

A Study Based on Binary Fingerprints for Flavone Analogues as CDK2/Cyclin A Inhibitors. A Two Dimensional QSAR Approach

Aravinda PAI & B.S. JAYASHREE *

*Department of Pharmaceutical Chemistry, Manipal College of Pharmaceutical Sciences,
Manipal Academy of Higher Education, Manipal-576104, Karnataka, India*

SUMMARY. In the present study, we have applied seven available similarity based binary fingerprints as implemented in the new cheminformatics package Canvas, on a validated dataset for the test compounds selectively inhibiting CDK2/Cyclin A. The fingerprint methods used were: Linear, Dendritic, Radial, MOLPRINT2D, Pairwise, Triplet, and Torsion. Out of the seven fingerprints used, the fingerprint dendritic resulted in a statistically significant 2D QSAR model with regression coefficient (r^2) value of 0.9284 and cross validation coefficient (q^2) value of 0.9865. The model could be used to design potent inhibitors against the target CDK2/Cyclin A as a goal towards development of novel anticancer agents.

RESUMEN. En el presente estudio hemos aplicado siete huellas dactilares binarias basadas en la similitud disponibles implementadas en el nuevo paquete de quimioinformática Canvas, en un conjunto de datos validado para los compuestos de prueba que inhiben selectivamente CDK2/ciclina A. Los métodos de huellas dactilares utilizados fueron: lineal, dendrítico, radial, MOLPRINT2D, pairwise, triplete y torsión. De las siete huellas dactilares utilizadas, la huella dactilar resultó en un modelo QSAR 2D estadísticamente significativo con un valor de coeficiente de regresión (r^2) de 0.9284 y un valor de coeficiente de validación cruzada (q^2) de 0.9865. El modelo podría usarse para diseñar inhibidores potentes contra la CDK2/ciclina A como objetivo para el desarrollo de nuevos agentes anticancerígenos.

KEY WORDS: binary, fingerprint, QSAR, radial.

* Author to whom correspondence should be addressed. *E-mail:* jayashree.sy@gmail.com