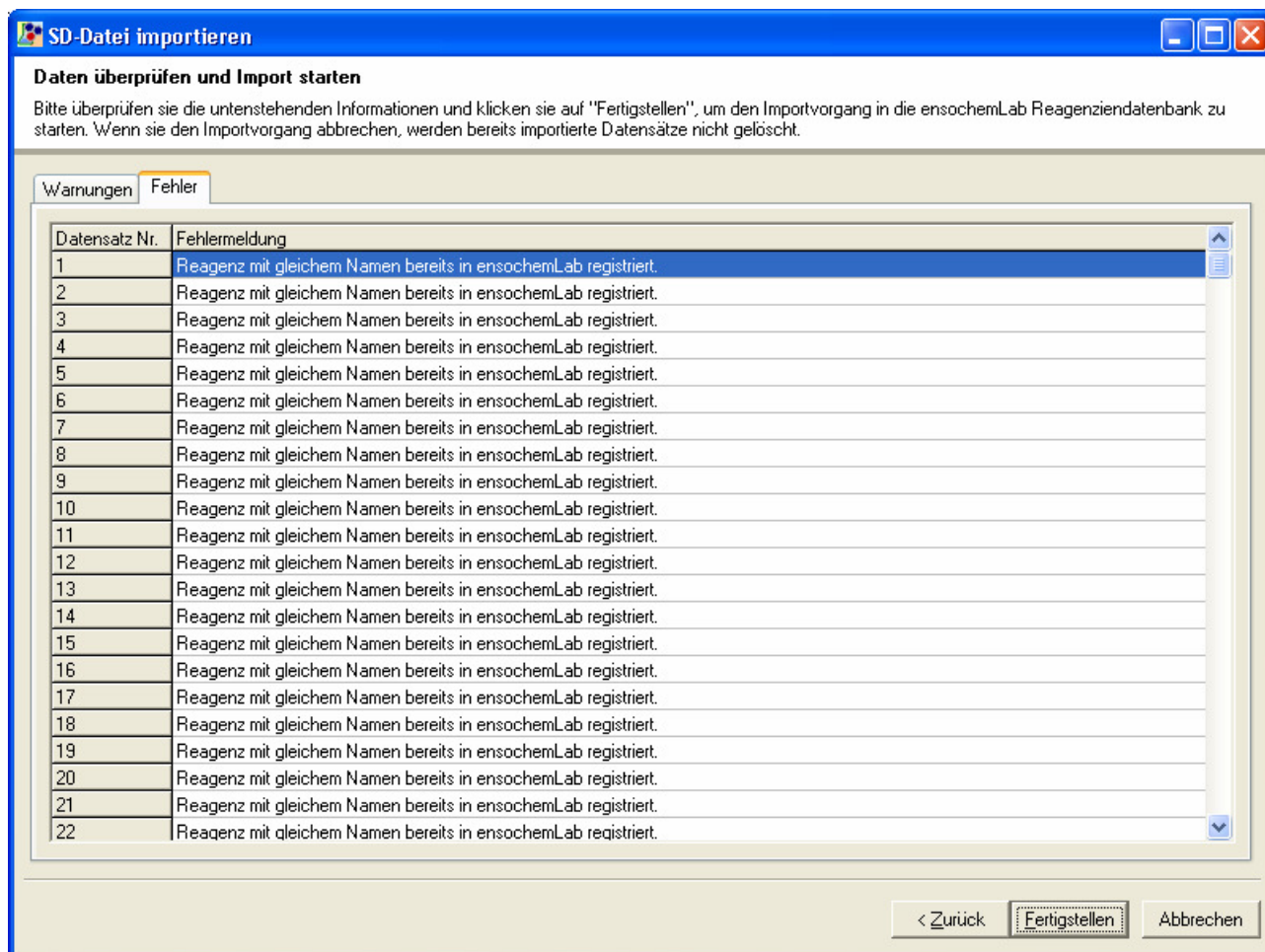
Betrachten wir zunächst die Warnungsseite. In der Felderliste oben links werden alle Felder aufgelistet, zu denen es Warnungen gab. In der Übersichtsliste sehen Sie nun für jede Warnung die Datensatznummer, den Datensatz, wie er in der Datei enthalten ist, der Datensatz wie ihn ensochemLab einlesen würde und den Warnungstext (Grund für die Warnung).

Standardmäßig werden nur Datensätze angezeigt, bei denen tatsächlich Warnungen aufgetreten sind. Sie können dies jedoch ändern, indem Sie die Auswahlbox „Datensätze ohne Warnungen anzeigen“ selektieren. Nun werden alle korrekt importierbaren Datensätze ohne Warnungen angezeigt.

Um die Warnungen zu einem anderen Feld anzuzeigen, wählen Sie dieses einfach aus der Felderliste links oben aus. Wenn Sie ein Feld anzeigen möchten, zu dem es keine Warnungen gab, klicken Sie einfach zuvor auf „Alle Felder anzeigen“.

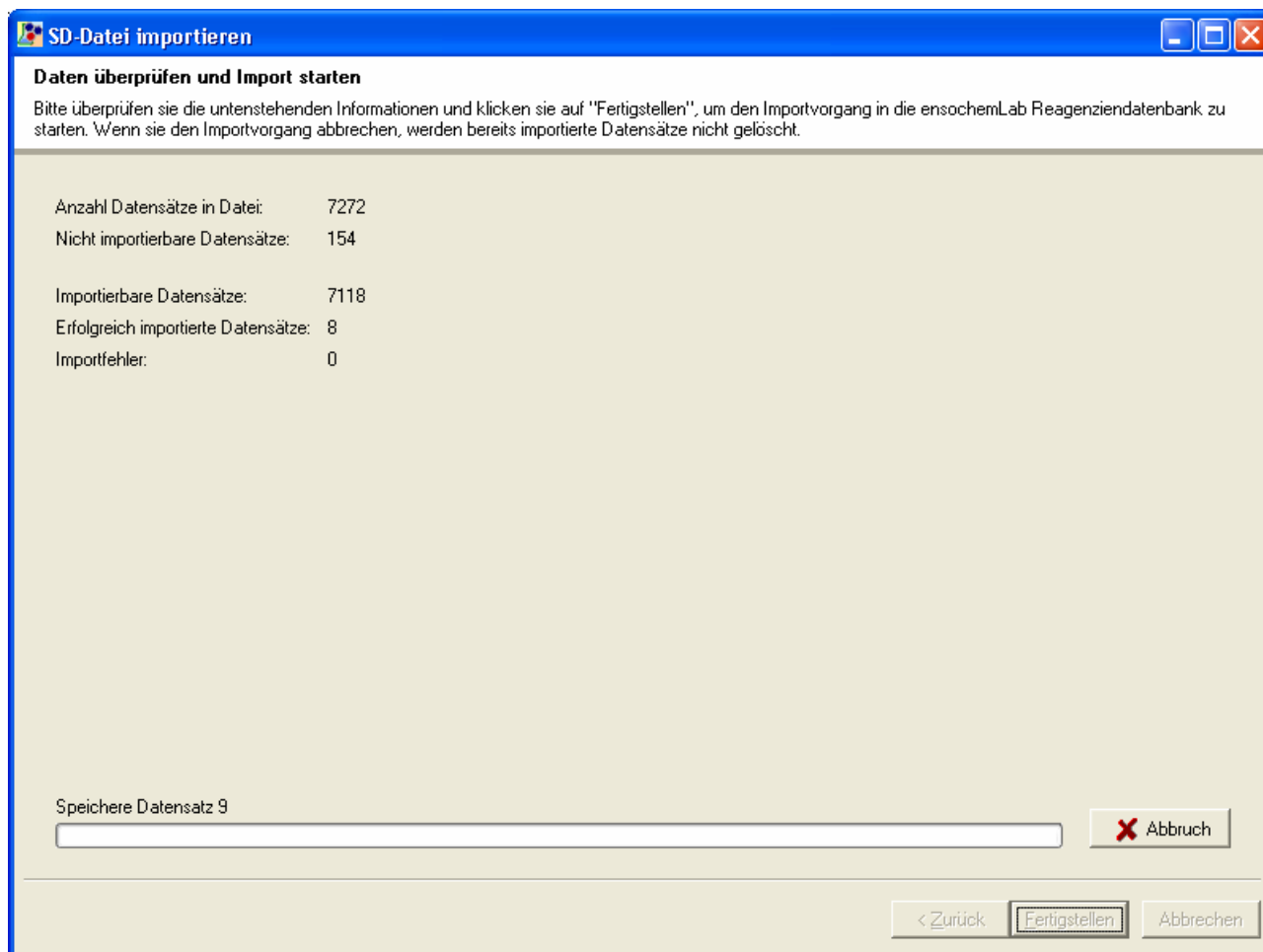
Bitte beachten Sie, dass Sie die fehlerhaften Daten an dieser Stelle jedoch nicht ändern können. Zum Bearbeiten Ihrer SD-Datei empfehlen wir ensochemSheet, unseren innovativen und komfortablen Editor für SD-Dateien. Lesen Sie mehr unter [www.enso-Software.com](http://www.enso-Software.com) und laden Sie Ihre kostenlose Demoversion herunter!

Widmen wir uns nun der Fehlerseite:



Hierbei handelt es sich eigentlich nur um eine Auflistung der Datensätze, die wegen des angegebenen Grundes nicht in die ensochemLab Reagenziendatenbank importiert werden können. Änderungen oder Fehlerkorrekturen sind auch hier nicht möglich.

Bitte klicken Sie nun auf „Fertigstellen“, um mit dem eigentlichen Importvorgang zu beginnen. Hierbei werden, wie bereits beschrieben, nur die fehlerfreien Datensätze importiert, also solche, die höchstens Warnungen aber keine Fehler besitzen.



Erneut sehen Sie die Statusanzeige zusammen mit der Anzeige der aktuellen Datensatznummer. Mit einem Klick auf „Abbruch“ können Sie den Importvorgang zu jedem Zeitpunkt abbrechen. Bitte beachten Sie jedoch, dass bereits importierte Datensätze nicht wieder aus der Datenbank gelöscht werden. Sie können diese falls nötig manuell löschen.

Im oberen Teil des Fensters gibt es wieder eine Informationsbox, die Ihnen die Gesamtzahl der Datensätze in der Datei, die davon nicht importierbaren (d.h. fehlerhaften) Datensätze sowie die restlichen (also importierbaren) Datensätze anzeigt.

Während des Importvorgangs zählt ensochemLab zudem die erfolgreich importierten Datensätze sowie diejenigen, bei deren Import trotz der vorherigen Überprüfungen immer noch Fehler aufgetreten sind.

Generell sei hier noch darauf hingewiesen, dass der Standardname eindeutig sein muss. Importieren Sie also zweimal dieselbe SD-Datei, werden die Datensätze nur einmal angelegt. Ein Datensatz, der mit dem gleichen Namen bereits in ensochemLab registriert ist, wird übersprungen, es werden also auch keine eventuell hinzugekommenen Daten nachgetragen oder Änderungen übernommen. Dies können Sie entweder manuell durchführen oder Sie können die entsprechenden Datensätze zuvor löschen.

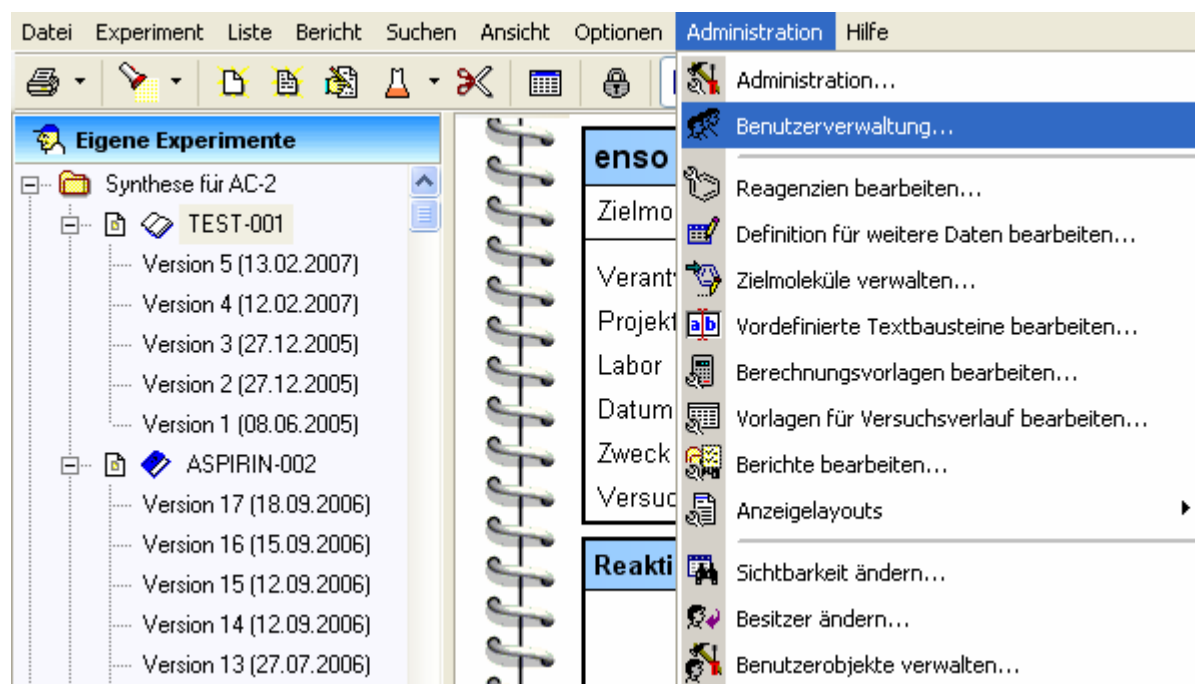
# 6. Benutzerverwaltung

Dieses Kapitel befasst sich mit der ensochemLab Standardbenutzerverwaltung. Um diese verwenden zu können, muss sie im Administrationsdialog wie in Kapitel „Berechtigungen“ bereits beschrieben, aktiviert werden.

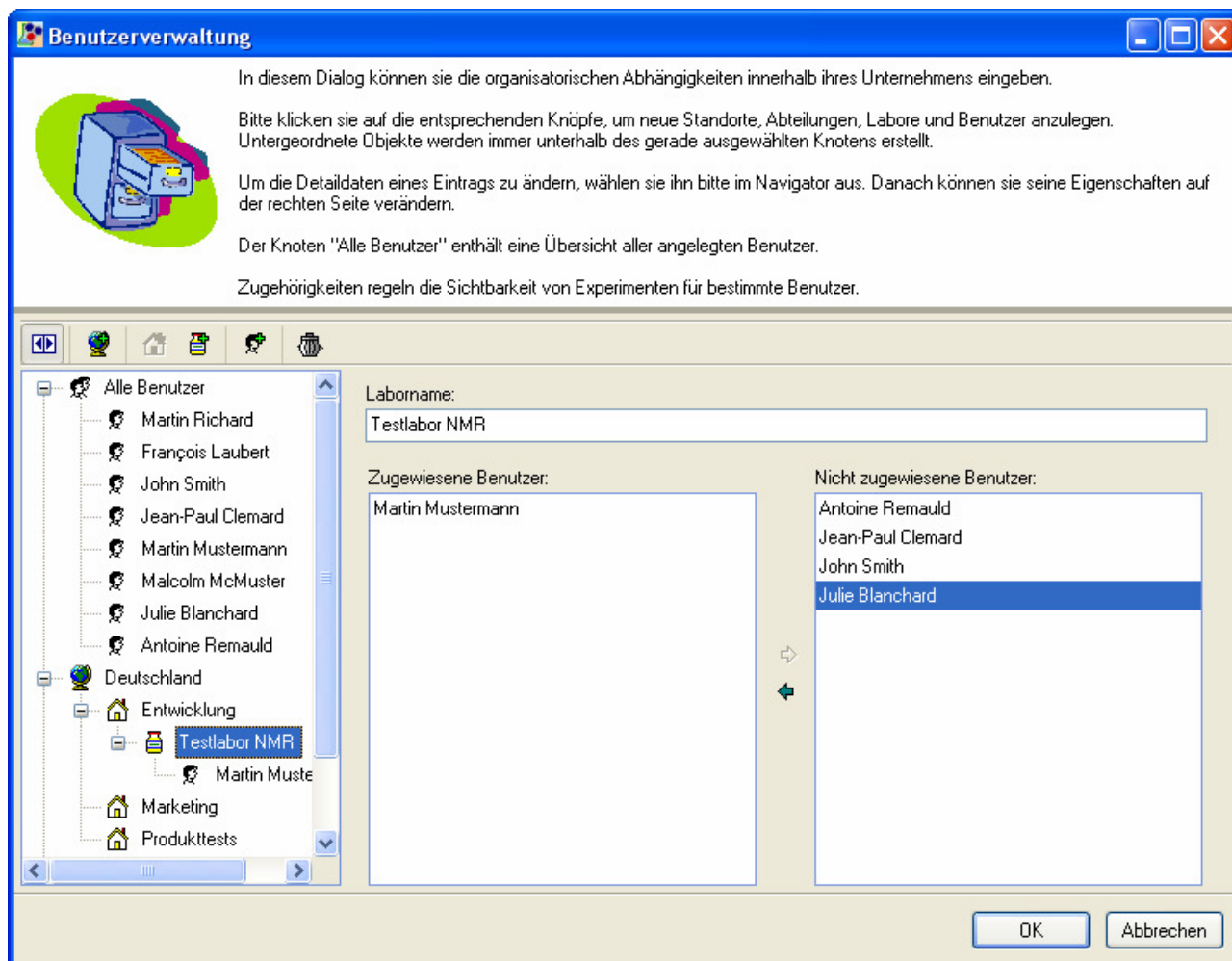
Die Benutzerverwaltung dient nicht dazu, Datenbank- oder Betriebssystembenutzer zu erstellen. Ihr Zweck besteht in der Abbildung der innerbetrieblichen Organisationsstruktur in Form von Standorten, innerhalb derer es wieder Abteilungen mit ihren entsprechenden Laboren gibt. Jeder Benutzer kann maximal einem Labor zugewiesen werden. Benutzer auf Abteilungs- oder Standortebene sind leider nicht möglich. Falls Sie weitere Funktionen oder abweichende Strukturen in Ihrer Benutzerverwaltung benötigen, können diese jederzeit im Rahmen einer kundenspezifischen Anpassung implementiert werden. Unsere Experten beraten Sie gerne!

Dieses Kapitel wird nicht auf angepasste Benutzerverwaltungen eingehen.

Die Benutzerverwaltung befindet sich in einem eigenen Dialog, den Sie im Hauptmenü unter „Optionen \ Benutzerverwaltung“ finden:



Es erscheint der folgende Dialog:



Der Baum auf der linken Seite des Fensters zeigt die bereits angelegte Organisationsstruktur. Der oberste Knoten enthält hierbei alle Benutzer, unabhängig von ihrem jeweiligen Labor. Wenn Sie direkt darauf klicken, wird einer Übersichtsliste angezeigt, deren Daten Sie beliebig sortieren können, indem Sie auf die entsprechende Spaltenüberschrift klicken. Ein erneuter Klick kehrt die Sortierreihenfolge (aufsteigend / absteigend) um.

Das Kontextmenü ermöglicht Ihnen dabei, einen bestimmten Benutzer direkt zu bearbeiten (👤), einen neuen Benutzer anzulegen (➕) oder den aktuellen Benutzer zu löschen (🗑️).


Unabhängig vom gerade ausgewählten Knoten können Sie mit den Knöpfen über dem Baum neue Standorte (🌐), Abteilungen (🏠), Labore (📄) und Benutzer (👤) anlegen. Hierarchisch untergeordnete Objekte werden dabei immer unterhalb der aktuellen Auswahl angelegt, gleichrangige oder übergeordnete Elemente parallel zur nächsten Entsprechung im aktuellen Zweig. Die Daten des jeweiligen Objekts können Sie danach auf der rechten Seite des Fensters eingeben.

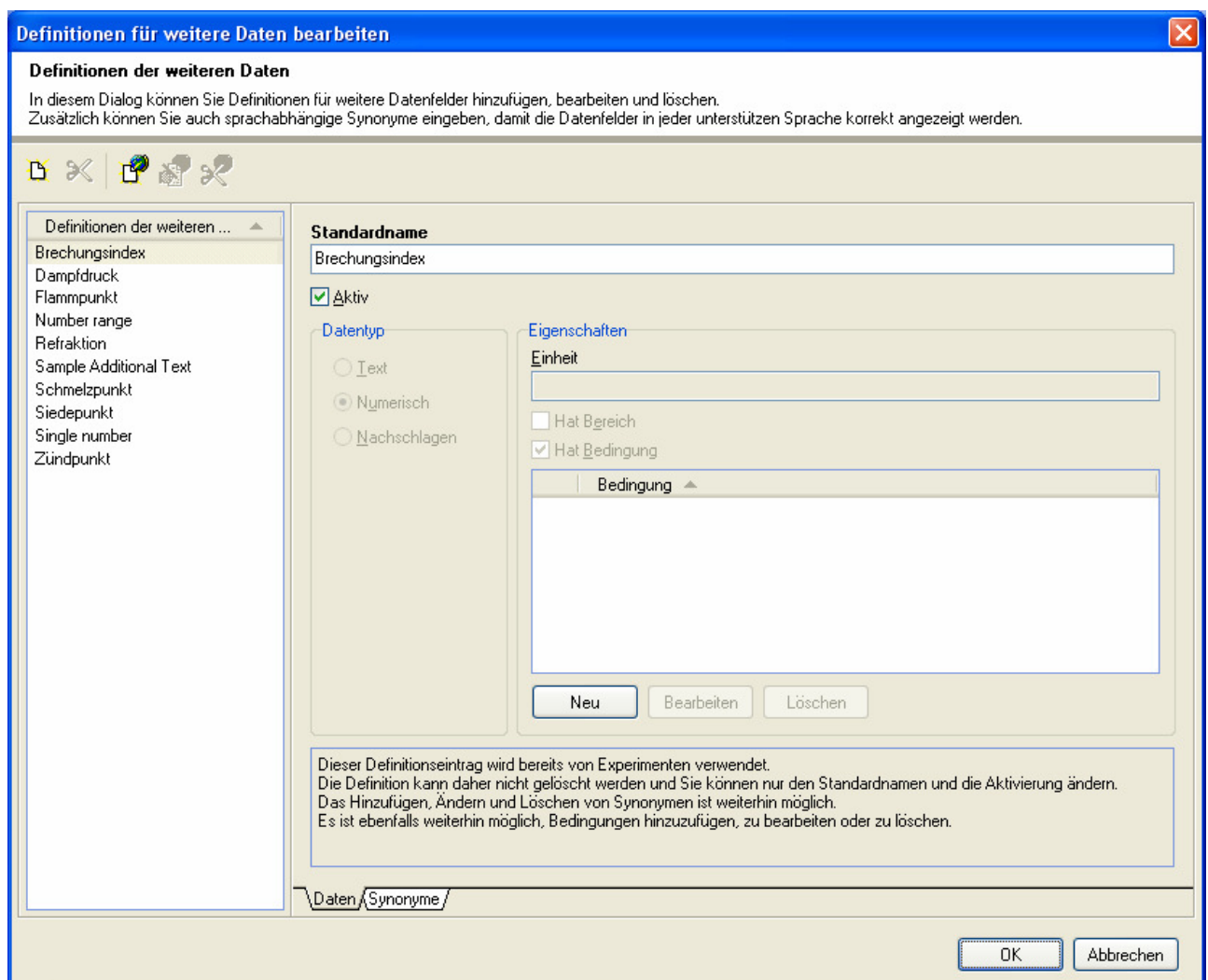
Um ein Objekt zu verändern, wählen Sie es bitte einfach im Baum aus und verändern Sie dann rechts die gewünschten Werte. Der „Löschen“ Knopf (🗑️) löscht ein Objekt mitsamt allen Unterobjekten. Lediglich die zugewiesenen Benutzer bleiben als solche erhalten und werden in die Liste der nicht zugewiesenen Benutzer verschoben.


Um die Baumansicht auf der linken Seite auszublenden, klicken Sie bitte auf „Navigator verbergen“ (🔍).

Um Ihre Änderungen zu speichern und den Dialog zu verlassen, klicken Sie bitte auf „OK“. Mit „Abbrechen“ kehren Sie zu ensochemLab zurück, ohne die Änderungen zu übernehmen.

# 7. Definitionen für weitere Daten

Die Definitionen für die weiteren Daten legen die Felder fest, die der Benutzer bei Edukten und Produkten auf dem Karteireiter „weitere Daten“ findet. Sie können mit dem entsprechenden Administrationsmodul weitere Felder anlegen und bestehende Felder ändern oder löschen. Zum Starten des Moduls klicken Sie bitte im Hauptmenü unter „Administration“ auf „Definition für weitere Daten bearbeiten“ (  ). Das folgende Fenster erscheint:



In der Liste sehen Sie (falls vorhanden) die bereits angelegten Felder. Da eine neue Datenbank lediglich die Standardfelder enthält, klicken Sie nun bitte auf den Knopf „Neue Definition für weitere Daten“ (  ) um ein neues, eigenes Feld anzulegen. ensochemLab fügt nun einen leeren Eintrag in die Liste ein. Sie erkennen ihn an der Beschreibung „<Kein Name>“. Er wird automatisch ausgewählt.

Das Eintragen oder Verändern der Daten wird bei unserem neuen Eintrag genauso durchgeführt wie bei einem bestehenden Feld: Zuerst wird in der Liste auf der linken Seite das Feld ausgewählt, dann können Sie rechts die Daten verändern. Ein Speichern der einzelnen Einträge ist nicht notwendig, sobald Sie den Dialog mit „OK“ verlassen, werden alle Änderungen zusammen gespeichert.

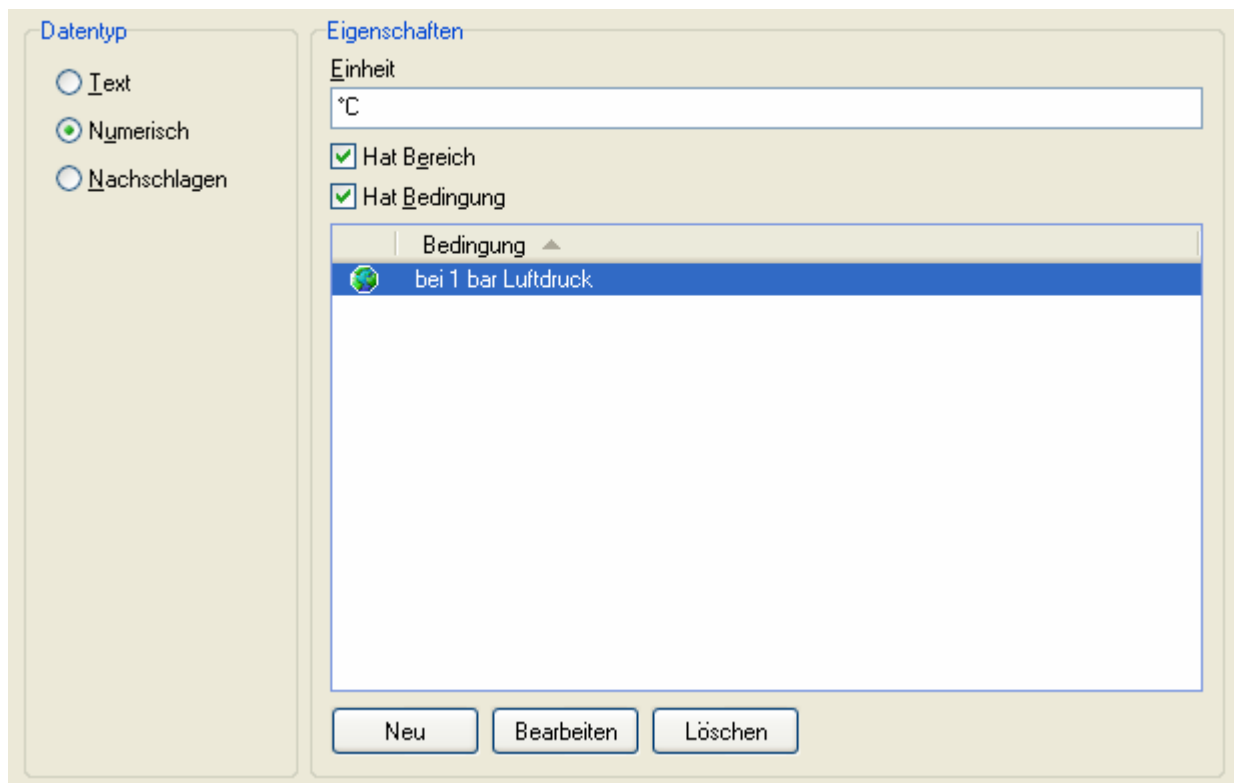
Betrachten wir zunächst die Seite „Daten“:

Der „Standardname“ ist der Name, der in der Liste angezeigt wird. Er ist keiner konkreten Sprache zugeordnet und wird in der Benutzerschnittstelle nur dann verwendet, wenn kein sprachabhängiges Synonym definiert ist. Eine nähere Erklärung hierzu folgt noch.

Der „Datentyp“ entscheidet ob die Werte als Prosatext, Numerisch oder in Form einer Nachschlageliste erwartet werden. Je nach ausgewähltem Typ stehen weitere Optionen zur Verfügung.

Der Typ „Text“ gibt an, ob es sich bei dem Feld um ein reines Textfeld handelt, also um einen Wert, der jeden beliebigen Text enthalten kann und inhaltlich nicht näher spezifiziert ist.

Im Falle des Typs „Numerisch“ können weitere Vorgaben spezifiziert werden:



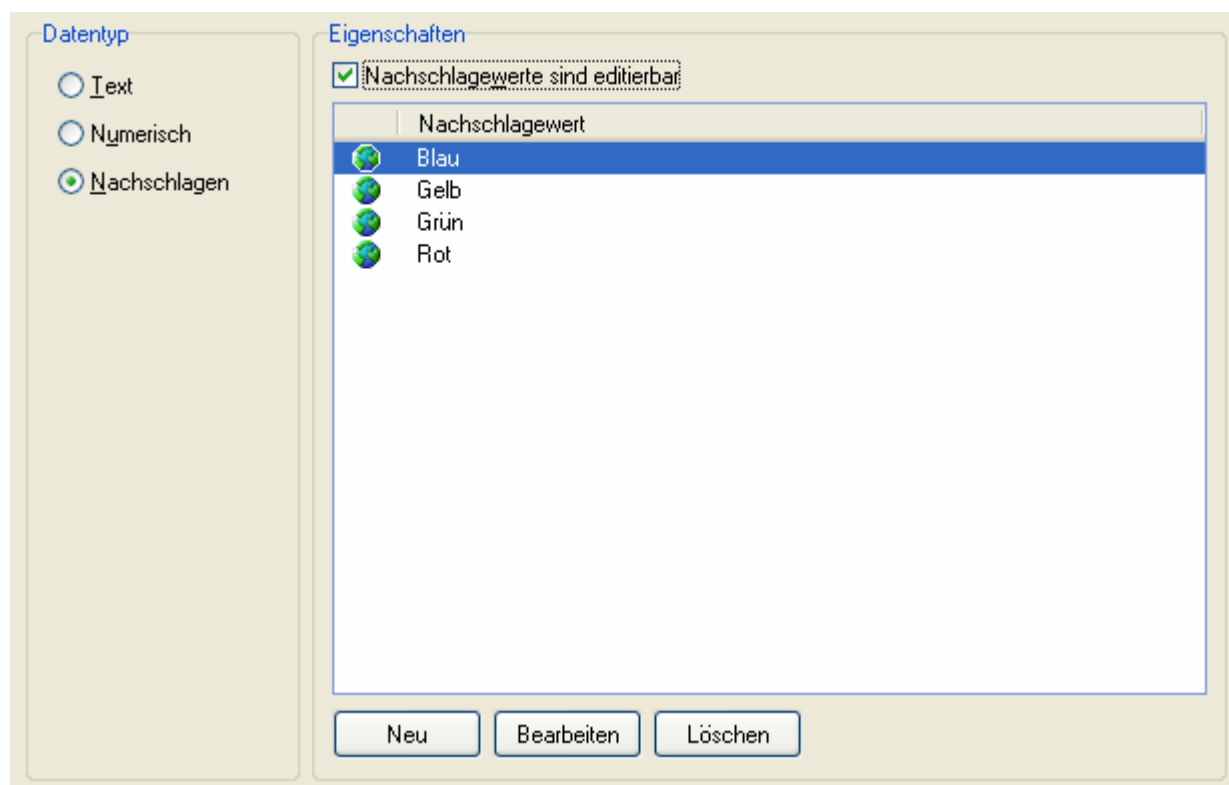
The screenshot shows a software interface for defining data properties. On the left, under 'Datentyp', three radio buttons are visible: 'Text', 'Numerisch' (which is selected), and 'Nachschlagen'. On the right, under 'Eigenschaften', there is a text input field for 'Einheit' containing '°C'. Below it are two checked checkboxes: 'Hat Bereich' and 'Hat Bedingung'. Under 'Hat Bedingung', there is a list box with a dropdown arrow and the text 'Bedingung'. The list contains one entry: 'bei 1 bar Luftdruck', which is highlighted in blue. At the bottom of the dialog are three buttons: 'Neu', 'Bearbeiten', and 'Löschen'.

Die Einheit ist eine Textbeschreibung der Einheit, in der ein Wert gemessen wird. Dies kann zum Beispiel „°C“ sein.

„Hat Bereich“ legt fest, ob das Feld einen Wertebereich als Wert annehmen kann.

„Hat Bedingung“ gibt an, ob der Benutzer in der Lage sein soll, für den von ihm angegebenen Wert eine Bedingung festzulegen. Optional können Sie vordefinierte Werte angeben, zum Beispiel „bei 1 bar Luftdruck“. Die so definierte Liste enthält lediglich auswählbare Vorschläge für den Anwender. Jeder Eintrag kann wahlweise Sprachspezifisch sein oder für alle Sprachen gelten.

Als dritter Typ steht „Nachschlagen“ zur Auswahl:



Die Option "Nachschlagewerte sind editierbar" gibt vor ob die Werte der Liste lediglich als Vorschlag dienen oder der Anwender ausschließlich einen dieser Werte wählen darf. Jeder Eintrag kann wahlweise Sprachspezifisch sein oder für alle Sprachen gelten.

„Aktiv“ gibt an, ob das Feld für Benutzer zur Verfügung stehen (also angezeigt werden) soll. Dies hat keinen Einfluss auf bestehende Daten. Wird ein Feld als inaktiv markiert, werden die Daten beibehalten und einfach nicht mehr angezeigt.

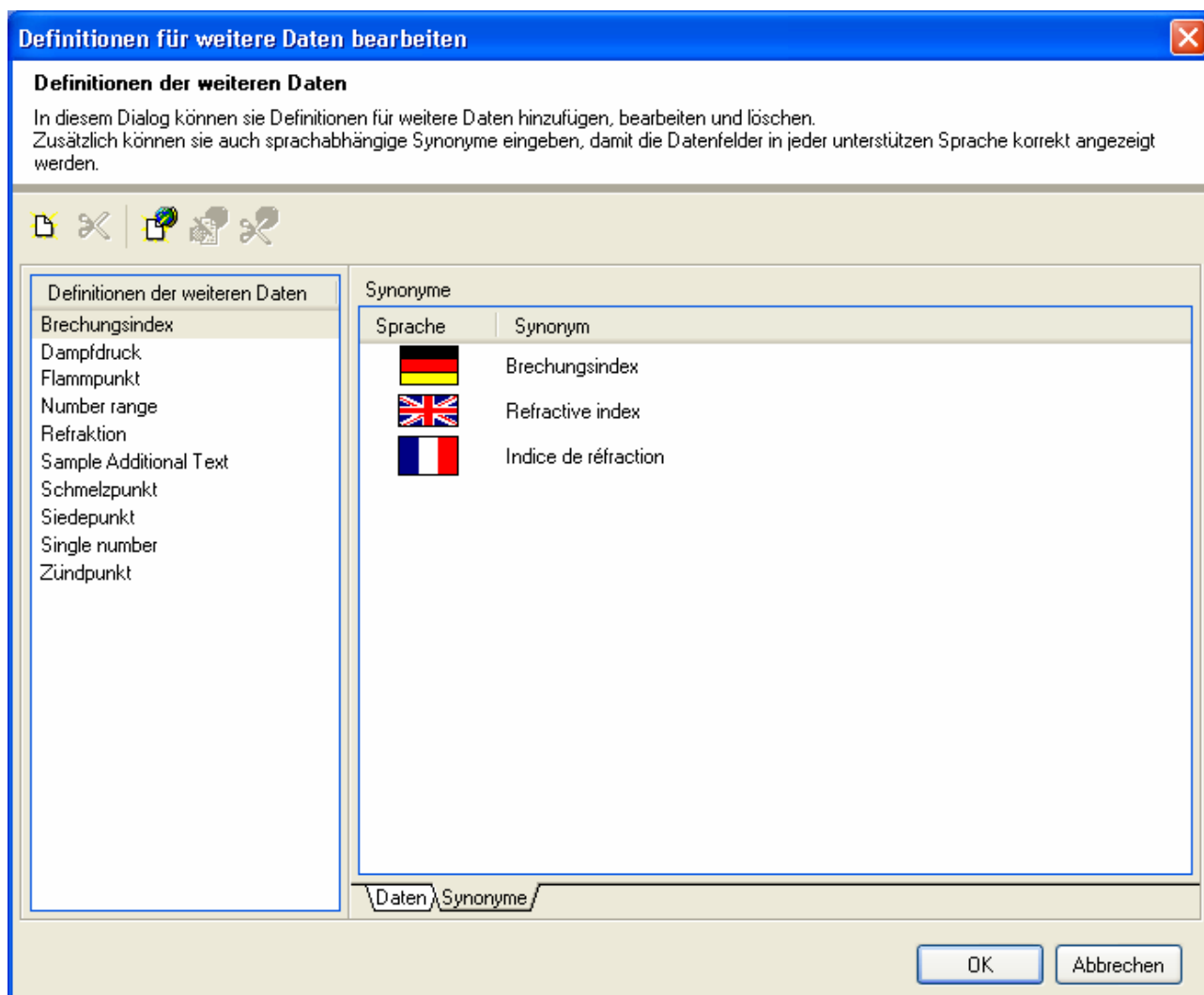
Damit wäre auch ein weiteres wichtiges Thema angesprochen: Bestehende Daten. Sie können an einer Felddefinition nur solche Änderungen durchführen, die keinen Einfluss auf bestehende Daten haben. Das bedeutet, dass bei einem neuen, noch in keinem Experiment verwendeten Feld noch alle Änderungen möglich sind. Existiert bereits mindestens ein Wert für das Feld, sind verschiedene Änderungen nicht mehr möglich. Das Feld kann nur noch als inaktiv markiert werden, um seine zukünftige Verwendung zu verhindern.


Gelöscht werden kann eine Felddefinition daher auch nur, wenn sie noch nicht verwendet wird. Um das Löschen durchzuführen, klicken Sie bitte auf „Definition für weitere Daten löschen“ (✂).

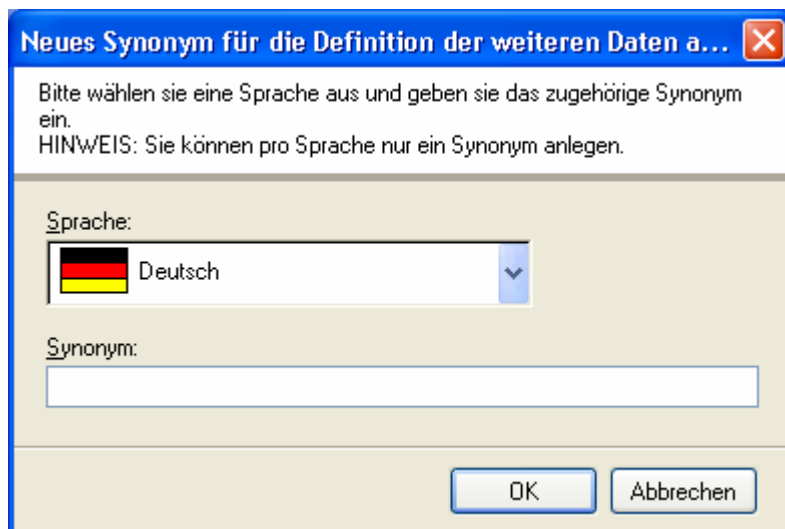
Die Liste der zusätzlichen Datenfelde ist standardmäßig alphabetisch absteigend sortiert. Um die Sortierreihenfolge zu ändern, klicken Sie bitte auf die Überschrift der Liste.

Das Anlegen oder Verändern von sprachabhängigen Synonymen ist immer möglich. Ein Synonym dient der Übersetzung des Standardnamens in eine bestimmte Sprache. Es kann daher pro Sprache auch nur maximal ein Synonym existieren.


Die Seite „Synonyme“ listet alle bereits existierenden Synonyme auf. Die Flagge gibt die entsprechende Sprache an.




Um ein neues Synonym anzulegen, klicken Sie bitte auf den Knopf „Neues Synonym“ () in der Symbolleiste. Das folgende Fenster erscheint:



Bitte wählen Sie zunächst in der oberen Auswahlliste die gewünschte Sprache aus und geben Sie dann in das Textfeld einen Namen für Ihr Synonym ein. Klicken Sie auf „OK“, um das Synonym zu übernehmen oder auf „Abbrechen“, um zum Verwaltungsdialog zurückzukehren, ohne ein Synonym anzulegen.

Das Verändern eines bestehenden Synonyms ist genauso einfach: Wählen Sie es einfach in der Liste aus und klicken Sie dann auf „Synonym bearbeiten“ (). Der gleiche Dialog wie oben erscheint erneut, diesmal aber mit den bestehenden Daten. Verändern Sie die Angaben und klicken Sie auf „OK“, um sie zu übernehmen oder auf „Abbrechen“, um ohne Änderungen zurückzukehren.

Wenn Sie ein Synonym löschen möchten, wählen Sie es bitte aus und klicken sie anschließend auf „Synonym löschen“ ().

Um alle Ihre Änderungen an den Felddefinitionen und Synonymen zu speichern, verlassen Sie den Verwaltungsdialog bitte mit einem Klick auf „OK“. Mit „Abbrechen“ kehren Sie ohne jegliche Änderungen zu ensochemLab zurück.

## 8. Berechnungsvorlagen

Als Administrator können Sie Berechnungsvorlagen für Ihre Benutzer erstellen. Eine Berechnungsvorlage fasst einen Satz an Einstellungen zu einer Vorlage zusammen, sodass sie mit wenigen Klicks am Stück aktiviert werden können.

Den entsprechenden Dialog finden Sie im Hauptmenü unter „Administration“ \ „Berechnungsvorlagen bearbeiten“.

Im Prinzip entspricht dieser Dialog dem Dialog für die Berechnungsvorlagen eines Standardbenutzers, wie er im Benutzerhandbuch beschrieben ist. Sie als Administrator haben allerdings grundsätzlich die Möglichkeit, öffentliche Vorlagen zu erstellen und zu einer Vorlage für jede Sprache andere (übersetzte) Beschreibungsdaten anzugeben. Sie erhalten daher auch immer den erweiterten Beschreibungsdialog.

Ihnen stehen darüber hinaus noch eine Reihe allgemeiner administrativer Einstellungen zur Verfügung, wenn Sie auf die Seite „Berechtigungen“ wechseln:

The screenshot shows a Windows-style dialog box titled "Berechnungsvorlagen". It has two tabs: "Berechnungsvorlagen" and "Berechtigungen". The "Berechtigungen" tab is active, showing the "Berechtigungen bearbeiten" section. The text explains that to prevent users from changing automatic calculation settings, a standard template must be created first. It also mentions that standard calculation settings from ensochemLab can be replaced by a user's own standard template. Below the text are four checkboxes with associated dropdown menus:

- Benutzern verbieten, die Einstellungen der automatischen Berechnung zu ändern  
Die folgende Vorlage wird angewendet, wenn der Benutzer derzeit keine Vorlage ausgewählt hat und er seine eigenen Einstellungen für die automatische Berechnung nicht ändern darf.  
A1
- Benutzern erlauben, eigene Berechnungsvorlagen zu erstellen
- Benutzern erlauben, ihre Berechnungsvorlagen zu veröffentlichen
- Die folgende Vorlage als Standard für alle Benutzer verwenden  
Die folgende Vorlage wird angewendet, wenn der Benutzer auf "Zurücksetzen" klickt.  
A1

At the bottom right, there are "OK" and "Abbrechen" buttons.

Sie können Ihren Benutzern hier verbieten, die Einstellungen der automatischen Berechnungen zu ändern und ihnen eine Standardvorlage zu definieren. Diese muss angegeben werden und wird dann angewendet, wenn der Benutzer keine andere Vorlage ausgewählt hat (z.B. beim ersten Programmstart).

Weiterhin können Sie entscheiden, ob Benutzer eigene Berechnungsvorlagen erstellen dürfen und ob sie diese als öffentlich markieren dürfen.

Benutzer haben die Möglichkeit, im Einstellungsdialog ihre persönlichen Berechnungseinstellungen auf Standardwerte zurückzusetzen. Normalerweise werden hierfür die ensochemLab Standards verwendet. Sie können jedoch mit der Option „Die folgende Vorlage als Standard für alle Benutzer verwenden“ einen eigenen Satz an Standardeinstellungen in Form einer Berechnungsvorlage festlegen.

# 9. Benutzerdaten verwalten

---

Verschiedene Daten in ensochemLab sind einem Benutzer zugeordnet. Es gibt auf der einen Seite die änderbaren Zuordnungen, so zum Beispiel das Besitzrecht an einem Experiment. Ein Benutzer kann, sofern diese Funktionalität vom Administrator freigegeben wurde, sein Experiment an einen anderen Benutzer weitergeben, bzw. dieser kann es vom ursprünglichen Besitzer übernehmen.

Auf der anderen Seite gibt es aber auch nicht direkt änderbare Zuordnungen wie zum Beispiel den Besitzer einer Anzeigevorlage oder einer Vorlage für Versuchsverläufe.

Für beide Fälle ist jedoch wichtig, dass der Administrator Entscheidungen über diese Daten treffen kann, wenn der betreffende Mitarbeiter z.B. das Unternehmen verlässt. Hierfür stellt ensochemLab spezielle Funktionen bereit.

Konkret bedeutet dies: Bei Experimenten kann der Administrator den Besitzer ändern, auch ohne die entsprechende Funktion für alle Benutzer zu aktivieren. Außerdem kann er die Sichtbarkeit der Experimente eines Benutzers ändern, um z.B. seine privaten Experimente für seine Abteilung sichtbar zu machen. Hierauf gehen die Unterkapitel 16.1. und 16.2. ein.

Alle weiteren Daten mit Ausnahme der Einstellungen und Ordner kann er entweder übernehmen, löschen oder weitergeben. Dies ist das Thema von Unterkapitel 16.3.

Generell empfiehlt es sich, schon vorab eine Standardprozedur für das Verfahren mit den Daten ausgeschiedener Mitarbeiter festzulegen.

## 9.1. Sichtbarkeit ändern

Diese Funktion ist nur bei Aktivierung der Standardbenutzerverwaltung verfügbar.

Im Hauptmenü finden Sie unter „Administration“ den Eintrag „Sichtbarkeit ändern“. Mit ihm können Sie die Sichtbarkeit aller oder aller privaten Experimente eines Benutzers verändern. Eine Auswahl einzelner Experimente ist nicht möglich.

Die erste Seite im Assistenten dient zur Auswahl des betreffenden Benutzers sowie zum Festlegen einiger weiterer Optionen. Sie können hier angeben, ob alle Experimente oder nur die privaten verändert werden sollen. Außerdem können Sie die einzustellende Sichtbarkeit festlegen. Dabei werden alle verfügbaren Sichtbarkeiten außer „privat“ unterstützt.

**Administration - Sichtbarkeit ändern**

**Benutzer und Sichtbarkeit auswählen**

Bitte wählen sie den Benutzer aus, bei dessen Experimenten sie die Sichtbarkeit ändern möchten. Bestimmen sie dann, ob die Änderung alle oder nur private Experimente betreffen soll.

Benutzer auswählen

Benutzerkonto	Benutzername
F_LAUBERT	François Laubert
JEAN	Jean-Paul Clemard
J_SMITH	John Smith
M_MUSTERMANN	Martin Mustermann
TEST	Julie Blanchard
TEST1	Antoine Remauld

Sichtbarkeit ändern von

privaten Experimenten

allen Experimenten

Sichtbarkeit ändern auf

Jeder

Standort

Abteilung


Labor

Kostenstelle

< Zurück   Weiter >   Abbrechen

Nachdem Sie Ihre Auswahl getroffen haben, klicken Sie bitte auf „Weiter“.

**Administration - Sichtbarkeit ändern**

 **Begründung für das Ändern der Sichtbarkeit**

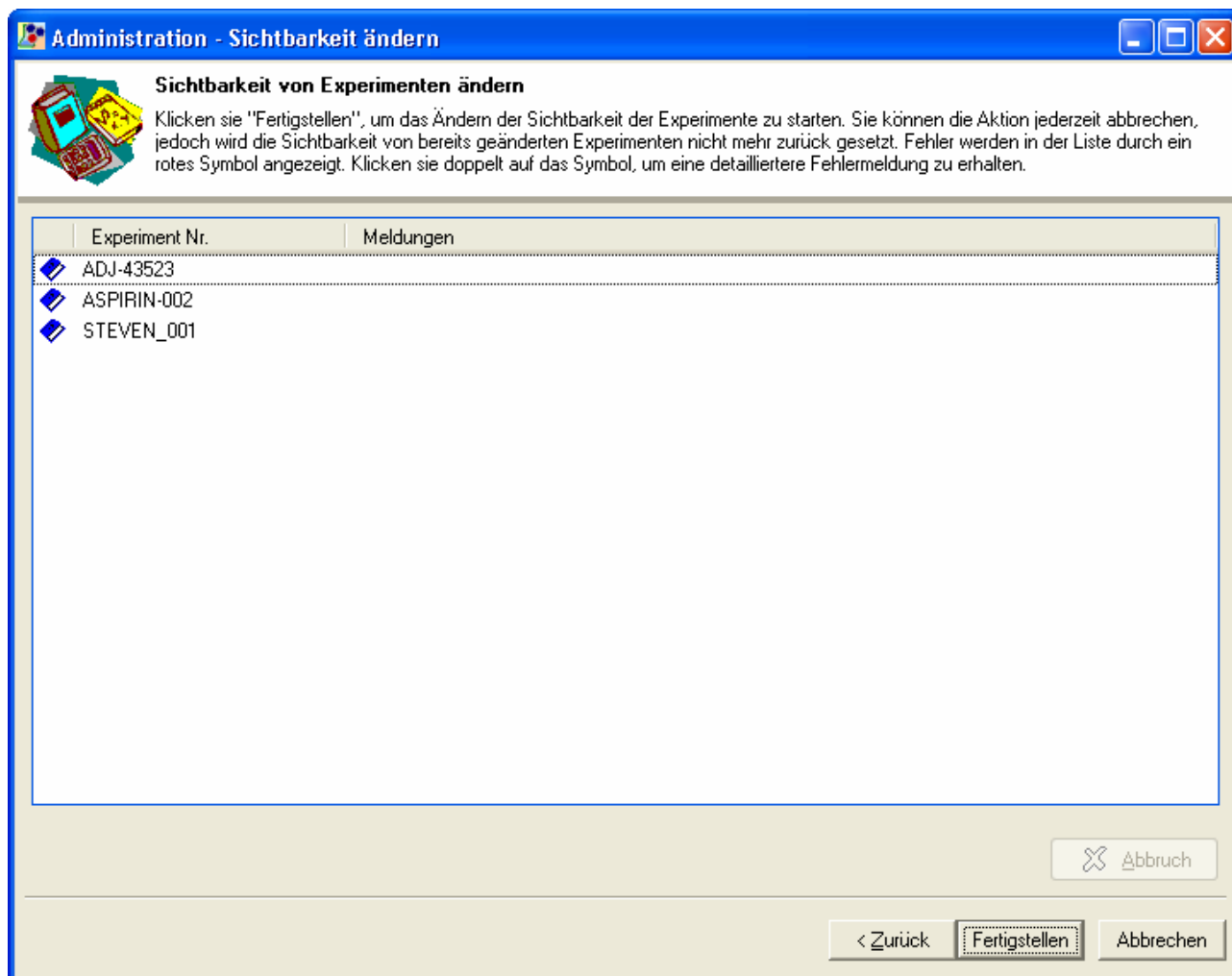
Sie können hier eine Begründung für die Änderung der Sichtbarkeit der Experimente eingeben. Diese Begründung wird für alle zu ändernden Experimente verwendet.

Begründung:

< Zurück   Weiter >   Abbrechen

Auf dieser Seite können Sie eine optionale Begründung für Änderung der Sichtbarkeit eingeben. Wenn Sie einen Text eintragen, wird er in den Protokollinformationen jedes einzelnen Experiments gespeichert.

Klicken Sie anschließend auf „Weiter“, um fortzufahren.



Hier sehen Sie noch einmal die betreffenden Experimente in einer Liste. Klicken Sie auf „Fertigstellen“, um mit der Änderung der Sichtbarkeit zu beginnen. ensochemLab wird die Liste nun Stück für Stück abarbeiten. Zu jedem Experiment sehen Sie in der linken Spalte den aktuellen Status.

Um den Vorgang abzubrechen, klicken Sie bitte auf „Abbruch“. Bereits geänderte Experimente werden dabei jedoch nicht wiederhergestellt.

Nach Abschluss der Gesamtoperation können Sie den Dialog mit dem „Schließen“ Knopf verlassen.

## 9.2. Besitzer ändern

Unter „Administration“ finden Sie auch den Befehl „Besitzer ändern“, mit dem Sie alle Experimente eines Benutzers an einen anderen Benutzer (wahlweise auch sich selbst) weitergeben können.

Auf der ersten Seite des Assistenten wählen Sie bitte links den zu bearbeitenden Benutzer und rechts den Empfänger der Experimente aus:

**Administration - Besitzer ändern**

**Benutzer auswählen**  
Wählen sie hier die Benutzer aus, deren Besitz von Experimenten sie ändern möchten.

Alter Besitzer		Neuer Besitzer	
Benutzerkonto	Benutzername	Benutzerkonto	Benutzername
F_LAUBERT	François Laubert	F_LAUBERT	François Laubert
JEAN	Jean-Paul Clemard	JEAN	Jean-Paul Clemard
J_SMITH	John Smith	J_SMITH	John Smith
M_MUSTERMANN	Martin Mustermann	M_MUSTERMANN	Martin Mustermann
TEST	Julie Blanchard	TEST	Julie Blanchard
TEST1	Antoine Remauld	TEST1	Antoine Remauld

< Zurück    Weiter >    Abbrechen

Bitte beachten Sie, dass ensochemLab hier nur Benutzer anzeigt, die in Ihrer Benutzerliste enthalten sind. Dies kann entweder die normale Liste im Administrationsdialog, die Standardbenutzerverwaltung oder eine kundenspezifische Benutzerverwaltung sein.

Sollten Sie einen Benutzereintrag bereits gelöscht haben, muss er für diese Operation wieder in die Benutzerverwaltung eingefügt werden.

Außerdem dürfen der ursprüngliche Benutzer und der Empfänger der Experimente nicht identisch sein.

Nachdem Sie Ihre Auswahl getroffen haben, klicken Sie bitte auf „Weiter“, um fortzufahren.

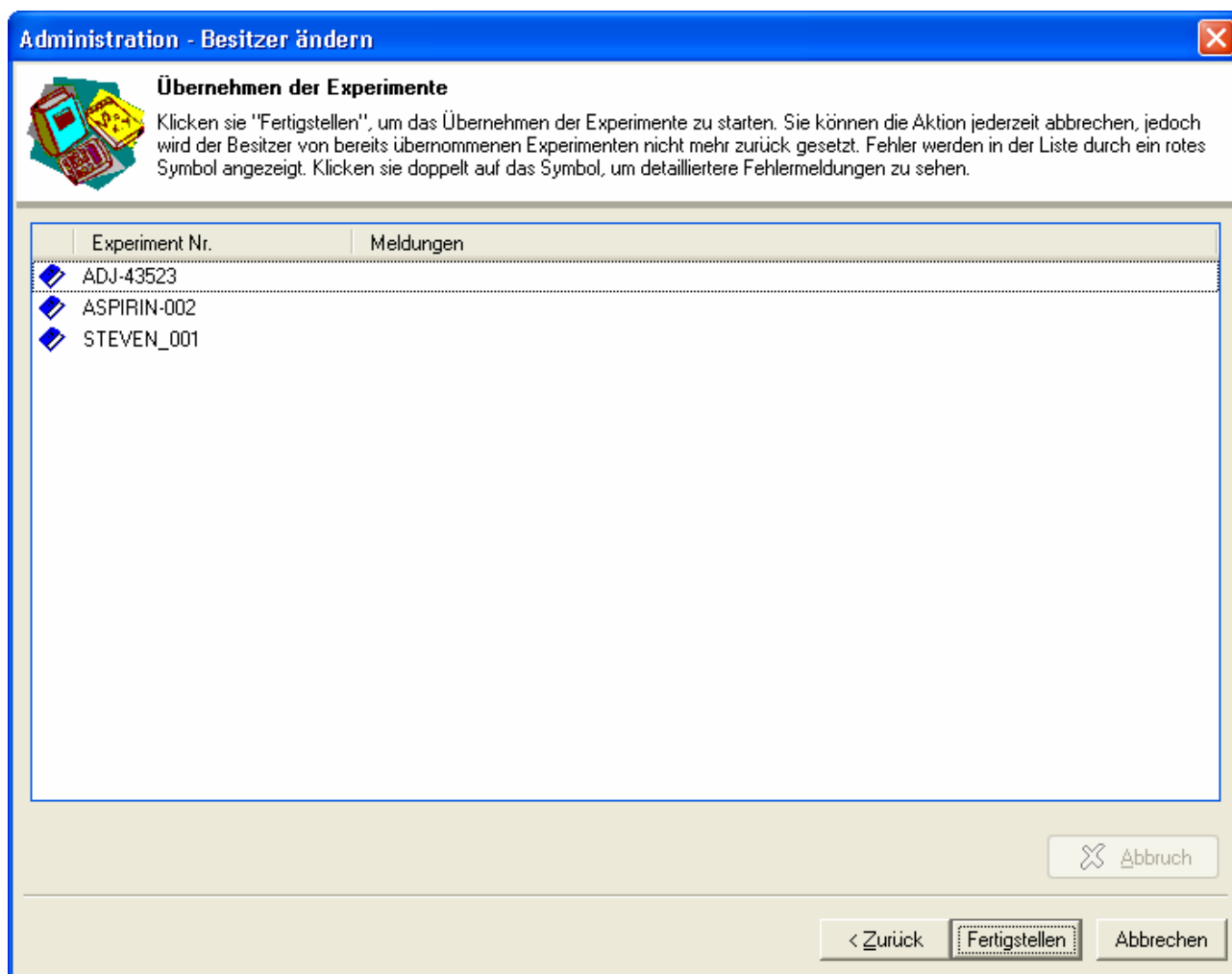
Sollte der links angewählte Benutzer keine Experimente besitzen, erhalten Sie eine Fehlermeldung.

Die nächste Seite dient zur Eingabe einer obligatorischen Begründung, die in den Protokollinformationen jedes einzelnen Experiments gespeichert wird:

The screenshot shows a window titled "Administration - Besitzer ändern" with a close button in the top right corner. Below the title bar, there is a small icon of a hand writing on a document and the heading "Begründung für das Übertragen". The main text reads: "Bitte geben sie hier eine Begründung ein, warum sie die Experimente vom einen auf den anderen Benutzer übertragen wollen. Diese Begründung wird für alle zu übertragenden Experimente verwendet." Below this text is a large, empty text input area. At the bottom right of the window, there are three buttons: "< Zurück", "Weiter >" (which is highlighted with a dashed border), and "Abbrechen".

Nachdem Sie eine Begründung eingegeben haben, klicken Sie bitte erneut auf „Weiter“.

Die letzte Seite des Assistenten erscheint:



In der Liste sehen Sie jedes Experiment des Benutzers. Die Liste wird nach einem Klick auf „Fertigstellen“ Eintrag für Eintrag abgearbeitet. Am Symbol neben der Experimentnummer sehen Sie den aktuellen Status (noch nicht angefangen, in Verarbeitung, abgeschlossen, Fehler aufgetreten).

Mit einem Klick auf „Abbruch“ können Sie den Vorgang jederzeit abbrechen, bereits weitergegebene Experimente werden dabei jedoch nicht zurückgesetzt.

Nach Abschluss der Operation klicken Sie bitte auf „Schließen“, um zum Hauptfenster zurückzukehren.

### 9.3. Benutzerobjekte verwalten

Diese Funktion befasst sich mit allen anderen Benutzerdaten außer den Experimenten. Dies sind zurzeit:

- Persönliche Ordner
- Einstellungen
- Anzeigelayouts
- Vorlagen für Versuchsverläufe
- Textbausteine
- Berechnungsvorlagen
- Berichte

Persönliche Ordner sowie Einstellungen eines Benutzers können nur gelöscht werden. Alle anderen Objekte können entweder gelöscht, übernommen oder an einen anderen Benutzer weitergegeben werden.

Sie starten das entsprechende Modul, indem Sie im Hauptmenü unter „Administration“ auf „Benutzerobjekte verwalten“ klicken. Das folgende Fenster erscheint, bei dem wir zuerst die Seite „Hinweise“ betrachten:

**Benutzerobjekte verwalten**

Dieser Dialog zeigt die Datenbankobjekte, die bestimmten Benutzern gehören. Sie können einige oder alle dieser Objekte löschen bzw. sie an einen anderen Besitzer übergeben. Nutzen sie diese Funktionalität, wenn ein Benutzer ihre Firma verlässt.

Bitte beachten sie: Sie können mit diesem Dialog keine Experimente löschen oder deren Besitzrechte ändern.

Benutzerkonto	Name:
F_LAUBERT	François Laubert
JEAN	Jean-Paul Clemard
J_SMITH	John Smith
M_MUSTERMANN	Martin Mustermann
TEST	Julie Blanchard
TEST1	Antoine Remauld

Datenbankobjekte von ENSO

Der Benutzer besitzt Ordner.  
Der Benutzer besitzt Einstellungen.

Öffentl... Name:

Vorlagen für Versuchsverlauf:

ja Description standard pour archiver

Zusammenfassung / Hinweise

Schließen

Auf der linken Seite sehen Sie eine Liste aller Benutzer, die Objekte besitzen. Standardmäßig ist diese Liste alphabetisch nach dem Benutzerkonto sortiert. Mit einem Klick auf eine andere Spaltenüberschrift können

Sie nach dieser sortieren. Ein erneuter Klick auf eine Überschrift ändert die Sortierreihenfolge (aufsteigend / absteigend).

Bitte wählen Sie einen Eintrag aus. Das Programm zeigt danach auf der rechten Seite alle Objekte im Besitz dieses Benutzers an. Zu jedem Objekt sehen Sie den Typ (die Ansicht ist nach Kategorien gruppiert), sowie die Information, ob es sich um ein öffentliches Objekt handelt. Dabei sind nur die Kategorien sichtbar, zu denen es Objekte gibt.

Kreuzen Sie nun einfach die zu bearbeitenden Objekte an und wählen Sie dann aus der Symbolleiste die gewünschte Operation aus:




Löscht die ausgewählten Objekte unwiderruflich aus der Datenbank




Übernimmt den Besitz an den ausgewählten Objekten



Gibt die ausgewählten Objekte an einen anderen Benutzer weiter. Hierbei wird ein Dialog geöffnet, in dem Sie den Zielbenutzer angeben können.

Mit dem Knopf „Alle Objekte löschen“ () löschen Sie unabhängig von der aktuell angekreuzten Auswahl alle Objekte des gerade selektierten Benutzers inklusive seiner persönlichen Ordner und Einstellungen.

Um die Liste der Benutzer neu zu laden, klicken Sie bitte auf „Aktualisieren“ ()

Mit  bzw.  wählen Sie alle Objekte des aktuellen Benutzers an bzw. ab.

Bitte beachten Sie, dass Ihre in diesem Dialog vorgenommenen Änderungen erst nach einer erneuten Anmeldung der betroffenen Benutzer wirksam sind, da einige Datensätze zwecks besserer Geschwindigkeit nur einmal pro Sitzung geladen werden. Löschen Sie ein solches Objekt in der Zwischenzeit, verbleibt es bis zur nächsten Anmeldung im Zwischenspeicher.

Wenn Sie keine so detaillierte Auslistung jedes einzelnen Objekts, sondern nur eine grobe Übersicht wünschen, bietet Ihnen dies die Seite „Zusammenfassung“, wie im folgenden Bild sichtbar:

**Benutzerobjekte verwalten**

Dieser Dialog zeigt die Datenbankobjekte, die bestimmten Benutzern gehören. Sie können einige oder alle dieser Objekte löschen bzw. sie an einen anderen Besitzer übergeben. Nutzen sie diese Funktionalität, wenn ein Benutzer ihre Firma verlässt.

Bitte beachten sie: Sie können mit diesem Dialog keine Experimente löschen oder deren Besitzrechte ändern.

Benutzerkonto	Name
F_LAUBERT	François Laubert
J_SMITH	John Smith
JEAN	Jean-Paul Clemard
M_MUSTERMA...	Martin Mustermann

**Zusammenfassung für Benutzer 'Martin Mustermann' (M\_MUSTERMANN)**

Benutzerkonto:	M_MUSTERMANN
Benutzername:	Martin Mustermann
Experimente:	17
Ordner:	6
Einstellungen:	14
Berichte:	2
List & Label Berichte:	2
Anzeigelayouts:	1
Vorlagen für Versuchsverlauf:	3
Textbausteine:	2
Berechnungsvorlagen:	11

Zusammenfassung / Hinweise

Schließen

# 10. Öffentliche Daten

---

ensochemLab bietet für eine Reihe von Datenobjekttypen (speziell für Vorlagen) die Möglichkeit, diese Datensätze als öffentlich zu markieren und somit allen Anwendern zur Verfügung zu stellen. Ein anderer Benutzer kann die öffentlichen Datensätze eines Kollegen grundsätzlich lesend verwenden, jedoch keine Änderungen an ihnen vornehmen und sie auch nicht löschen. Die einzige Ausnahme hiervon besteht im administrativen Verwaltungsdialog für Benutzerobjekte, der bereits in einem der vorherigen Kapitel besprochen wurde.

Für den Fall, dass Änderungen an einem fremden Datensatz nötig sind oder Rückfragen dazu bestehen, zeigt ensochemLab zu jedem Datensatz den Besitzer an.

Ein öffentlicher Datensatz ist immer für alle Benutzer öffentlich, d.h. es besteht keine Möglichkeit, z.B. eine Vorlage für einen Versuchsverlauf nur für das eigene Labor oder eine spezielle Liste von Benutzern zu veröffentlichen.

Als Administrator können Sie im Administrationsdialog auf der Seite „Berechtigungen“ nach Datentyp getrennt festlegen, ob Sie allen Benutzern die Erstellung solcher öffentlicher Objekte erlauben möchten. Eine Aktivierung der Funktion nur für einzelne Benutzer oder Benutzergruppen ist dabei jedoch nicht möglich.

Ist die Funktion, einen öffentlichen Datensatz eines bestimmten Typs zu erstellen, für Benutzer deaktiviert, steht die zugehörige Auswahlbox im normalen „Speichern“ Dialog auch für Sie als Administrator nicht zur Verfügung, da es sich hierbei um eine Funktion im Benutzerkontext handelt. Generell unterscheidet ensochemLab zwischen den persönlichen Daten eines Benutzers (auch wenn dieser Administrator oder der Datensatz öffentlich ist) und administrativen Datensätzen.

Zur Verwaltung administrativer Daten finden Sie für jeden der betreffenden Datentypen einen Verwaltungsdialog im Administrationsmenü des Hauptfensters. Dessen Funktionsweise entspricht im Regelfall der des normalen Dialogs für Benutzer wie er im Benutzerhandbuch beschrieben ist inklusive der Möglichkeit zum Erstellen öffentlicher Datensätze. Aus diesem Grund geht dieses Kapitel auch nicht näher auf die einzelnen Dialoge ein, weitere Informationen finden Sie im Benutzerhandbuch.

Selbstverständlich können Sie in den Verwaltungsdialogen auch private Datensätze anlegen. Diese Funktion ist zum Beispiel dann nützlich, wenn Sie einen bestimmten Textbaustein erst ab einem Stichtag zur Verfügung stellen wollen oder einen Bericht vor der Veröffentlichung noch weiter verbessern möchten.

Ein im Verwaltungsdialog erzeugter Datensatz (unabhängig davon ob öffentlich oder privat) kann grundsätzlich von jedem Administrator verändert oder gelöscht werden.

Wenn Sie einen administrativen Datensatz bearbeiten, werden Sie grundsätzlich als Verantwortlicher (Besitzer) eingetragen. Somit handelt es sich beim angezeigten Besitzer immer um den letzten Bearbeiter.

# 11. Benutzerkonten

---

Um sich bei ensochemLab anmelden zu können, benötigt jeder Anwender ein Benutzerkonto. Ein solches Konto ist per Definition erst einmal unabhängig von der ensochemLab Benutzertabelle, der Standardbenutzerverwaltung oder einer kundenspezifischen Benutzerverwaltung. Diese programminternen Benutzerverwaltungen stellen nur weitere Informationen zu einem bereits existierenden Konto zur Verfügung.

Der Anmeldevorgang und somit die Art eines Benutzerkontos unterscheiden sich zwischen den verschiedenen Editionen.

Bei ensochemLab Personal Edition ist jeder Benutzer mit einem Windows-Konto ebenfalls ein ensochemLab Benutzer. Berechtigungsstufen werden hierbei nicht unterschieden, jeder Benutzer verfügt über administrativen Zugriff.

Bei ensochemLab Workgroup Edition existieren auf dem Servercomputer drei verschiedene Benutzergruppen. Um Benutzerrechte zu vergeben, müssen Sie daher auf dem ensochemLab Server Mitglied der Administratorengruppe von Windows sein.

Jeder Domänenbenutzer, der Mitglied einer dieser drei Gruppen ist, erhält Zugriff auf ensochemLab. Die Berechtigungsstufe hängt dabei von der jeweiligen Gruppe ab, bei der er Mitglied ist:

ensochemLab Database Readers	Mitglieder dieser Gruppe verfügen über lesenden Zugriff zu ensochemLab. Sie können weder Experimente anlegen, noch bearbeiten. Berichte können jedoch erzeugt werden.
ensochemLab Database Writers	Bei den Mitgliedern dieser Gruppe handelt es sich um „normale“ Benutzer. Sie können Experimente erstellen und bearbeiten.
ensochemLab Database Admins	Mitglieder dieser Gruppe verfügen zusätzlich zum „normalen“ Zugriff noch über die Berechtigung, administrative Einstellungen für alle Benutzer zu ändern.

Bitte beachten Sie, dass bei mehrfachen Gruppenzuordnungen immer die höchste Stufe verwendet wird, da diese die jeweils niedrigeren Stufen beinhaltet.

Natürlich können Sie auch ganze Windows Sicherheitsgruppen als Mitglieder der ensochemLab Zugriffgruppen definieren.

Ein manuelles Anlegen von Datenbankbenutzern wird bei der Workgroup Edition nicht unterstützt.

Die Enterprise Edition unterstützt mehrere verschiedene Datenbanksysteme. Aus diesem Grund können Benutzer auf verschiedene Art und Weise erzeugt werden. Im Folgenden werden die jeweils einfachsten Wege beschrieben.

Das Erzeugen eines Kontos geschieht entweder transparent mit der separat erhältlichen ensochemLab Datenbankbenutzerverwaltung oder mit einem beliebigen anderen, datenbankspezifischen Werkzeug. Wir empfehlen hierbei für die einzelnen Datenbanksysteme:

Oracle	Oracle Enterprise Manager <i>oder</i> Oracle DBA Studio
Microsoft SQL Server	SQL Server Management Studio <i>oder</i> SQL Server Management Studio Express (kostenlos erhältlich per Download von <a href="http://www.microsoft.com">www.microsoft.com</a> )
MySQL	MySQL Query Browser

## **Oracle:**

Zum Zuweisen der gewünschten Berechtigungsstufe muss dem Benutzer bei Oracle die entsprechende Rollenmitgliedschaft erteilt werden. Es existieren drei Rollen für ensochemLab:

EC_LAB_READ	Lesender Zugriff auf die Datenbank, keine Erstellung eigener oder Bearbeitung existierender Experimente
EC_LAB_REG	„Normaler“ Zugriff: Erstellung und Bearbeitung von Experimenten.
EC_LAB_ADMIN	Administrativer Zugriff: Normale Bearbeitungsrechte verbunden mit der Möglichkeit, administrative Einstellungen für alle Benutzer zu ändern.

Die Rolle muss nicht als Standardrolle gesetzt werden. Neben der ensochemLab Rolle wird nur noch entweder die Rolle „Connect“ oder das Systemprivileg „Create Session“ benötigt.

## **Microsoft SQL Server:**

Wird die integrierte Windows Authentifizierung verwendet, muss für den entsprechenden Windows Benutzer ein „Login“ in der Datenbank erstellt werden. Andernfalls ist ein Datenbankbenutzer zu erstellen.

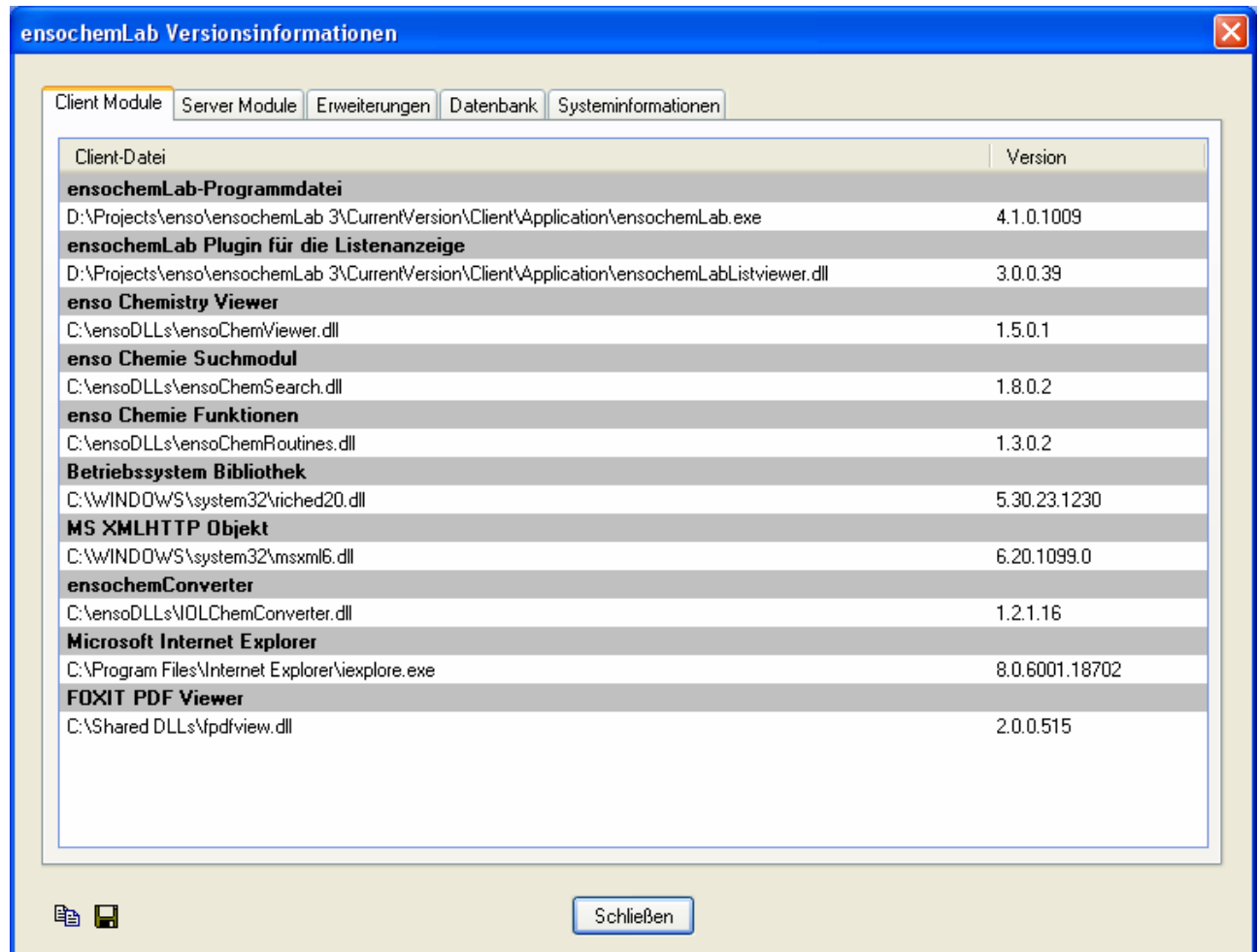
Die Zuweisung der Berechtigungen erfolgt analog zu Oracle. In der ensochemLab Datenbank existieren die gleichen Rollen, die Benutzern zugewiesen werden können. (Beschreibung siehe oben).

## **MySQL**

Unter MySQL muss zuerst der Benutzer erstellt werden. Danach müssen ihm mit SQL-Kommandos die Rechte zum Zugriff auf die ensochemLab Datenbankobjekte erteilt werden. Hierbei handelt es sich um etliche auszuführende Befehle. Wir empfehlen daher dringend, die ensochemLab Datenbankbenutzerverwaltung einzusetzen. Auf Wunsch stellen wir Ihnen aber auch gerne entsprechende SQL-Skripts bereit.

# 12. Die Versionsinformationen

Wenn dem firmeninternen Support ein Problem eines ensochemLab Benutzers gemeldet wird, ist es oft hilfreich, die vom Benutzer eingesetzten Programmversionen zu erfahren. Hierfür bietet die Software eine komfortable Übersichtsliste an. Sie rufen die Liste ab, indem Sie im Hauptmenü unter „Optionen“ auf „Versionsinformationen“ klicken. Der folgende Dialog erscheint:



Wie Sie sehen, besteht der Dialog aus mehreren Karteireitern. Unter „Client Module“ finden Sie eine Liste sämtlicher vom ensochemLab Client verwendeten Module zusammen mit ihren Versionsinformationen. Hier können Sie zum Beispiel auch erkennen, ob auf einem Arbeitsplatzcomputer eine falsche DLL aus einem anderen Pfad verwendet wird.

Die kundenspezifischen Erweiterungen wurden auf die Seite „Erweiterungen“ ausgelagert.

Unter „Server Module“ finden Sie eine entsprechende Dateiliste für den Server. Zusätzlich wird noch die Version des Servers als solcher sowie die Version des verwendeten .net Framework angezeigt. Die Daten zur Schnittstelle der Chemiedatenbank sind ebenfalls auf dieser Seite zu finden.

Auch die Information, welcher Servercomputer verwendet wird, kann hilfreich sein, um z.B. Fehler auf einzelnen Knoten eines Clusters zu finden.

Eine andere Ansicht finden Sie unter „Datenbank“. Hier wird in einer Tabelle eine große Anzahl von Informationen zur Serverkonfiguration angezeigt. Bei einem Administrator werden auch verschiedene vom System verwendete Kennwörter wie z.B. das Datenbankkennwort für den Zugriff auf ACD angezeigt. Bei einem normalen Benutzer ist dies selbstverständlich nicht der Fall.

Die folgenden Werte sind in der Tabelle enthalten:

Einstellung	Bedeutung
ACD Schnittstelle verfügbar	Gibt an, ob auf dem Server eine ACD Schnittstelle eingerichtet wurde.
Aktionen, bei denen Versionen angelegt werden	Gibt an, bei welchen Benutzeraktionen automatisch eine neue Version eines Experiments erstellt wird.
Automatische Anmeldung	Gibt an, ob meine automatische Anmeldung beim Server ohne die explizite Angabe von Benutzername und Kennwort möglich ist.
Benutzer können Abteilungsangaben überschreiben	Gibt an, ob Benutzer bei Daten andere Abteilungen als die für sie in der Benutzerverwaltung festgelegten verwenden können.
Benutzer können Experimente löschen	Gibt an, ob Benutzer Experimente löschen können.
Benutzer können Experimentnummern angeben	Gibt an, ob Benutzer selbst Experimentnummern vergeben können oder ob nur die Übernahme automatisch generierter Experimentnummern zulässig ist.
Benutzer können Laborangaben überschreiben	Gibt an, ob Benutzer bei Daten andere Labors als die für sie in der Benutzerverwaltung festgelegten verwenden können.
Benutzer können Projektangaben überschreiben	Gibt an, ob Benutzer bei Daten andere Projekte als die für sie in der Benutzerverwaltung festgelegten verwenden können.
Benutzerinformationen automatisch aktualisieren	Gibt an, ob, und wenn ja, wie bei der Anmeldung eines Benutzers automatisch seine Daten in der Benutzerverwaltung aktualisiert werden sollen.
Bezeichner Moleküldatenbank	Gibt den eindeutigen Bezeichner der Moleküldatenbank auf dem Server an.
Bezeichner Reaktionsdatenbank	Gibt den eindeutigen Bezeichner der Reaktionsdatenbank auf dem Server an.
Chemiedatenbank	Gibt den Typ (das Produkt) der Chemiedatenbank an.
Chemieschnittstelle	Gibt an, ob der Zugriff direkt über einen Treiber oder über einen weiteren Chemieservice geschieht.
Datenbankbezeichner	Gibt den Bezeichner der Datenbankverbindung auf dem ensochemLab Server an.
Datenbankname	Gibt den Namen der Datenbank auf dem Server an. Diese Angabe ist nicht bei allen Datenbanksystemen verfügbar.
Datenbankserver	Gibt den Namen des Datenbankservers an.
Datenbanksystem	Gibt den Namen des verwendeten Datenbanksystems an.
Datenbanktyp	Gibt den Typ der verwendeten Datenbank an.
Datenbankversion	Gibt die vom Datenbanksystem bereitgestellten Versionsinformationen an.
Definitionsdatei für Abfragengenerator	Gibt den Namen der Konfigurationsdatei auf dem Server an, in der die Felder für den Abfragengenerator und das

	Berichtsmodul definiert sind.
Drei Unterschriftsfelder drucken	Gibt an, ob drei Unterschriftsfelder statt einem gedruckt werden sollen.
Experimente als ungültig markieren, statt sie zu löschen	Gibt an, ob Experimente nur als ungültig markiert und nicht aus der Datenbank entfernt werden sollen, wenn ein Benutzer sie im Programm löscht.
Externe Benutzerverwaltung	Gibt an, ob eine externe (kundenspezifische) Benutzerverwaltung verwendet wird
Feld für ACD-Spektrennummer	Gibt das Datenbankfeld an, in der die ACD-Spektrennummer gespeichert werden soll.
Funktion zur Erzeugung von Experimentnummern	Gibt die Datenbankfunktion zur automatischen Erzeugung von Experimentnummern an. Ohne diese Angabe steht die Generierung von Experimentnummern nicht zur Verfügung.
Funktion zur Erzeugung von Zielmolekülnamen	Gibt die Datenbankfunktion zur automatischen Erzeugung von Zielmolekülnamen an. Ohne diese Angabe steht die Generierung von Zielmolekülnamen nicht zur Verfügung.
Interne Benutzerverwaltung verfügbar	Gibt an, ob die integrierte Standardbenutzerverwaltung in der aktuellen Konfiguration verfügbar ist.
Konvertierungsmodul für Binärdaten	Gibt das vom Server verwendete Konvertierungsmodul für Binärdaten an.
Kundenspezifisches Datenbankmodul	Gibt das vom Server verwendete kundenspezifische Modul für den Datenzugriff an.
Kundenspezifisches Modul für Benutzerinformationen	Gibt das vom Server verwendete Modul zum Auslesen von Benutzerinformation an. Dieses wird für eine automatische Aktualisierung der Benutzerinformationen (siehe oben) benötigt.
Metallgehalt, -Menge und –Ausbeute verwenden	Gibt an, ob spezielle Funktionen für die Metallchemie aktiviert sind.
Nostructures entfernen	Gibt an, ob der Server „Nostructures“ aus Strukturen entfernt, bevor diese gespeichert werden.
Ole Provider	Gibt den für den Datenzugriff verwendeten „Ole Provider“ an. Diese Angabe ist nicht für alle Datenbanksysteme verfügbar.
Oracle-Benutzername für ACD	Gibt den Benutzernamen an, mit dem auf die ACD Datenbank zugegriffen wird.
Oracle-Instanz für ACD	Gibt die Oracle-Instanz des Datenbankservers an, der die ACD Datenbank enthält.
Oracle-Kennwort für ACD	Gibt das Kennwort des für den Zugriff auf die ACD Datenbank verwendeten Benutzers an.
Pfad zum ACD-Benennungsprogramm	Gibt den Pfad zum externen ACD Programm an, das für die automatische Generierung von Strukturnamen verwendet werden soll.
Präfix für Datenbankobjekte	Gibt das Präfix an, um das alle Datenbankobjekte vor dem Zugriff erweitert werden.
Präfix für Experimentnummer	Gibt ein Präfix an, das allen Experimentnummern der Benutzer voran gestellt wird.
Präfix für Zielmoleküle	Gibt ein Präfix an, das allen internen Bezeichnungen für Zielmoleküle (MOL ID) in der Datenbank voran gestellt wird.
Präfix für Moleküldatenbank	Gibt ein Präfix an, das allen internen Bezeichnungen für Moleküle (MOL ID) in der Datenbank voran gestellt wird.

Präfix für Reaktionsdatenbank	Gibt ein Präfix an, das allen internen Bezeichnungen für Reaktionen (RXN ID) in der Datenbank voran gestellt wird.
Reagenziendatenbank verwenden	Gibt an, ob eine Reagenziendatenbank verwendet werden soll.
Server kann Experimentnummern erstellen	Gibt an, ob der Server automatisch Experimentnummern erzeugen kann.
Server kann Molekülnamen erstellen	Gibt an, ob der Server automatisch Namen für Moleküle erzeugen kann.
Server kann Zielmolekülnamen erstellen	Gibt an, ob der Server automatisch Namen für Zielmoleküle erzeugen kann.
Server verwendet Stereochemie	Gibt an, ob die Stereochemiefunktionen in der Chemiedatenbank aktiviert wurden.
Standardchemieeditor	Gibt den standardmäßig für Benutzer eingestellten Chemieeditor an, wenn diese nicht selbst einen anderen Editor ausgewählt haben.
Status von Versuchsreihen automatisch ändern	Gibt an, ob bei einer Statusänderung des Hauptexperiments automatisch auch die Stati der untergeordneten Experimente geändert werden sollen.
Suffix für Datenbankobjekte	Gibt das Suffix an, um das alle Datenbankobjekte vor dem Zugriff erweitert werden.
URL für Chemieserver	Gibt die URL des verwendeten Chemieservice an. Dieser Eintrag wird bei der Chemieschnittstelle „Treiber“ nicht verwendet.
Verbindungsparameter	Gibt optionale Parameter für die Datenbankverbindung an.
Zielformat für Binärkonvertierung	Gibt das Format an, in dem konvertierte Binärdaten vom Server zurück zum Client gesendet werden.

Die letzte Seite, „Systeminformationen“, zeigt einige Systemkenndaten zum aktuellen Clientcomputer an. Diese Daten können Sie verwenden, um z.B. den Computer eines Benutzers, der einen Fehler gemeldet hat, zu identifizieren. Der Suchpfad gibt Aufschluss darüber, warum manche Bibliotheken unter Umständen nicht gefunden werden können.

Bitte beachten Sie, dass alle Seiten dieses Dialogs nur der Information dienen. Direkte Änderungen an der Konfiguration sind hier nicht möglich.

# 13. Ende der Anleitung

---

Glückwunsch! Hiermit haben Sie erfolgreich die grundlegende Konfiguration Ihrer ensochemLab Installation abgeschlossen.

Wir wünschen Ihnen eine angenehme und produktive Arbeit mit ensochemLab

**Das ensochemLab Produkt-Team**

