

# Diabetes LigandsDatabase: Inibidores Naturais em DrugDiscovery

Arthur B. Taquesa<sup>a</sup>, Nadine Évora DaCruza<sup>a</sup>, Eduardo Carvalho Nunes<sup>c</sup>, Carlos Seiti Hurtado Shiraishi<sup>a,b</sup>, Rui Miguel Vaz de Abreu<sup>a</sup>

a CIMO, LA SusTEC, Instituto Politécnico de Bragança, Campus de Santa Apolónia, 5300-253 Bragança, Portugal.

bNutrition and Bromatology Group, Universidad de Vigo, Department of Analytical Chemistry and Food Science, Faculty of Sciences, E-32004 Ourense, Spain;

Faculty of Engineering, University of Trás-os-Montes and Alto Douro 5000-801, Vila Real, Portugal

## INTRODUCTION & AIM

- A descoberta de inibidores antidiabéticos de origem natural tem se beneficiado crescentemente do uso de ferramentas computacionais avançadas, que aceleram e tornam mais eficiente o processo de drug discovery.
- Bancos de dados amplamente utilizados, como o COCONUT Database e o ZINCNP, têm contribuído de forma relevante para este campo; no entanto, apresentam limitações críticas, especialmente a ausência de informações sobre valores de inibição, como  $EC_{50}$ , fundamentais para avaliar a eficácia bioativa de compostos candidatos.
- A falta desses parâmetros dificulta a priorização racional de moléculas, impactando diretamente o tempo, os custos e a eficiência das etapas subsequentes de triagem experimental.



## RESULTS & DISCUSSION

a lacuna existente em bases de dados sobre moléculas naturais com potencial antidiabético, reunindo de forma organizada informações estruturais, funcionais e bioativas essenciais para triagem virtual, modelagem molecular e reposicionamento de fármacos.

Um repositório único e acessível consolida estes dados. A Plataforma acelera projetos em saúde pública, aumenta a eficiência de pipelines de drug discovery e amplia a participação de grupos de pesquisa, inclusive aqueles com recursos limitados.

O DLD fundamentado nos princípios FAIR, garante que os dados sejam localizáveis, acessíveis, interoperáveis e reutilizáveis, oferecendo ainda interfaces intuitivas que democratizam o acesso e fortalecem a integração entre gestão de dados, biotecnologia e inovação em saúde.

## AVAILABLE PROTEIN STRUCTURES

Available Protein Structures
Showing 29 of 29 proteins
Name

**17β-HSD**

17β-Hydroxysteroid Dehydrogenase

Enzyme

Enzyme involved in steroid hormone metabolism:  
target for diabetes therapy

**Function:** Steroid metabolism

PDB CODE	1FDT	
INHIBITOR	NAP	
ACTIVE SITE		
X	Y	Z
37.343	-2.887	32.930

Resolution: 2.1 Å      Size: 2.8 MB

[Download PDB](#)

**SGLT-2**

Sodium-Glucose Cotransporter 2 (SGLT-2)

Transporter

Transporter responsible for renal glucose reabsorption; target of SGLT-2 inhibitors

**Function:** Renal glucose reabsorption

PDB CODE	7VSI	
INHIBITOR	TR3	
ACTIVE SITE		
X	Y	Z
35.710	49.539	47.565

Resolution: 2.99 Å      Size: 4.1 MB

[Download PDB](#)

**α-Amylase**

Alpha-Amylase

Enzyme

Digestive enzyme that breaks down starch; target to control carbohydrate absorption

**Function:** Starch digestion

PDB CODE	α-AMILASE	
INHIBITOR	2QV4	
ACTIVE SITE		
X	Y	Z
14.060	52.489	26.313

Resolution: 1.8 Å      Size: 3.5 MB

[Download PDB](#)

## CONCLUSION

## PROTEIN TARGET DATABASE



**Protein Target Database**
PTD

Protein Structures for Molecular Docking

[About Us](#)

29 Available Structures  
Database Updated


Search Structures

Protein Name

Mechanism of Action

All mechanisms

Search