



カスタマイズ後も、データベース毎にレイアウト設定を保存できますので、使用するデータベースに応じて自動的にレイアウトを反映させることが可能です。一度好みの設定にカスタマイズしてしまえば、その後は同じ設定を毎回意識することなく使用できます。

#### ◆検索クエリの作成

検索クエリは帳票画面のカラムへ検索データを入力するだけで作成できますので、簡単にデータを絞り込むことができます。さらに、分子構造のクエリについてはSMILESの文字列を直接入力する以外にも、MOE画面の分子をSMILESとして利用することもできます。また、構造検索については、通常の部分構造検索に加えて、互変異性体検索やグラフ検索、完全一致検索やSMARTS検索なども選択できます。

このほか、検索クエリを詳細にカスタマイズできるクエリウィザードも用意しています(図2)。検索メニューから必要な処理を順次選択しながら、実行するクエリを構築していきます。クエリウィザードを利用すると、検索結果の整列や重複データの削除など、帳票画面では設定できなかったような処理も設定できるようになります。

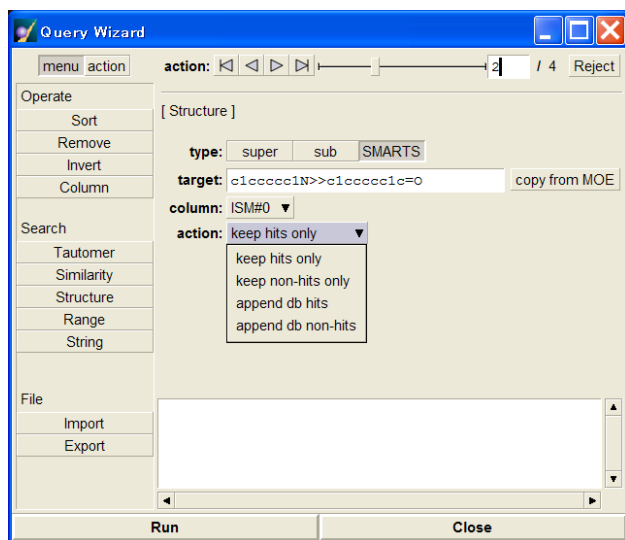


図2 クエリウィザード画面

#### ◆検索結果のダウンロード

MOE版の帳票表示ツールを使用するとMerlinシステムでの検索結果をMDB形式としてダウンロードできます。そのため、大規模なデータベースの中から絞り込んだ化合物セットを用いてQSAR解析やドッキングシミュレーションなどの解析を引

き続きMOEで続けていくことができます。

さらに、検索結果だけでなく、検索に使用したクエリや帳票レイアウトも保存しておくことができますので、ディスクスペースも効率的に使用できます。絞り込みの初期段階では検索件数も多く、検索クエリを頻繁に修正する必要があるかもしれないため、検索クエリを帳票レイアウトとともに保存しておくと便利です。

#### Web版の帳票表示ツール

弊社ではMOE以外にも、Webで利用できる帳票表示ツールも用意しています(図3)。これは、手軽に検索結果を確認したい場合などにも大変重宝します。

Web版の帳票表示ツールはMOE版と互換性を持っていますので、MOE版のクエリウィザードで書き出したMerlinの検索クエリをWeb版で再利用することができます。逆にWeb版で書き出した検索クエリをMOEの帳票表示ツールで使用することも、もちろん可能です。

Web版ツールのクエリ入力では、フリーのJAVAアプレットであるJMEや商用のChemDrawプラグインなどに対応しています。また、Web版で作成した検索クエリはMerlinシステムのバッチ処理言語であるMCL (Merlin Control Language) のスクリプトとして書き出すこともできます。この機能を利用すると、データベース検索をコマンドラインで実施し、検索結果を他のツールと連動して処理できるようになります。

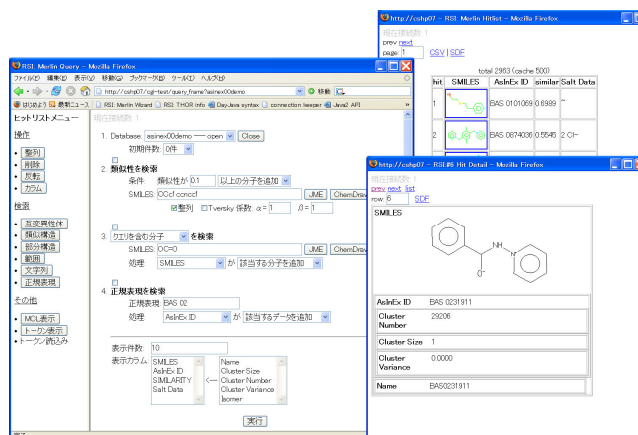


図3 Web版Merlinインターフェース