

ensochemSheet

Version 1.4

Handbuch



enso Software GmbH

Schulhohlstraße 10a

64711 Erbach

Tel. +49 (6062) 910888

Fax +49 (6062) 910886

E-mail Kontakt@enso-software.com

Inhalt

1. Übersicht	1
2. Installation	2
3. Deinstallation	7
4. Öffnen von Dateien	9
5. Recherche	12
6. Verändern von Daten	17
7. Erstellen neuer Dateien	21
8. Datenblätter mischen	22

1. Übersicht

Dieses Handbuch soll gleichermaßen die Administration (Installation, Definieren von Einstellungen) wie auch die Benutzung von ensochemSheet erläutern.

ensochemSheet ist Programm zur einfachen, tabellarischen Bearbeitung von Strukturen in SD-Dateien. Dabei können neben Strukturen auch beliebige Felder mit alphanumerischen Daten erstellt, bearbeitet und in einer Übersicht angesehen werden. Einige Sonderfunktionen erleichtern die Pflege des Datenbestandes sowie die Recherche. Der Benutzer wird durch ein komfortables Mehrfenstersystem geleitet, das selbst paralleles Arbeiten mit einer größeren Anzahl von Dateien ermöglicht.

Der auf die Benutzung des Programms ausgerichtete Teil dieser Dokumentation ist als eine fortlaufende Einheit von Lektionen konzipiert. Wir empfehlen allen neuen Benutzern, die Kapitel 4 bis 8 in der gegebenen Reihenfolge zu lesen, bevor sie mit der Arbeit mit ensochemSheet beginnen.

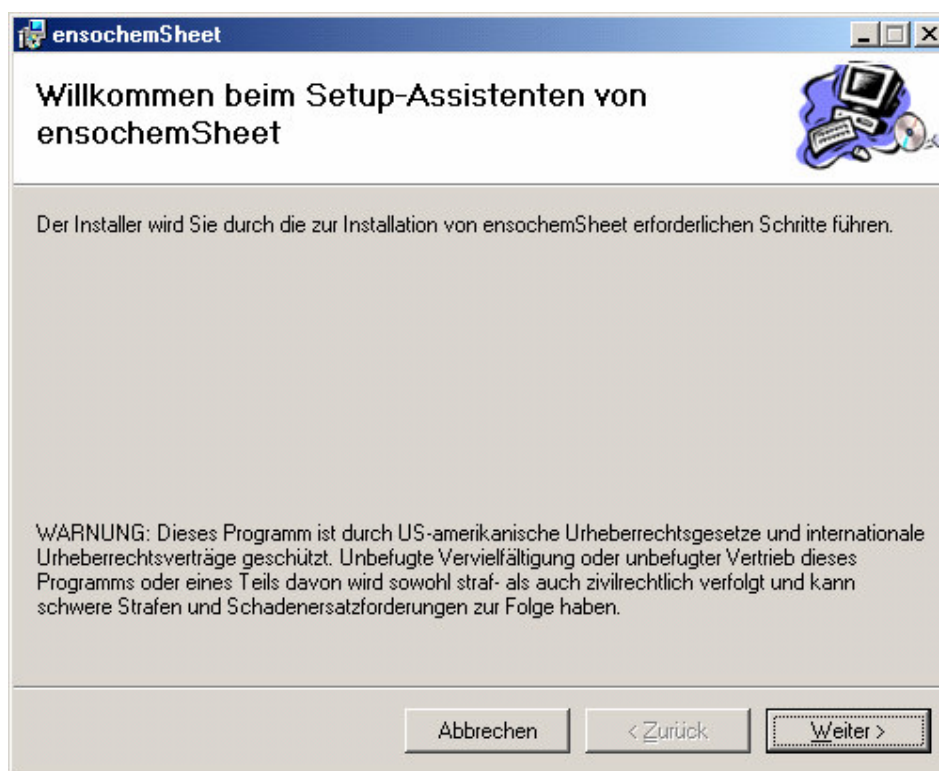
Vielen Dank, dass sie sich für Produkte der enso Software GmbH entschieden haben. Wir wünschen ihnen viel Erfolg bei der Arbeit mit ensochemSheet. Besuchen sie unsere Internetseite unter www.enso-Software.com

2. Installation

Zur Installation von ensochemSheet auf einem einzelnen Arbeitsplatzcomputer müssen sie lediglich die Datei „Setup.exe“ von ihrer Installations-CD aus aufrufen und den Anweisungen auf dem Bildschirm folgen. Bitte beachten sie, dass sie hierfür Administratorrechte auf dem jeweiligen PC benötigen.

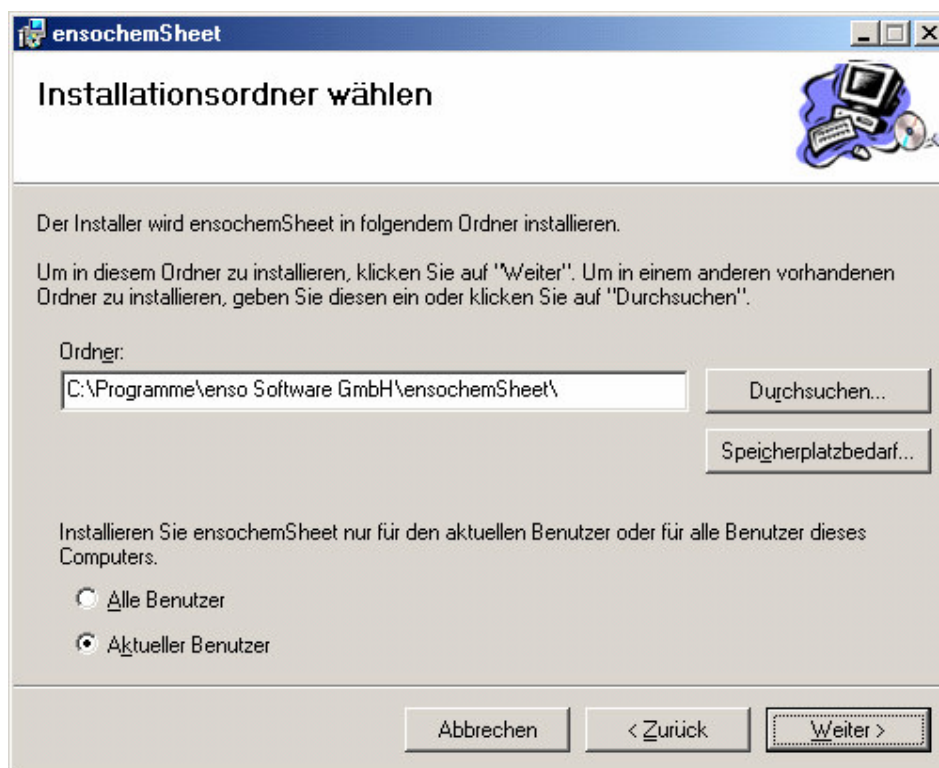
Das Installationsprogramm wird zuerst die Existenz einiger Systemdienste auf ihrem Computer überprüfen und sie gegebenenfalls installieren oder aktualisieren. Dabei kann unter Umständen ein Neustart des Computers erforderlich werden.

Nach dem Start des Setup-Programms sehen sie das folgende Fenster:



Dieser Dialog enthält rein informative und rechtliche Informationen zum Programm. Es ist keine direkte Einflussnahme durch den Benutzer nötig.

Klicken sie auf Weiter. Der folgende Dialog erscheint im Assistenten:



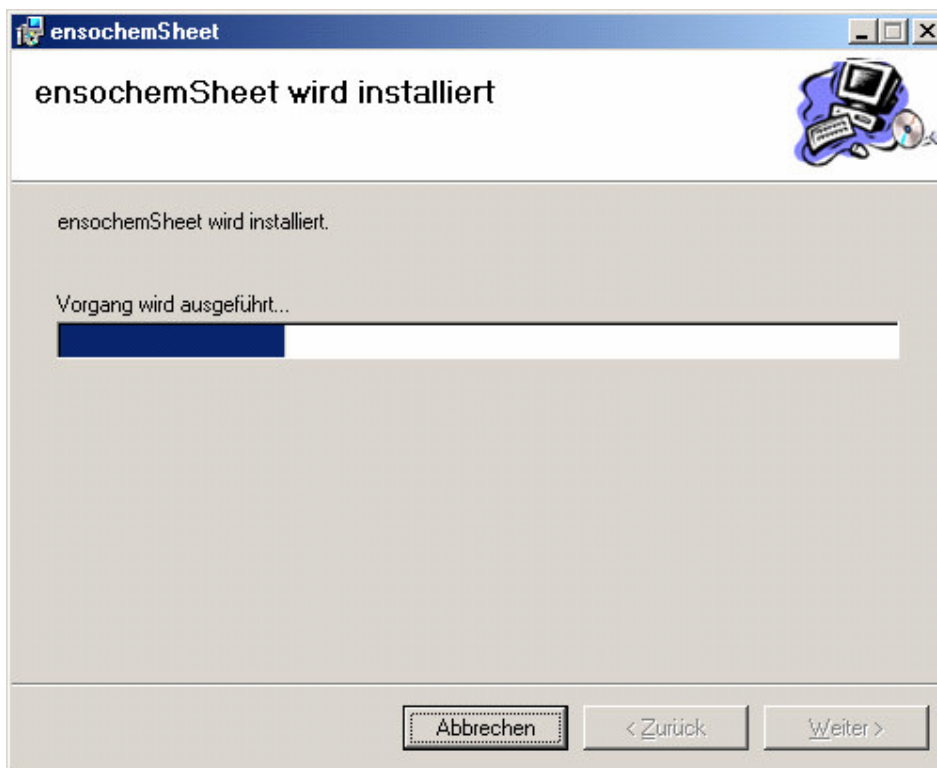
In diesem Dialog können sie angeben, in welches Verzeichnis sie ensochemSheet installieren möchte. Wir empfehlen, dass Standardverzeichnis beizubehalten. Es verweist auf das lokale Programmverzeichnis ihrer Windows-Installation und ein Unterverzeichnis, in dem standardmäßig alle Produkte der enso Software GmbH installiert werden.

Außerdem können sie bestimmen, ob sie ensochemSheet nur für den aktuell angemeldeten Benutzer oder für alle Benutzer dieses Computers installieren möchten.

Nachdem sie ihre Entscheidungen getroffen haben, klicken sie bitte auf „Weiter“, um mit der Installation fortzufahren.

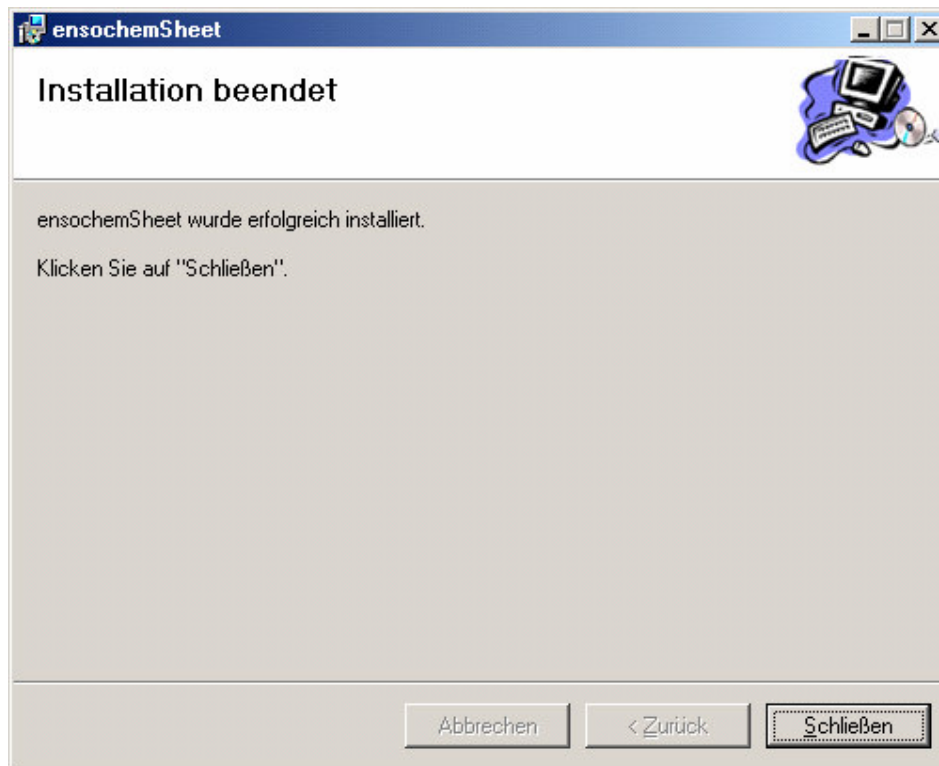


Wenn dieser Bildschirm angezeigt wird, ist Setup bereit für die tatsächliche Installation von ensochemSheet. Bis zu diesem Zeitpunkt sind noch keine Änderungen an ihrem System vorgenommen (das Systemupdate vor dem Start des Setup-Programms bildet hierbei eine Ausnahme). Klicken sie auf „Weiter“, um das Programm jetzt zu installieren oder auf „Zurück“ um ihre Angaben noch einmal zu verändern.



Während dieses Fenster angezeigt wird, läuft die Installation und Setup führt die zur Einrichtung des Programms notwendigen Schritte aus. Dies kann einige Minuten in Anspruch nehmen, abhängig von der Geschwindigkeit ihres Computers. Der Fortschrittsbalken zeigt jeweils den aktuellen Stand des gerade ausgeführten Vorgangs an.

Bitte warten sie, bis automatisch das nächste Fenster erscheint. Ein Klick auf den „Abbrechen“ Knopf beendet die Installation und entfernt die bereits installierten Programmteile wieder von ihrem PC.



Wenn dieser Bildschirm angezeigt wird, wurde ensochemSheet erfolgreich und fehlerfrei auf ihrem Computer installiert. Sie können es nun über das Startmenü und die Ordner „Programme -> enso Software GmbH -> ensochemSheet -> ensochemSheet starten“ ausführen.

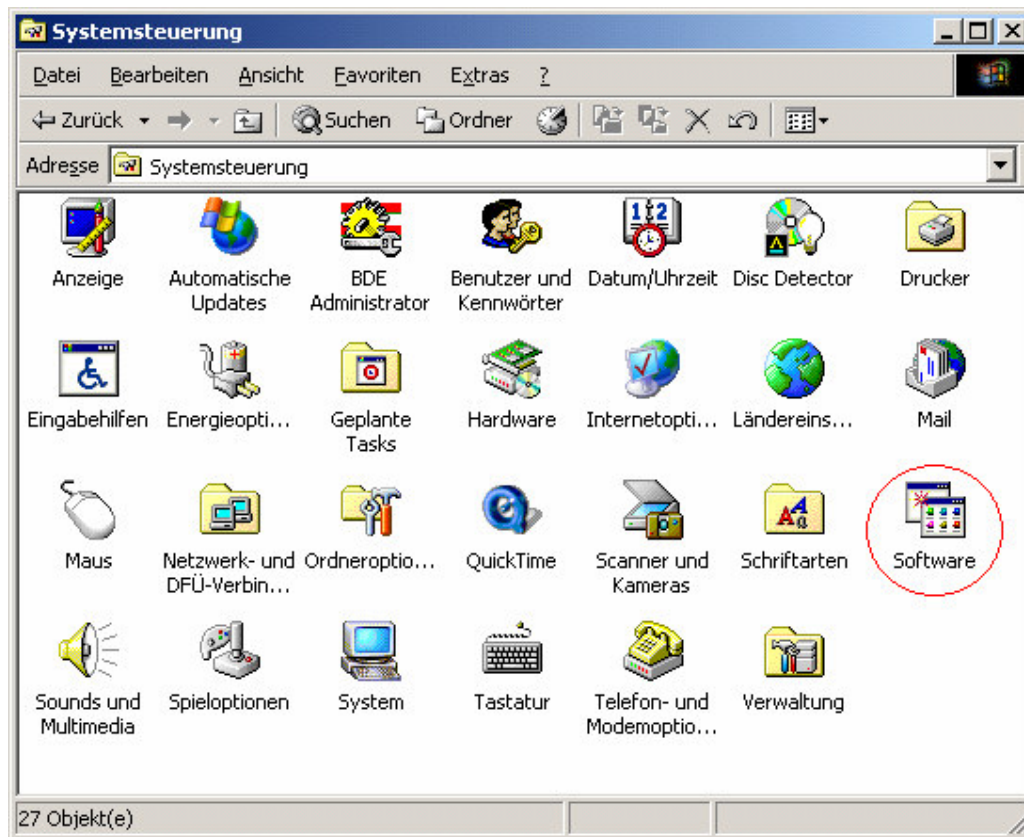
Bitte beachten sie, dass sie für die Benutzung von ensochemSheet unter Windows XP mit Service Pack 2 oder neuer eine Java Virtual Machine von Sun Microsystems benötigen. Sollten sie über kein solches Programm verfügen, können sie es unter http://www.java.com/en/download/windows_automatic.jsp downloaden.

ensochemSheet ist mehrsprachig. Beim Programmstart entscheidet sie Software anhand der im Betriebssystem eingestellten Sprache, welche Benutzerschnittstelle angezeigt werden soll. Sie können ihre Sprache entweder über die in Windows integrierten Sprachoptionen systemweit ändern oder ensochemSheet mit dem Kommandozeilenparameter /LNG=DE für deutsch bzw. /LNG=EN für englisch starten.

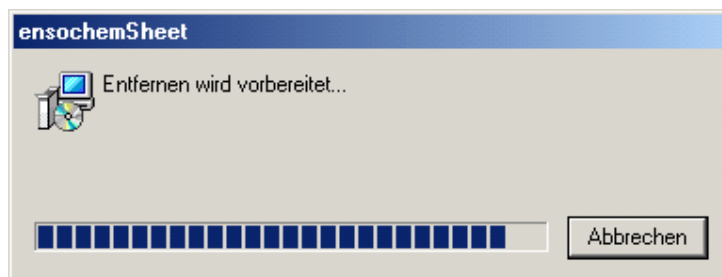
3. Deinstallation

Um ensochemSheet wieder von einem Arbeitsplatzcomputer zu entfernen, können sie die in Windows integrierten Funktionen zur Deinstallation von Anwendungsprogrammen verwenden. Hierfür müssen sie mit einem Benutzerkonto angemeldet sein, das über lokale Administratorenrechte verfügt.

Öffnen sie die Systemsteuerung, indem sie im Startmenü auf „Einstellungen“ und dann auf „Systemsteuerung“ klicken. Doppelklicken sie nun auf dem Element „Software“:



Wählen sie in der folgenden Liste nun „ensochemSheet aus und klicken sie auf „Entfernen“. Beantworten sie die Nachfrage mit „Ja“. Danach wird automatisch die entsprechende Funktion des Setup-Programms aufgerufen:



Bitte warten sie, während Setup sämtliche Komponenten von ensochemSheet entfernt. Dieser Vorgang kann je nach der Geschwindigkeit ihres Computers einige Minuten in Anspruch nehmen. Nach erfolgreicher Deinstallation erscheint keine explizite Informationsmeldung, sondern ensochemSheet wird ohne weitere Rückmeldung aus der Liste der installierten Programme entfernt.

Einige von mehreren Produkten der enso Software GmbH gemeinsam genutzte Dateien werden jedoch nicht gelöscht. Sie sollten diese Dateien nach Möglichkeit beibehalten und nur dann löschen, wenn sich keine weiteren Programme der enso Software GmbH mehr auf ihrem Computer befinden:

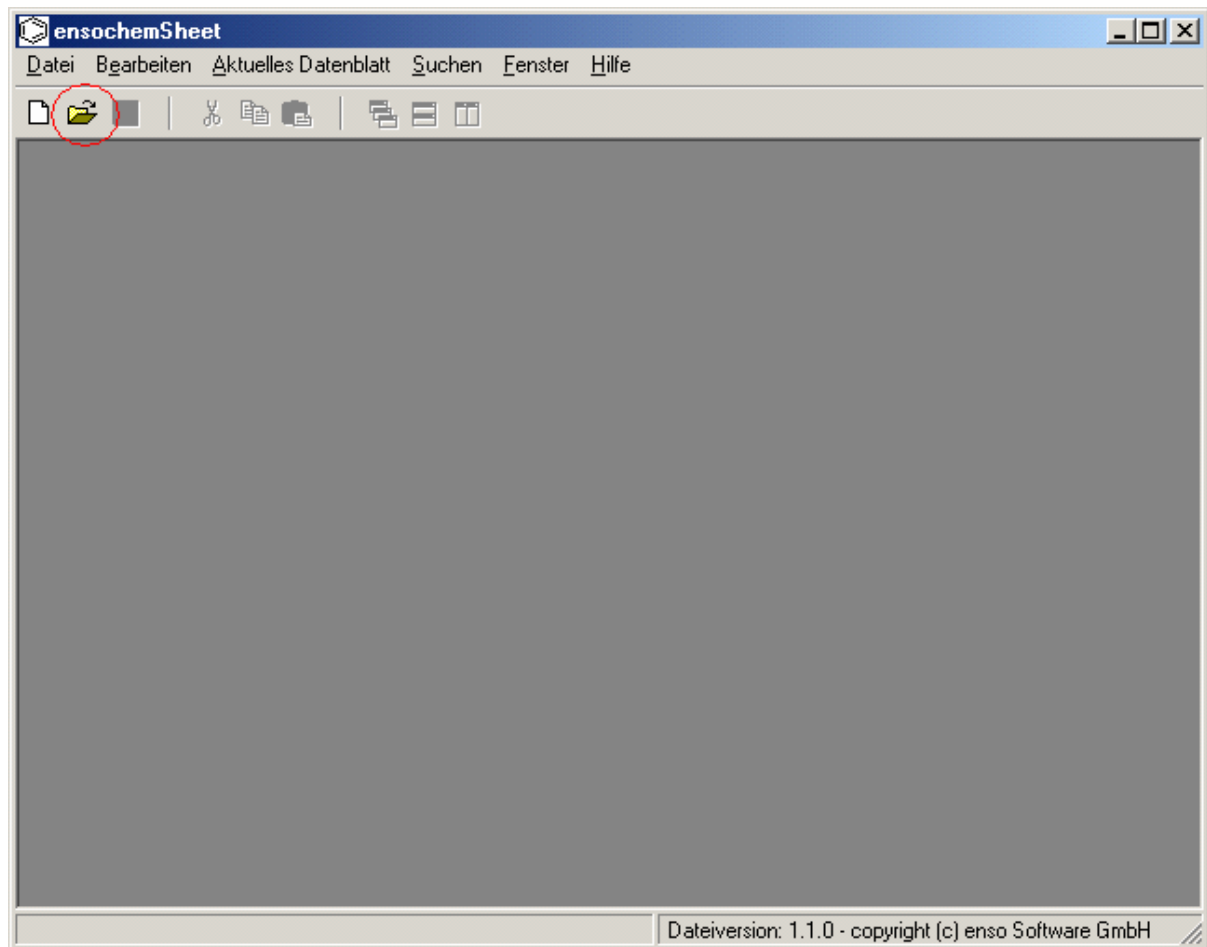
- ensoChemSearch.dll
- ensoChemViewer.dll
- ensoChemRoutines.dll

Sämtliche dieser Bibliotheken befinden sich im Unterverzeichnis „System32“ ihres Windows-Installationsverzeichnisses. Wir möchten noch einmal darauf hinweisen, dass wir von einem Löschen dieser Dateien explizit abraten.

4. Öffnen von Dateien

An dieser Stelle der Anleitung sollten sie bereits über mindestens eine SD-Datei verfügen, die sie beliebig verändern können. Zum Testen und zu Trainingszwecken empfehlen wir, keine Produktivdaten zu verwenden, sondern lediglich mit Kopien zu arbeiten.

Nach dem Start des Programms klicken sie bitte auf das „Öffnen“ Symbol in der Symbolleiste:



Wählen sie im erscheinenden Dialog die gewünschte Datei aus und klicken sie auf OK. Es erscheint ein neues Fenster, das Datenfenster, innerhalb des Hauptfensters. Während die Daten initialisiert werden, enthält es lediglich einen kurzen Informationstext. Abhängig von der Geschwindigkeit ihres Computers kann das Laden einer großen SD-Datei mehrere Minuten in Anspruch nehmen. Während die Initialisierung kann das Programm nicht beendet werden und sie können auch noch nicht mit der Datei arbeiten. Sie können jedoch bereits weitere Dateien öffnen.

Nachdem der Initialisierungsvorgang abgeschlossen ist, werden bereits die ersten Daten aus ihrer Datei angezeigt. In der Statusleiste sehen sie einen Fortschrittsbalken, der anzeigt, in welchem Status sich die Gesamtoperation befindet. Ist dieser Balken bei 100 Prozent angelangt, wurde ihre Datei vollständig geladen. Bis zu diesem Zeitpunkt können sie die sichtbaren Daten bereits ansehen und auch Veränderungen in allen

Datenfeldern vornehmen. Auf das Verändern von Daten wird dieses Handbuch in einem späteren Kapitel näher eingehen.

The screenshot shows the 'ensochemSheet' application window. The main window title is 'ensochemSheet' and the menu bar includes 'Datei', 'Bearbeiten', 'Aktuelles Datenblatt', 'Suchen', 'Fenster', and 'Hilfe'. A toolbar with various icons is visible below the menu. An embedded window titled 'C:\Projects\enso\ensochemSheet\Test Data\Kleine DB.sdf' displays a table with the following data:

		Molekül	Summenformel	Molekulargewicht	
1	✓		C ₈ H ₁₁ NO ₂ S	185,24448	7838
2	✓		C ₂ H ₆ LiN	51,01678	7848
3	✓		C ₁₈ H ₃₄ O ₄	314,46016	8736
4	✓		C ₁₀ H ₁₈ O ₄	202,24752	8746

At the bottom of the embedded window, there is a progress bar showing 67% and a button labeled 'Lade SD Datei: C:\Projec'. The status bar at the bottom of the main application window reads 'Dateiversion: 1.1.0 - copyright (c) enso Software GmbH'.

Sie können das eingebettete Fenster beliebig innerhalb des Hauptfensters verschieben und seine Größe ändern.

Das Anzeigefenster beinhaltet eine Tabelle, die standardmäßig die Spalten „Molekül“, „Summenformel“ und „Molare Masse“ beinhaltet. Je nach SD-Datei können weitere Datenfelder wie zum Beispiel ein Trivialname oder eine Identifikationsnummer enthalten sein.

Wenn sie mehrere Dateien öffnen, werden mehrere eingebettete Fenster angezeigt, die sie ebenfalls beliebig zueinander anordnen können. Bei automatischen Anordnungen helfen ihnen die Befehle im Menü „Fenster“:

The screenshot shows the 'Fenster' menu open in the 'ensochemSheet' application. The menu options are:

- Überlappend
- Horizontal anordnen
- Vertikal anordnen
- Alle verkleinern
- Alle anordnen

Below these options, two files are listed:

- 1 C:\Projects\enso\ensochemSheet\Test Data\Kleine DB.sdf
- ✓ 2 C:\Projects\enso\ensochemSheet\Test Data\SearchResult.sdf

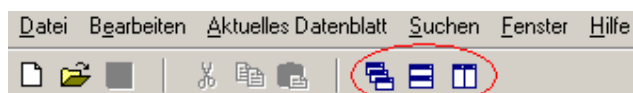
Das folgende Bild zeigt das Ergebnis der selektierten Funktion „Vertikal anordnen“ bei zwei verschiedenen geöffneten SD-Dateien:

The screenshot shows the ensochemSheet application with two windows open. Each window displays a table of chemical structures and their molecular formulas. The first window shows 8 entries, and the second shows 1208 entries. The interface includes a menu bar (Datei, Bearbeiten, Aktuelles Datenblatt, Suchen, Fenster, Hilfe) and a toolbar with various icons. The status bar at the bottom indicates the date version: 1.1.0 - copyright (c) enso Software GmbH.

		Molekül	Summenform.
1	✓		C ₁₂ H ₁₁ NO
2	✓		C ₁₁ H ₉ N
3	✓		C ₁₁ H ₁₀ N ₂
4	✓		C ₂₀ H ₂₀ ClNO ₅
5	✓		C ₄₁ H ₃₁ NO
6	✓		C ₁₆ H ₁₁ NO ₂

		Molekül	Summenform.
1	✓		C ₈ H ₁₁ NO ₂ S
2	✓		C ₂ H ₆ LiN
3	✓		C ₁₈ H ₃₄ O ₄
4	✓		C ₁₀ H ₁₈ O ₄
5	✓		C ₆ H ₁₄ O
6	✓		C ₇ H ₁₆ O ₃

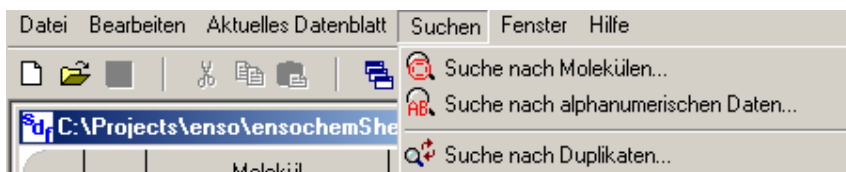
Außerdem finden sie sämtliche Anordnungsfunktionen auch in der Symbolleiste:



Die Symbole entsprechen den Symbolen im Menü.

5. Recherche

Nach dem Öffnen einer Datei können sie über diverse Recherchefunktionen in ihr suchen. Hierfür stellt das „Suchen“ Menü verschiedene Funktionen zur Verfügung:

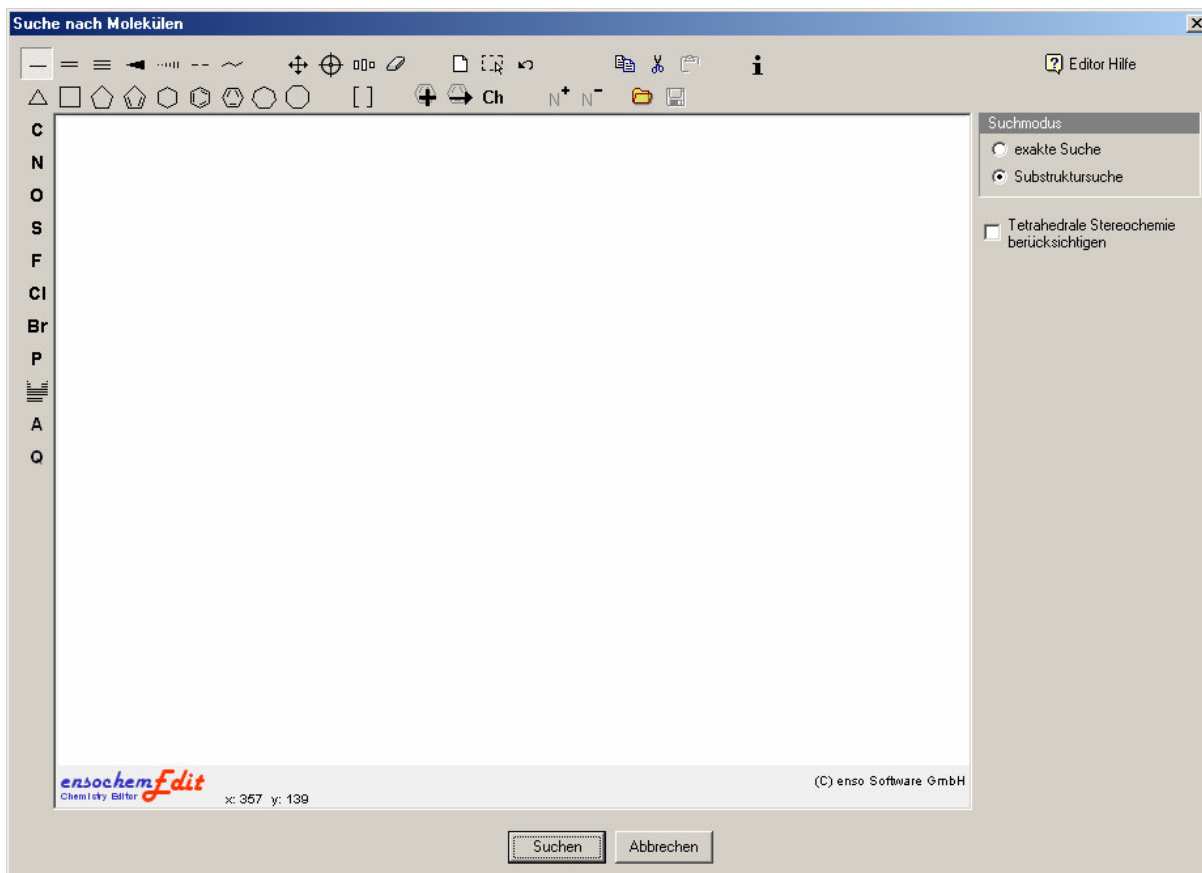


Dieses Kapitel wird im Folgenden auf alle drei Suchvarianten eingehen.

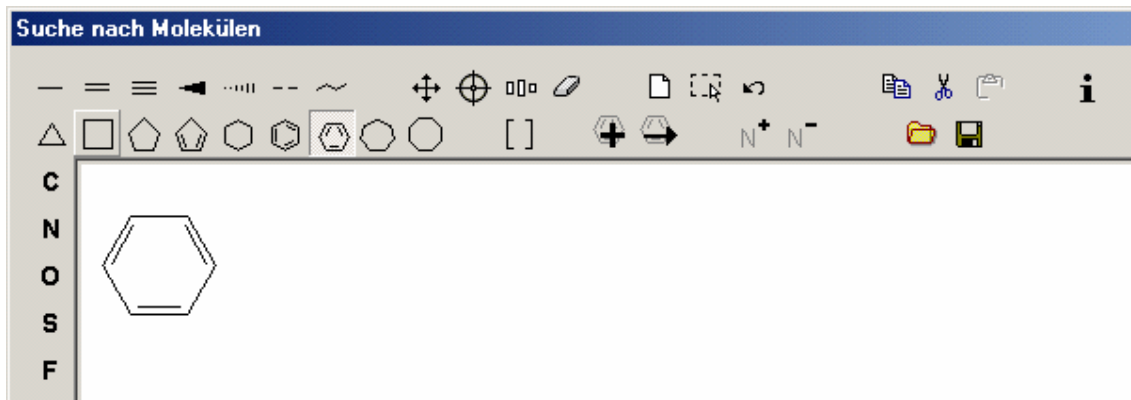
1. Suche nach Molekülen

Mit dieser Funktion können entweder eine Struktursuche oder eine Substruktursuche in der aktuellen Datei durchführen.

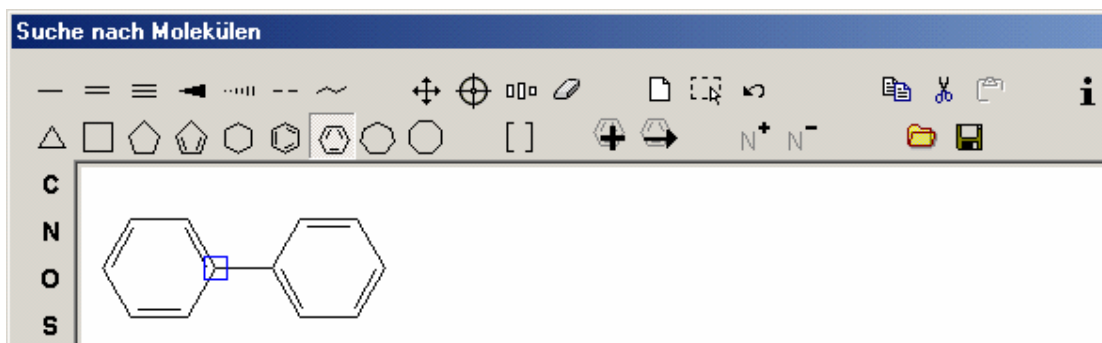
Bei einem Klick auf den Menüeintrag erscheint das folgende Fenster:



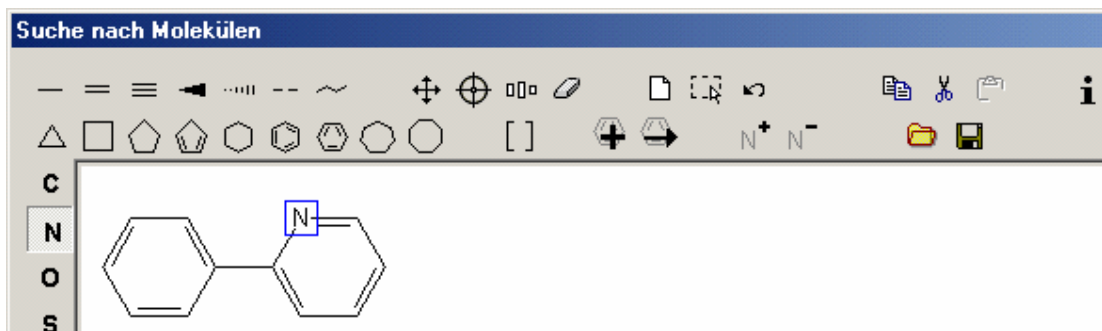
Hier können sie die gewünschte Struktur zeichnen, indem sie eine Vorlage (zum Beispiel den Benzolring) auswählen und auf eine freie Stelle auf der Zeichenfläche klicken. Die Vorlage wird an dieser Stelle eingefügt:



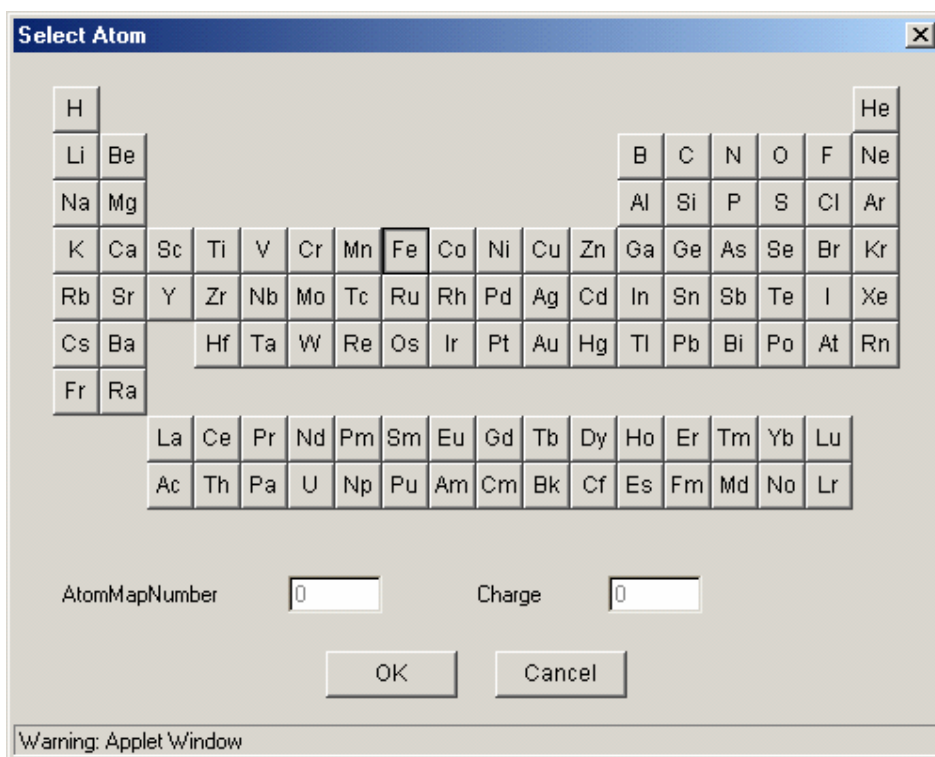
Nun können sie eine weitere Vorlage auswählen, und an die Stelle eines C-Atoms klicken, um sie dort einzufügen:



Um ein Atom einzufügen, wählen sie es einfach aus der Schalterleiste auf der linken Fensterseite aus und klicken sie entweder auf ein freies Ende einer Bindung oder auf ein anderes, bereits existierendes Atom. Dies ist auch bei nicht angezeigten C-Atomen möglich.



In der Schalterleiste werden lediglich die wichtigsten, das heißt die am meisten verwendeten, Atome angezeigt. Falls sie ein nicht in dieser Liste vorhandenes Atom einfügen möchten, klicken sie bitte auf den Knopf „Periodensystem“ (☰). Er öffnet einen weiteren Dialog, in dem sie aus einem Periodensystem das gewünschte Element auswählen können:



Klicken sie einfach auf das gewünschte Atom und dann auf „OK“. Nun können sie es genauso wie die vorbelegten Atome in ihrer Struktur verwenden.

Sobald sie ihre Struktur gezeichnet haben, wählen sie im Suchdialog bitte den gewünschten Suchmodus aus (exakte Struktur oder Substruktur). Eine Suche nach einer exakten Struktur findet nur Substanzen, deren Struktur chemisch exakt der gezeichneten Suchabfrage entspricht. Eine Substruktursuche findet alle Datensätze, deren Struktur den gezeichneten Teil enthält.

Die Auswahlfeld „Tetraedrale Stereochemie berücksichtigen“ legt fest, ob beim Molekülvergleich stereochemische Prüfmethode angewendet werden sollen. Diese Funktion kann ihre Suche genauer machen, speziell bei großen SD-Dateien aber auch zu Performanceeinbußen führen. Ist die Methode nicht aktiviert, werden alle Stereobindungen als Einfachbindungen interpretiert.

Klicken sie anschließend auf „Suchen“, um den Suchvorgang zu starten.

2. Suche nach alphanumerischen Daten

Bei einem Klick auf den Menüeintrag „Suche nach alphanumerischen Daten“ erscheint ein Dialog, in dem sie auf der linken Seite das Feld auswählen können, in dem die Suche durchgeführt werden soll. Standardmäßig stehen hierfür in jeder SD-Datei die Felder „Summenformel“ und „Molare Masse“ zur Auswahl. Für eine alphanumerische Suche kann immer nur ein Feld ausgewählt sein. ensochemSheet unterscheidet für die vordefinierten Felder automatisch zwischen einer Text- und einer Fließkommawertsuche. In dateispezifischen Feldern wird grundsätzlich eine Textsuche durchgeführt. Dementsprechend verändern sich die auf der rechten Seite angezeigten Eingabefelder und Beschriftungstexte.

Bei einer Textsuche können sie wie im unteren Bild dargestellt einen beliebigen Text eingeben und dann auswählen, an welcher Stelle der Daten gesucht werden soll. Bei einer exakten Suche muss der Text in der Datenbank exakt mit dem eingegebenen Suchtext übereinstimmen. Wenn sie die Funktion „Beginnt mit“ verwenden, muss der Text am Anfang des Datenbankwerts stehen. Danach können beliebige weitere Zeichen folgen. Mit dem Modus „an beliebiger Stelle“ legen sie fest, dass der eingegebene Text an beliebiger Stelle in den Daten vorkommen darf. Davor und danach kann eine variable Anzahl weiterer Zeichen stehen.

Die Auswahlbox „Groß-/Kleinschreibung beachten“ gibt an, ob bei der Suche zwischen Groß- und Kleinschreibung unterschieden werden soll. Ist das Feld aktiviert, so werden nur Datensätze gefunden, auch in der jeweiligen Schreibweise der Eingabe angegeben sind.

Bei einer Suche nach einem Fließkommawert stehen ihnen ebenfalls verschiedene Suchmodi zur Verfügung. Die „exakte Suche“ sucht nach Werten, die exakt dem eingegebenen Wert entsprechen. „Kleiner als“ und „Größer als“ suchen nach allen Werten, die kleiner bzw. größer als der eingegebene Wert sind. Die „Bereichssuche“ ermöglicht die Eingabe eines Suchbereichs, in dem sich die in den Daten definierte Fließkommazahl zu befinden hat, um als Treffer gefunden zu werden.

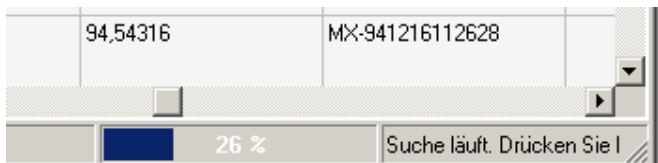
3. Suche nach Duplikaten

Nach einem Klick auf den Menüeintrag „Suche nach Duplikaten“ erscheint ein Fenster zur Auswahl des Datenfeldes, in dem nach Duplikaten gesucht werden soll. In jeder SD-Datei sind die Felder „Molekül“, „Summenformel“ und „Molare Masse“ vordefiniert. Die Auswahl „Tetraedrale Stereochemie berücksichtigen“ entspricht den bei der Struktursuche bereits angesprochenen Funktionen. Eine Auswertung erfolgt jedoch nur, wenn in der „Molekül“ Spalte gesucht wird. Klicken sie danach auf „OK“.



Nach einer beliebigen Suche

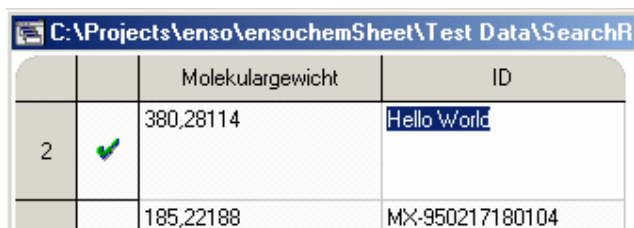
In der Statusleiste des aktuellen Datenfensters wird erneut eine Fortschrittsanzeige aufgebaut, die den jeweils aktuellen Status des Suchvorgangs anzeigt. Während die Suche läuft, können sie weiterhin normal mit dem Programm arbeiten. Falls sie die Suche abbrechen möchten, drücken sie bitte auf „Esc“.



Sobald die Suche abgeschlossen ist, wird ein weiteres Fenster mit den Suchergebnissen angezeigt. Dabei bleibt die geöffnete Datei grundsätzlich unverändert, sie können das Suchergebnis jedoch in eine neue SD-Datei abspeichern. Auf das Erstellen neuer SD-Dateien werden wir im nächsten sowie im übernächsten Kapitel näher eingehen. Eine Datei bzw. ein Fenster mit Suchergebnissen kann genauso wie eine „normale“ Datenbank als Ausgangspunkt für weitere Suchen dienen.

6. Verändern von Daten

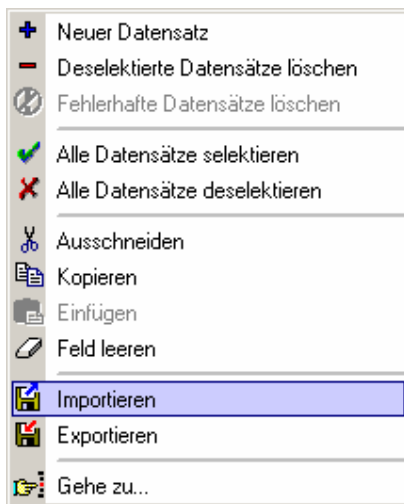
Sie können in jeder SD-Datei jedes Feld außer der Summenformel und dem Molekulargewicht verändern. Diese sind unveränderlich, da sie automatisch aus der Struktur ermittelt werden. Bei jedem anderen Feld können sie es mit einem Klick markieren und mit einem weiteren Klick bearbeiten. ensochemSheet erkennt automatisch, ob es sich um eine Struktur oder einen alphanumerischen Datensatz handelt und zeigt entweder den Dialog zur Bearbeitung einer Struktur an oder bietet ein Eingabefeld zur direkten Datenmanipulation in der Tabelle:



	Molekulargewicht	ID
2	380,28114	Hello World
	185,22188	MX-950217180104

Der Dialog zur Bearbeitung von Strukturen unterscheidet sich von dem in Kapitel 5 vorgestellten Dialog nur darin, dass sie keinen Suchmodus auswählen können. Alle weiteren Funktionen stehen uneingeschränkt zur Verfügung.

Anstatt die Struktur direkt zu bearbeiten können sie auch ein Molekül aus einer mol-Datei importieren. Öffnen sie dazu einfach das Kontextmenü, indem sie auf der rechten Maustaste auf die Spalte „Molekül“ klicken. Wählen sie dann den Eintrag „Importieren“:

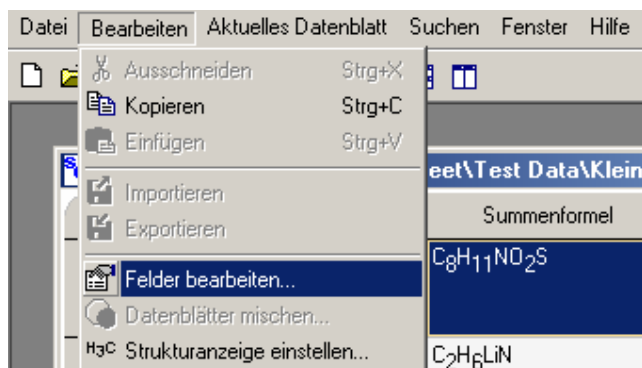


Es wird ein bereits von anderen Windows-Programmen her bekannter „Datei öffnen“ Dialog angezeigt, in dem sie die in das Datenblatt zu importierende mol-Datei auswählen können. Beachten sie jedoch, dass der vorherige Inhalt der Zelle damit überschrieben wird!

Natürlich ist es genauso einfach möglich, eine Struktur aus dem Datenblatt in eine mol-Datei zu exportieren. Klicken sie dazu auf den „Exportieren“ Eintrag im Kontextmenü und wählen sie im erscheinenden Dialog einen Dateinamen sowie einen Speicherort für ihre Datei.

Diese Funktionen sind jedoch nur für das „Molekül“ Feld verfügbar. Sie können mit ihnen keine weiteren Daten in Dateien exportieren.

Sie können auch die in einem Datenblatt verfügbaren Felder verändern, indem sie im Hauptmenü unter „Bearbeiten“ auf „Felder bearbeiten“ klicken:



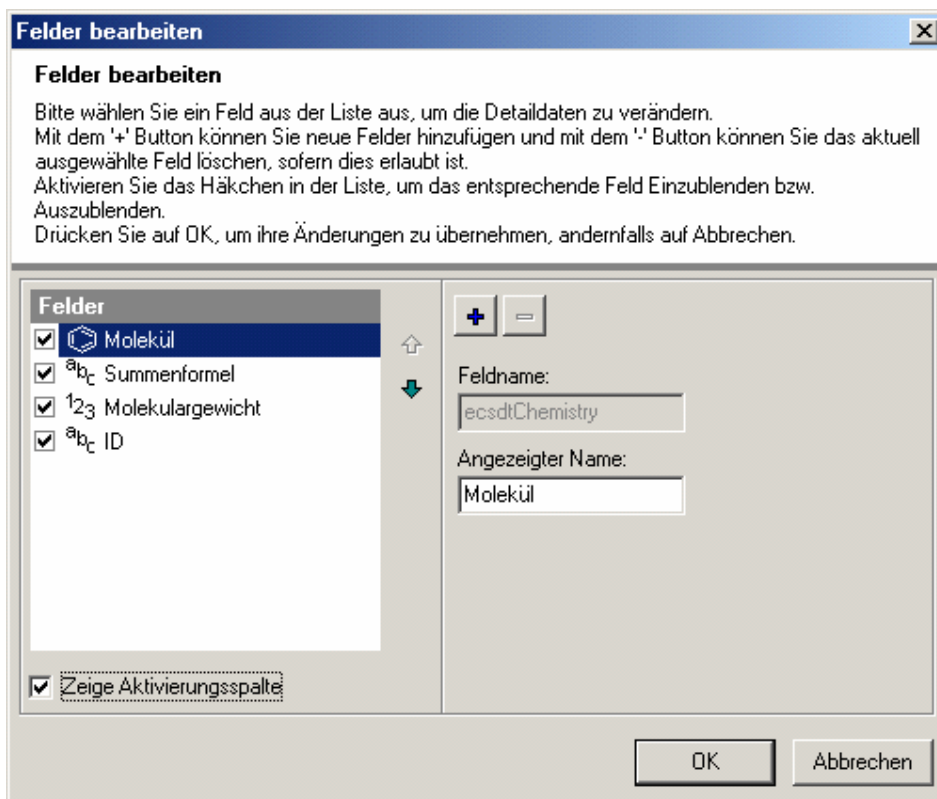
Es erscheint ein Dialog, in dem sie auf der linken Seite alle bereits registrierten Felder der SD-Datei finden. Durch das Kreuz vor dem Feldnamen können sie festlegen, ob die jeweilige Spalte angezeigt werden soll. Nur angekreuzte Spalten sind im Datenblatt sichtbar. Nach dem Öffnen einer neuen Datei sind alle Spalten angekreuzt.

Mit den grünen Pfeilen auf der rechten Seite der Liste können sie die Reihenfolge der Spalten im Datenblatt festlegen. Ein Klick auf den Pfeil nach unten weist der aktuell ausgewählten Spalte eine Position weiter hinten zu, ein Klick auf den Pfeil nach oben zieht die Spalte um eine Position weiter nach vorne.

Mit den Symbolen „Plus“ und „Minus“ auf der rechten Fensterseite können sie ein neues Feld hinzufügen oder ein bestehendes Feld löschen. Bitte beachten sie, dass die Standardfelder „Molekül“, „Molare Masse“ und „Summenformel“ nicht gelöscht werden können.

Bei einem neuen Feld können sie einen Feldnamen und einen Anzeigenamen angeben. Der Feldname gibt die Referenz an, unter der die jeweiligen Daten in der SD-Datei gespeichert werden sollen. Der Anzeigename hingegen gibt die Spaltenüberschrift für das Datenblatt an.

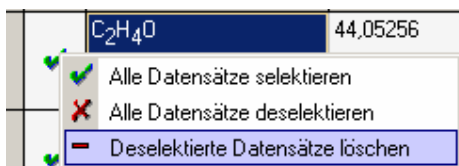
Die Auswahlbox „Zeige Aktivierungsspalte“ gibt an, ob im die erste Spalte des Datenblatts angezeigt werden soll. In dieser Spalte finden sie ein Kreuz oder ein X, je nachdem, ob der zugehörige Datensatz ausgewählt wurde oder nicht.



Sie können Datensätze aus einer SD-Datei löschen, indem sie die entsprechenden Zeilen im Datenblatt deselektieren. Dies können sie entweder durch einen Klick auf das Aktivierungskreuz in der ersten Spalte oder über das Kontextmenü tun.

2	<input checked="" type="checkbox"/>	<chem>C20H18BrN3</chem>	380,28114	Hello World
---	-------------------------------------	-------------------------	-----------	-------------

Danach wird neben dem Datensatz ein rotes X angezeigt. Wenn sie die Datei speichern (siehe weiter unten), wird dieser Datensatz nicht mehr mitgespeichert, er bleibt in der Anzeige jedoch vorhanden. Um ihn sofort aus der Anzeige zu entfernen ohne die Datei neu laden zu müssen, können sie im Kontextmenü die Funktion „Deselektierte Datensätze löschen“ auswählen:



Nachdem sie eine Suche durchgeführt, Daten verändert oder mehrere Datenblätter kombiniert haben (siehe Kapitel 8), wird ihr resultierendes Datenblatt als verändert markiert:



Sie können es speichern, indem sie entweder in der Symbolleiste auf das Diskettensymbol klicken oder im Hauptmenü unter „Datei“ den Eintrag „Speichern“ auswählen.

The screenshot shows the 'ensochemSheet' application window. The main window displays a table with search results. A secondary window titled 'Suchergebnis - 1' is overlaid on top, showing a detailed view of a search result. The main window's table has the following data:

		Molekül	Summenformel	Molekulargewicht	
2	✓	<chem>c1ccc(cc1)-c2ccccc2</chem>	C ₁₁ H ₉ N	155,1959	MX-950302

The 'Suchergebnis - 1' window shows a table with the following data:

		Molekül	Summenformel	Molekulargewicht	
1	✓	<chem>Cc1ccc(cc1)C(=O)N</chem>	C ₄₁ H ₃₁ NO	553,69098	MX-950302
2					

At the bottom of the main window, there is a status bar that reads 'Dateiversion: 1.1.0 - copyright (c) enso Software GmbH'. The status bar also shows '8 Einträge' and '1 Einträge'.

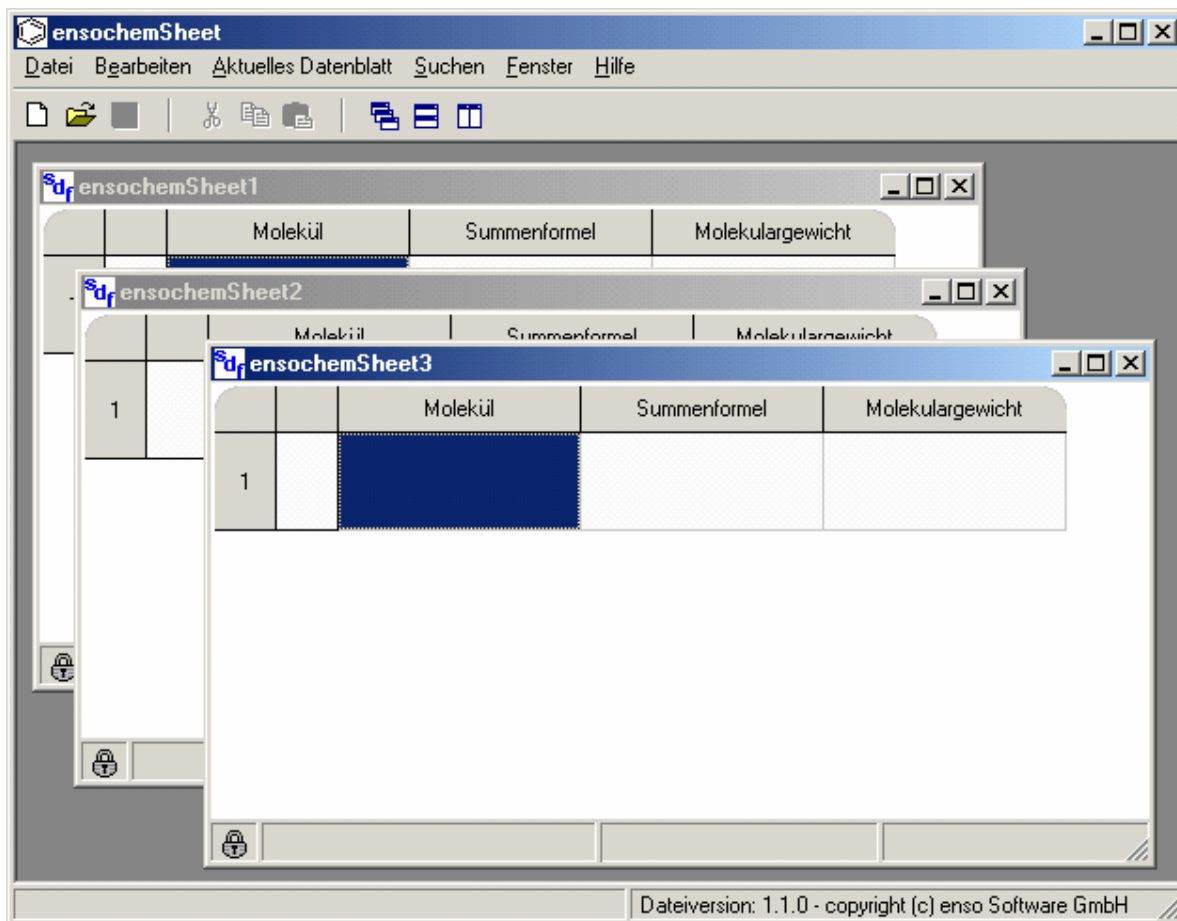
Nun müssen sie nur noch einen Namen und einen Speicherort für ihre neue Datei angeben und schon sind ihre Daten gesichert!

Das Speichern einer größeren Menge von Strukturen kann einige Minuten in Anspruch nehmen, abhängig von der Geschwindigkeit ihres Computers. Während des Speichervorgangs wird ähnlich wie bei einer Suche in der Statusleiste des aktuellen Fensters ein Fortschrittsbalken angezeigt, wie viele Daten bereits gespeichert wurden und wie viel Prozent des Gesamtvorgangs bereits abgeschlossen sind.

7. Erstellen von Dateien

Mit ensochemSheet können sie auch neue, leere SD-Dateien erstellen und in diese dann Strukturen eintragen. Klicken sie dazu entweder auf das Symbol „Neu“ in der Symbolleiste (📄) oder wählen sie im Hauptmenü unter „Datei“ den Eintrag „Neu“ aus.

ensochemSheet wird nun ein neues, leeres Datenfenster öffnen. Diese Datei hat zuerst noch keinen Namen und wird als „ensochemSheet1“ geführt. Wenn sie weitere Dateien erstellen, werden diese als „ensochemSheet2“ usw. bezeichnet.



Mit der im vorigen Kapitel vorgestellten Speichern Funktion können sie das Datenblatt als SD-Datei auf ihrer Festplatte speichern.

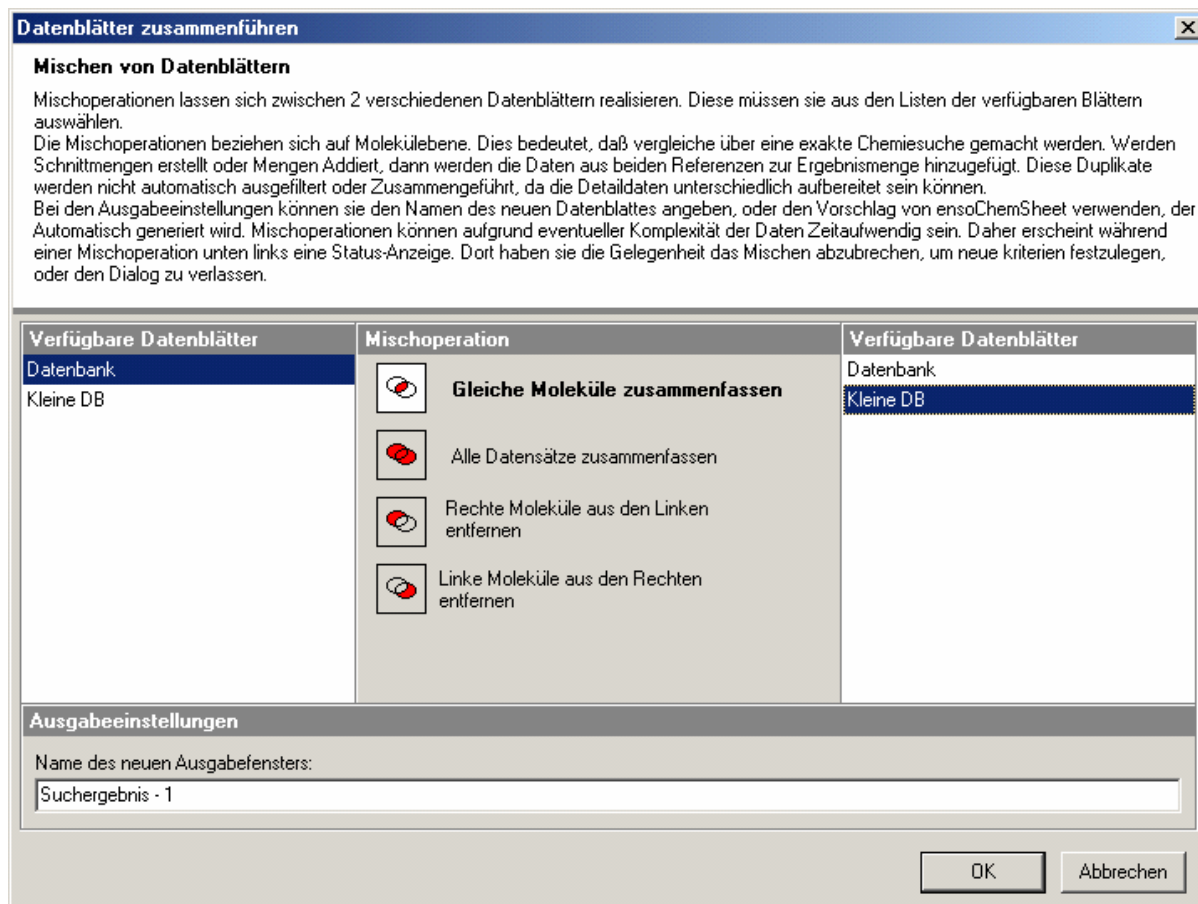
In jedem Datenblatt, egal ob sie es neu angelegt oder aus einer Datei geladen haben, wird an unterster Stelle eine Leerzeile angezeigt, die sie verwenden können, um neue Daten einzugeben. Klicken sie die Zeile einfach an und danach noch einmal direkt hinein. ensochemSheet öffnet den Struktureditor, der schon im Rahmen der Recherchefunktionen vorgestellt wurde. Hier können sie ihre Struktur zeichnen. Klicken sie danach auf „OK“, um ihre Änderungen zu übernehmen und in das aktualisierte Datenblatt zurückzukehren. Wenn sie keine Struktur eingeben, wird in der Spalte statt dessen der Text „No-Structure“ angezeigt. Auch in die SD-Datei wird ein solcher Platzhalter gespeichert.

8. Datenblätter mischen





Um die Daten von mehreren Datenblättern zu einem Datenblatt zusammenzufassen, die Schnittmenge zweier Datenblätter zu bilden oder Subtraktionen auszuführen, können sie in ensochemSheet die Funktion „Datenblätter mischen“ verwenden. Sie finden sie im Hauptmenü unter „Bearbeiten“ / „Datenblätter mischen“:



Das folgende Fenster erscheint:

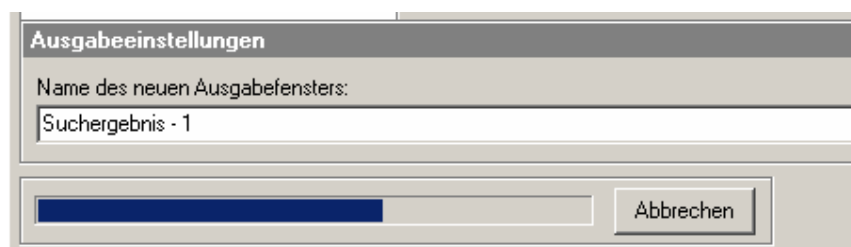


Hier können sie auswählen, welche Datenblätter sie auf welche Art mischen möchten. Bitte beachten sie, dass sie zwei verschiedene Datenblätter angeben müssen. Die Mischoperationen sind im Einzelnen:

- 
Gleiche Moleküle zusammenfassen
Diese Funktion fasst alle Moleküle mit gleicher Struktur zusammen. Die Ergebnisliste enthält die gleichen Datensätze aus beiden Listen. Moleküle, die nur in einer Liste enthalten sind, werden nicht übernommen.
- 
Alle Datensätze zusammenfassen
Diese Funktion übernimmt alle Datensätze aus beiden Listen in eine gemeinsame Ergebnisliste. Dabei muss eine Struktur nicht zwangsläufig in beiden Listen vorhanden sein.
- 
Rechte Moleküle aus den Linken entfernen
Diese Funktion entfernt alle Moleküle aus der auf der linken Seite ausgewählten Liste, die auch in der auf der rechten Seite ausgewählten Liste enthalten sind. Die Ergebnisliste enthält nur die Datensätze, die ausschließlich in der linken Liste enthalten sind.
- 
Linke Moleküle aus den Rechten entfernen
Diese Funktion entfernt alle Moleküle aus der auf der rechten Seite ausgewählten Liste, die auch in der auf der linken Seite ausgewählten Liste enthalten sind. Die Ergebnisliste enthält nur die Datensätze, die ausschließlich in der rechten Liste enthalten sind.

Nachdem sie ihre Entscheidung getroffen haben, können sie einen Namen für die Ergebnisliste angeben oder den von ensochemSheet vorgeschlagenen Namen beibehalten. Klicken sie anschließend auf „OK“, um mit der Kombination zu beginnen.

Dieser Vorgang kann einige Minuten in Anspruch nehmen, da jedes Molekül einzeln abgeglichen und in die jeweilige Liste einsortiert werden muss. Während der Vorgang ausgeführt wird, sehen sie an der Unterseite des Fensters eine Statusleiste, die den aktuellen Fortschritt anzeigt. Mit dem „Abbrechen“ Knopf können sie den Vorgang jederzeit abbrechen:



Nachdem die Kombination abgeschlossen wurde, wird der Dialog automatisch geschlossen und das Ergebnis als neues Datenblatt angezeigt. Sollte die Kombination keine Ergebnisse liefern, erscheint eine entsprechende Fehlermeldung.

