



Diabetes Ligands Database: Inibidores Naturais em Drug Discovery

Arthur B. Taques ^a, 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, Polytechnic Institute of Bragança, Bragança, 5300- 253, Portugal.

^b University of Vigo, Nutrition and Bromatology Group, Instituto de Agroecoloxía e Alimentación (IAA) – CITEXVI, Vigo, 36310, España.

^c Universidade de Trás-os-Montes e Alto Douro, 5000-801, Vila Real, Portugal

Resumo

A identificação de inibidores antidiabéticos de origem natural exige cada vez mais o apoio de recursos computacionais de alto desempenho no processo de drug discovery. Bancos de dados como o *COCONUT* Database (1) e o *ZINCNP* (2) têm contribuído nesse cenário, porém apresentam limitações importantes, como a ausência de informações sobre valores de inibição (EC_{50}). Esses parâmetros são cruciais para avaliar a eficácia dos compostos e orientar a priorização de candidatos promissores, impactando diretamente a redução de tempo e custos em triagens experimentais. Diante dessa lacuna, torna-se de suma importância a criação do *Diabetes Ligands Database*, concebido para reunir, de forma organizada e acessível, dados estruturais, funcionais e bioativos de moléculas naturais com potencial antidiabético. A base contempla inibidores associados a no contexto do diabetes, oferecendo uma cobertura inédita e sistematizada que amplia as possibilidades de triagem virtual e reposicionamento de fármacos. Ao consolidar esse tipo de informação, a plataforma pode acelerar o avanço de projetos em saúde pública e ampliar a capacidade de grupos de pesquisa, inclusive em países com recursos limitados, de participar ativamente no cenário global de inovação. A proposta do DLD incorpora essa visão ao estruturar um repositório de dados FAIR (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable), garantindo não apenas a valorização da informação científica produzida, mas também a democratização do acesso. Além de fornecer dados de alta

qualidade, a plataforma pretende disponibilizar interfaces intuitivas, acessíveis inclusive a investigadores com baixo conhecimento computacional, facilitando a exploração da base por diferentes perfis de utilizadores. Dessa forma, busca-se acelerar o processo de drug discovery, promover maior equidade no acesso a recursos científicos e fortalecer a articulação entre gestão de dados, inovação em biotecnologia e saúde pública, maximizando o impacto científico e social dos dados de investigação.

Palavras chaves: Diabetes; Moléculas naturais, Drug Discovery, Bancos de dados, FAIR data.

Designação do projeto/infraestrutura/iniciativa

Diabetes Ligands Database (DLD): Plataforma FAIR de moléculas naturais com potencial antidiabético.

Público-alvo

O projeto destina-se a investigadores em biotecnologia, bioinformática e farmacologia; gestores de ciência e inovação em saúde pública; gestores de repositórios e data centers; bibliotecários e curadores de dados científicos; especialistas em informática aplicada às ciências da vida; bem como à indústria farmacêutica e de biotecnologia interessada em processos de drug discovery.

Ligações web úteis

1. Venkata Chandrasekhar, Kohulan Rajan, Sri Ram Sagar Kanakam, Nisha Sharma, Viktor Weißenborn, Jonas Schaub, Christoph Steinbeck, COCONUT 2.0: a comprehensive overhaul and curation of the collection of open natural products database, Nucleic Acids Research, Volume 53, Issue D1, 6 January 2025, Pages D634–D643, <https://doi.org/10.1093/nar/gkae1063>

2. Irwin JJ, Shoichet BK. ZINC--a free database of commercially available compounds for virtual screening. J Chem Inf Model. 2005 Jan-Feb;45(1):177-82. doi: 10.1021/ci049714+. PMID: 15667143; PMCID: PMC1360656.