



## Diabetes Ligands Database: Inibidores Naturais em Drug Discovery

Arthur B. Taques <sup>a</sup>, Nadine Évora Da Cruz <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>

<sup>a</sup> CIMO, LA SusTEC, Polytechnic Institute of Bragança, Bragança, 5300- 253, Portugal.

<sup>b</sup> University of Vigo, Nutrition and Bromatology Group, Instituto de Agroecología e Alimentación (IAA) – CITE XVI, Vigo, 36310, España.

<sup>c</sup> 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.