

# A U S H A N G

---

## FREIE UNIVERSITÄT BERLIN

Fachbereich Mathematik und Informatik

Promotionsbüro, Arnimallee 14, 14195 Berlin

# DISPUTATION

**Freitag, 14. Februar 2025, 10:00 Uhr**

[WebEx](#)

**Disputation über die Doktorarbeit von**

**Tuan Le**

**Thema der Dissertation:**

**Graph Representation Learning of Molecules for de novo Drug Development**

**Thema der Disputation:**

**Structure-based Drug Design using 3D Equivariant Diffusion Model**

Die Arbeit wurde unter der Betreuung von **Prof. Dr. F. Noé** durchgeführt.

Abstract: Advances in deep learning have facilitated the optimization and design of molecules to accelerate drug discovery for tasks like property prediction, retrosynthesis planning or structure-based ligand design.

This talk explores graph representation learning in pharmaceutical research, with a focus on de novo small molecule design.

The first topic introduces group-equivariant architectures for processing 3D molecular data and its employment for molecule generation using diffusion models.

The second topic discusses targeted ligand design guided by protein context and user-defined properties addressing current limitations. Strategies to overcome data limitations and enhance model generalization will also be discussed.

Die Disputation besteht aus dem o. g. Vortrag, danach der Vorstellung der Dissertation einschließlich jeweils anschließenden Aussprachen.

**Interessierte werden hiermit herzlich eingeladen**

Der Vorsitzende der Promotionskommission  
Prof. Dr. F. Noé