To explore drug space smarter

Artificial intelligence in drug design for

G protein-coupled receptors

Proefschrift

ter verkrijging van

de graad van doctor aan de Universiteit Leiden,

op gezag van rector magnificus prof.dr.ir. H. Bijl,

volgens besluit van het college voor promoties

te verdedigen op 15 februari 2022

klokke 10:00 uur

door

Xuhan Liu

刘 许晗

geboren te Henan, China

in 1989

Promotores:

Prof. dr. Adriaan P. IJzerman

Prof. dr. Gerard J. P. van Westen

Prof. dr. Kai Ye

Promotiecommissie:

Prof. dr. Hubertus Irth

Prof. dr. Joke Bouwstra

Prof. dr. Mario van der Stelt

Prof. dr. Iwan J.P. de Esch (Vrije Universiteit Amsterdam)

Dr. Francesca Grisoni (Technische Universiteit Eindhoven)

Thesis lay-out & Cover design: Xuhan Liu

Printing: PrintSupport4U

ISBN: 978-94-92597-94-6

This research is financially supported by the China Scholarship Council (CSC), CSC No. 201709110143

The research described in this thesis was performed at the Division of Drug Discovery and Safety of the Leiden Academic Centre for Drug Research (LACDR), Leiden University (Leiden, The Netherlands).

Content