

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/19038> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Horst, Eelke van der

Title: Drugs, structures, fragments : substructure-based approaches to GPCR drug discovery and design

Date: 2012-05-31

Stellingen

behorende bij het proefschrift

Drugs, Structures, Fragments

Substructure-based approaches to GPCR drug discovery and design

1. Het toepassen van Frequent Substructure Mining levert zowel herkenbare als nieuwe GPCR ligand substructuren op (hoofdstuk 3).
2. De vergelijking van de op sequentie en substructuur gebaseerde fylogenetische classificatiebomen levert waardevolle informatie voor receptor *de-orphanisation* en te verwachten bijwerkingen van nieuwe geneesmiddelen (hoofdstuk 4).
3. De resultaten van substructuuranalyse kunnen worden gebruikt voor het vinden van nieuwe actieve verbindingen in molecuulbibliotheken (hoofdstuk 5).
4. Geautomatiseerd evolutionair geneesmiddelenontwerp biedt farmacochemici diverse uitgangspunten voor nieuwe actieve verbindingen die voldoen aan gestelde eisen (hoofdstuk 6).
5. Niet alleen de toename van rekenkracht, maar ook de ontdekking van nieuwe algoritmes maken het analyseren van steeds grotere molecuulbibliotheken mogelijk (hoofdstuk 3).
6. Methoden die complementair lijken, zoals 'ligand-based' en 'structure-based drug discovery', blijken in de praktijk elkaar juist te versterken (hoofdstuk 5 en 7; Sanders *et al.*, manuscript in preparation).

7. Door de groei in grootte en aantal van publiekelijk beschikbare databronnen zal cheminformatics uitgroeien tot een volwassen discipline zoals dat ook met de bioinformatica gebeurd is.
8. De exponentiële toename van publicaties, data en soorten informatie maakt het gebruik van semantische systemen noodzakelijk.
9. De productiviteitsparadox: hoe meer tijd je besteedt aan productivity tools, hoe minder productief je bent.
10. Als je van onderzoek houdt word je journalist; voor schrijven word je wetenschapper.
11. Ondanks de opkomst van de 24 uren economie en de mogelijkheid om *remote desktop* te werken, zijn tijd en plaats niet voor alle waarnemers relatief.
12. Moleculen zijn net schilderijen: waar de één een Kandinsky ziet, ontwaart de ander een kitscherig tafellaken vol koffieringen.

Eelke van der Horst

Leiden, 31 mei 2012