

Diabetes LigandsDatabase: Inibidores Naturais em DrugDiscovery

Arthur B. Taquesa, Nadine Évora Da Cruz a, Eduardo Carvalho Nunes c, Carlos Seiti Hurtado Shiraishi a, b, Rui Miguel Vaz de Abreu a

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

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

c Department 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 EC₅₀, 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		
17 β -HSD 17 β -Hydroxysteroid Dehydrogenase	Enzyme	
Enzyme involved in steroid hormone metabolism; target for diabetes therapy		
PDB CODE INHIBITOR ACTIVE SITE	1FDT NAP X: 37.343, Y: -2.887, Z: 32.930	
Resolution: 2.1 Å	Size: 2.8 MB	Download PDB
SGLT-2 Sodium-Glucose Cotransporter 2 (SGLT-2)	Transport	
Transporter responsible for renal glucose reabsorption; target of SGLT-2 inhibitors		
PDB CODE INHIBITOR ACTIVE SITE	7VSI 7R3 X: 35.710, Y: 49.539, Z: 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 INHIBITOR ACTIVE SITE	2QV4 X: 14.060, Y: 52.489, Z: 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

Search Structures
Protein Name: e.g. DPP-4, α -amylase...
Mechanism of Action: All mechanisms
Search

About Us
29 Available Structures
Database Updated