



e-BIOINFORMATICS MAGAZINE

B

I

M

ISSUE: 2
2012 - 2013

About the DBI - BIM

The *e*-magazine delivers simple, concise, and relevant information of the happenings at Department of Bioinformatics. This periodical is published annually as per the academic calendar.

The magazine is sent free of charge to all alumni of DBI, as well as to faculty, staff, and students.

The contents of the magazine ©2012-2013 by the DBI, Alagappa University.

DBI-BIM

EDITOR IN CHIEF

Mr. Kh. Dhanachandran Singh

EDITORS

Mr. P. Kirubakaran

Mr. C. Selvaraj

Mr. K. Gopinath

EDITORIAL BOARD

Mr. C. Sathish Kumar

Mr. S. Rajamanikandan

Mr. T. Sindhu

Mr. D. Sasikala

Mr. V. Suryanarayanan

Mr. D. Prabhu

Mr. R. Santhosh

Mr. Sanjay Kumar Choubey

TECHNICAL SUPPORT

Ms. M. Madhumathi

Ms. K. Lekharani

Ms. S. Latha

Ms. T. Divya

Ms. PK. Malarvizhi

Ms. M. Meenatchi

Ms. G. Nagalakshmi

Ms. D. Nandhini

Ms. T.Raja rajeshwari

ADVISORY COMMITTEE

Dr. J. Jeyakanthan

Professor & Head

Dr. Sanjeev Kumar Singh

Associate Professor

Dr. P. Srinivasan

Assistant Professor

Dr. M. Karthikeyan

Assistant Professor

Contents	Pg no
Message from the Chief Editor	5
Department Events	6-10
Conferences	11-16
Projects	16-17
Consultancy Services	18
Student's Achievements	19
Publications	20-23
Journal Club	23-26
Press release	27-30

Message from the Chief Editor



Dear all,

It gives me immense joy and satisfaction to finally introduce our very own Department e-magazine “e-BIM”. A lot of effort has gone into the making of this issue. I hope you enjoy reading the magazine. The best thing about this issue is that it represents the department events made during the previous academic year. This magazine provides a platform for students and staff to share information, spread the latest techniques in bioinformatics knowledge and cultivate right ways that will equip all of us to stay competent in our respective fields of study and research. The magazine will always be an event-filled journal, chronicling another exciting year that will be cherished by our department students, research scholars and staffs in the years to come.

Congratulations to the editorial team for bringing out a quality magazine. Thanks for providing the readers with inspirational articles, vibrant drawings, mind-scintillating poems and updates of current trends. We look forward to receiving many more magazines that give us information and interesting articles so that we can enrich our Knowledge. You are doing a great job.... Keep it up!

Reading this magazine would definitely be an inspiration and motivation for all students and staff to contribute even more to the forthcoming issues

Mr. Kh Dhanachandran Singh
Chief Editor

Department Events

Teacher's Day

On **September 5th** 2012 Dr. Sarvapalli Radhakrishnan birthday was celebrated in the Department of Bioinformatics. His footsteps, the teachers follow, are being proved on Teacher's Day. The chief guests for the event were the faculty members and staffs of our Department (i.e) Dr. J. Jeyakanthan *Professor & Head*, Dr. Sanjeev Kumar Singh *Associate Professor*, Dr. M. Karthikeyan *Assistant Professor*, Dr. P. Srinivasan *Assistant Professor*, Mrs Rathipriya *Junior cum typist* and Mr. Arumugam *Office Assistant*. The performance of students on stage exclusively for teachers was a memorable one. Cake cutting ceremony was carried out by faculty members. Followed by the cultural programme, games like musical chair and busting the balloons were conducted for the teachers by the students. All the faculty members were then presented with a memento as a token of appreciation for their hard work and constructive support. Then the faculty gave speeches and shared their views and experiences with the audience. Thus overall the event was a great success.

Village Placement and Adoption Programme (VPP or VAP)

VPP and VAP have been incorporated into the curriculum since 2005 to provide an exposure to students on issues confronting villages and meanwhile to identify the demands and requirements of the village community. In the process, students take stride to educate, enlighten, empower and motivate the people to improve their knowledge and change their attitude towards a quality based living.

In connection to, the final years M.SC students participated in three-day VPP program to carry out activities such as cleaning villages, desilting village tanks, planting saplings and various awareness programmes focusing on village development.



VPP visit to chockalingapudhur 2013 by the M.SC students

Career Guidance

Phase-I & II on 28th – 29th October, 2012 and 29th – 31st October, 2012



M.SC students participated in the Career guidance & soft skill training programme at Alagappa University

5th National Symposium cum Workshop on “Recent Trends in Structural Bioinformatics and Computer Aided Drug Design (SBCADD-2013)

SBCADD’2013 is a Symposium cum Workshop which focuses on enriching the growing scientific community consisting of budding young minds acting as a driving force in their research and also amalgamates researchers from all over india and outside to strengthen the connections in all fields of Bioinformatics. This symposium cum workshop is being organized from 19th -22nd Febuary’ 2013. This four day event will feature on planery lectures, Poster presentation and workshop to a number of scientists and academicians dealing with basic science and allied parallel research. The main aim is to share the ideas and knowledge about the molecule, its interaction with the drug and awareness on new drug development. The occasion was glorified by the Vice-Chancellor Prof. S. Sudalaimuthu, Dr. K. Sivakumar Regional Director,

Anna University, Madurai, Dr. D. Velmurugan, Professor & Head, CAS in Crystallography & Biophysics, University of Madras.

Fifteen Eminent Scientists and experts from various premier institutes such as IISc Bangalore, IIT Delhi, IIT Madras, C.S.J.M University Kanpur, CLRI Chennai, AIIMS New Delhi, VIT Vellore, Pondicherry University, Anna University and Schrodinger U.S.A delivered talks that are thought-provoking and were of much use to young budding scientists. Totally 119 participants gained hands-on training sessions provided by Application Scientists from Schrodinger, USA in many areas of Structural Bioinformatics, Computer Aided Drug Design Problem solving sessions along with demonstrations incorporated as a part of the Symposium cum Workshop will familiarize the participants with molecular modeling and drug discovery tools. SBCADD'2013 would provide an excellent opportunity to keep up with the cutting-edge research and also serve as a platform for delivering new lead molecules more quickly at lower cost through *in silico* methods facilitate target identification, structure prediction and lead/drug discovery.







Memorable moments at SBCADD 2013

Conference Attended

DBT Sponsored National Conference on High Throughput Technologies in Bioinformatics” HT2B’12

Dr. J. Jeyakanthan delivered a lecture on High Throughput X-Ray Crystallography at “DBT Sponsored National Conference on High Throughput Technologies in Bioinformatics” HT2B’12 Department of Bioinformatics, Karunya University, Coimbatore during 24th August 2012.

Refresher Course on Physics

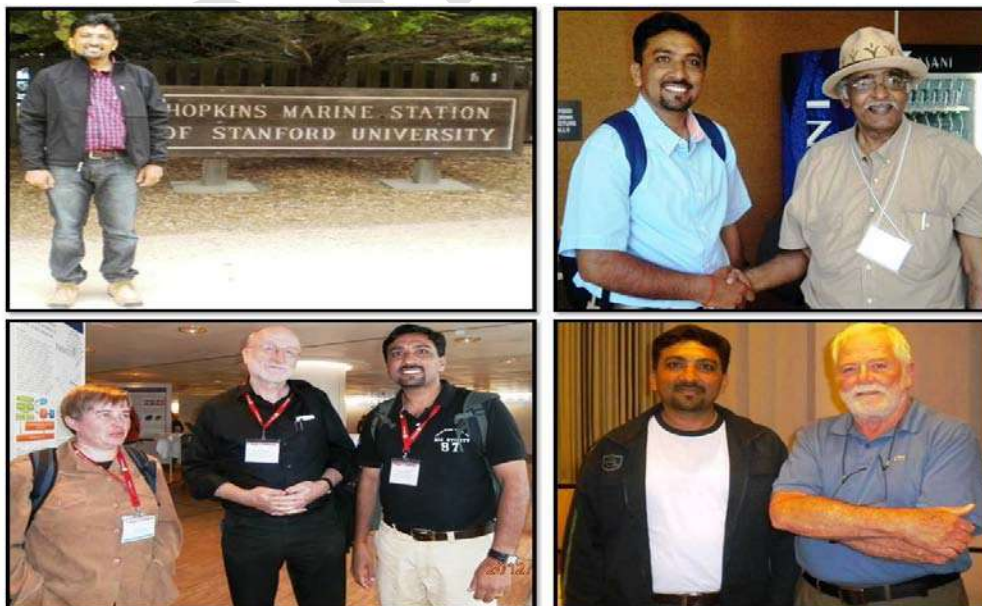
Dr. J. Jeyakanthan delivered a lecture on topic High Throughput X-ray Crystallography at Refresher course on Physics, CAS in Crystallography and Biophysics, University of Madras during 8th September 2012.

Biochemsitry Exhibition BYOKEM”X” BIT

Dr. J. Jeyakanthan delivered a lecture on High Throughput X-ray Crystallography at Biochemsitry Exhibition BYOKEM”X” BIT Sri Saradha Niketan College for Women, Amaravathipudur during September 9th 2012.

11th European Conference on Computational Biology

Dr. Sanjeev Kumar Singh attended 11th European Conference on Computational Biology at Swiss Institute of Bioinformatics, University of Basel, Switzerland during 9th -12th September 2012.





Dr. Sanjeev Kumar Singh at European Conference on Computational biology (ECCB-2012) Switzerland from 9-12 September

National Conference on Aquatic Animal Health and Management (NCAAHM-2012)

Dr. P. Srinivasan attended National Conference on Aquatic Animal Health and Management (NCAAHM-2012) at The Centre of Advanced study in Marine Biology, Faculty of Marine Sciences, Annamalai University, Parangipettai during 14th -15th September 2012.

National Seminar on Emerging Trends in Structural Biology and Bioinformatics

Dr. J. Jeyakanthan delivered a lecture on High Throughput X-ray Crystallography at National Seminar on Emerging Trends in Structural Biology and Bioinformatics Bioinformatics Centre, Pondicherry University during 26th -28th September 2012.

International Conference on Bioinformatics (InCoB-2012)

Mr. Kh. Dhanachandra Singh Research Scholar under the guidance of Dr. M.Karthikeyan attended and presented poster at International Conference on Bioinformatics (InCoB-2012), Asia-Pacific Bioinformatics Network, Thailand during 3rd -5th October, 2012.

41st National Seminar on Crystallography, 2012.

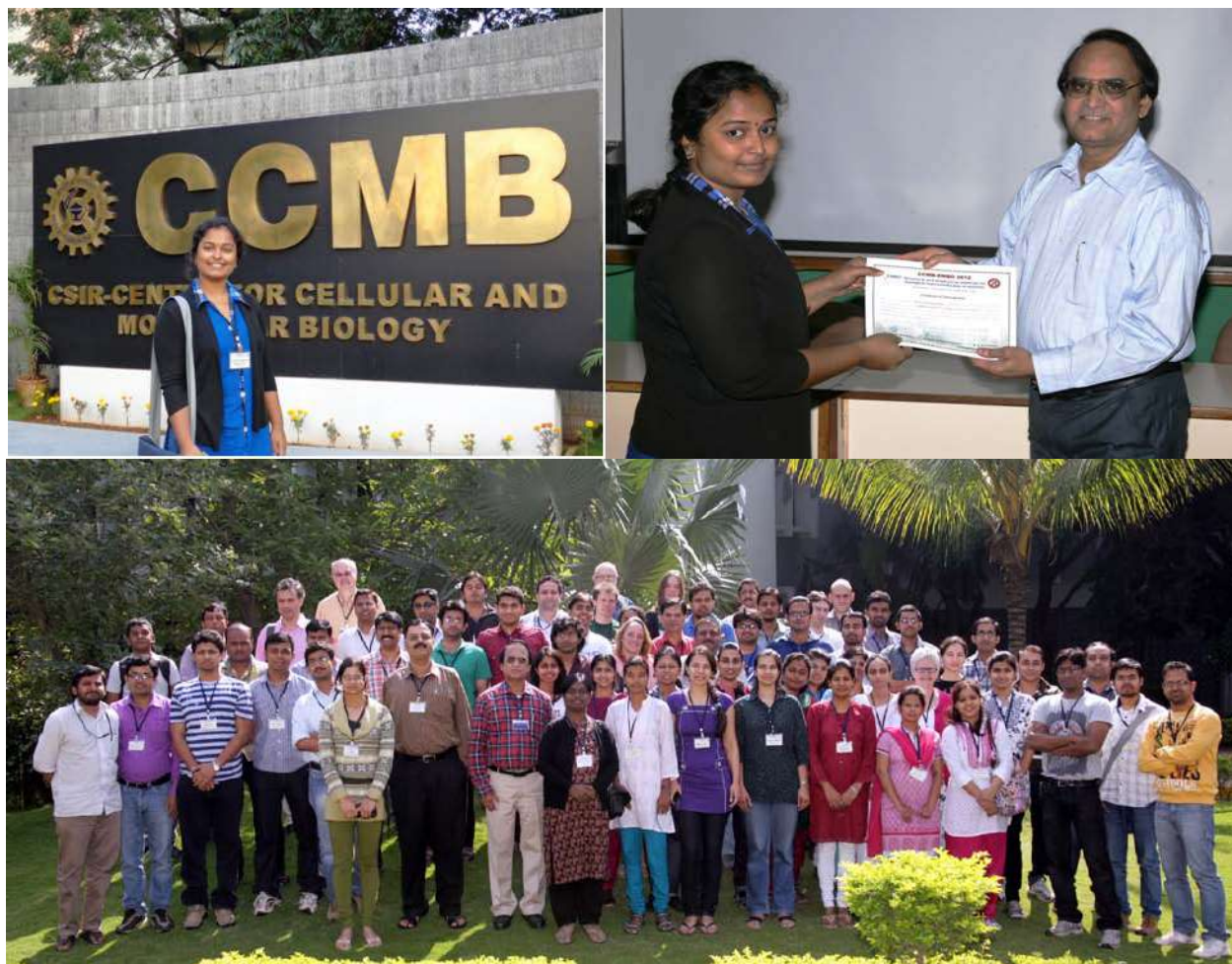
Mr. M. Nachiappan and Mr. D. Prabhu had attended the 41st National seminar on Crystallography at CAS in Crystallography and Biophysics, University of Madras during 8th - 10th October 2012.

International Symposium on Protein Folding and Dynamics

Ms. RS. Rethana Malliga under the guidance of Dr. J. Jeyakanthan attended International Symposium on Protein Folding and Dynamics at NCBS, GKVK Bellary, Bangalore during October 15th -17th 2012.

EMBO Global Exchange course on “Structural and Biophysical Methods for Biological Macromolecules in solution

Ms. K. Sureka Research Scholar under the guidance of Dr. J. Jeyakanthan attended the EMBO Global Exchange course on “Structural and Biophysical Methods for Biological Macromolecules in solution” at CSIR-Centre for Cellular and Molecular Biology (CCMB), Hyderabad, during 29th Nov-6th Dec 2012.





Miss. K. Sureka Research Scholar attended the EMBO Global Exchange course at CCMB, Hyderabad during 29th Nov-6th Dec 2012.

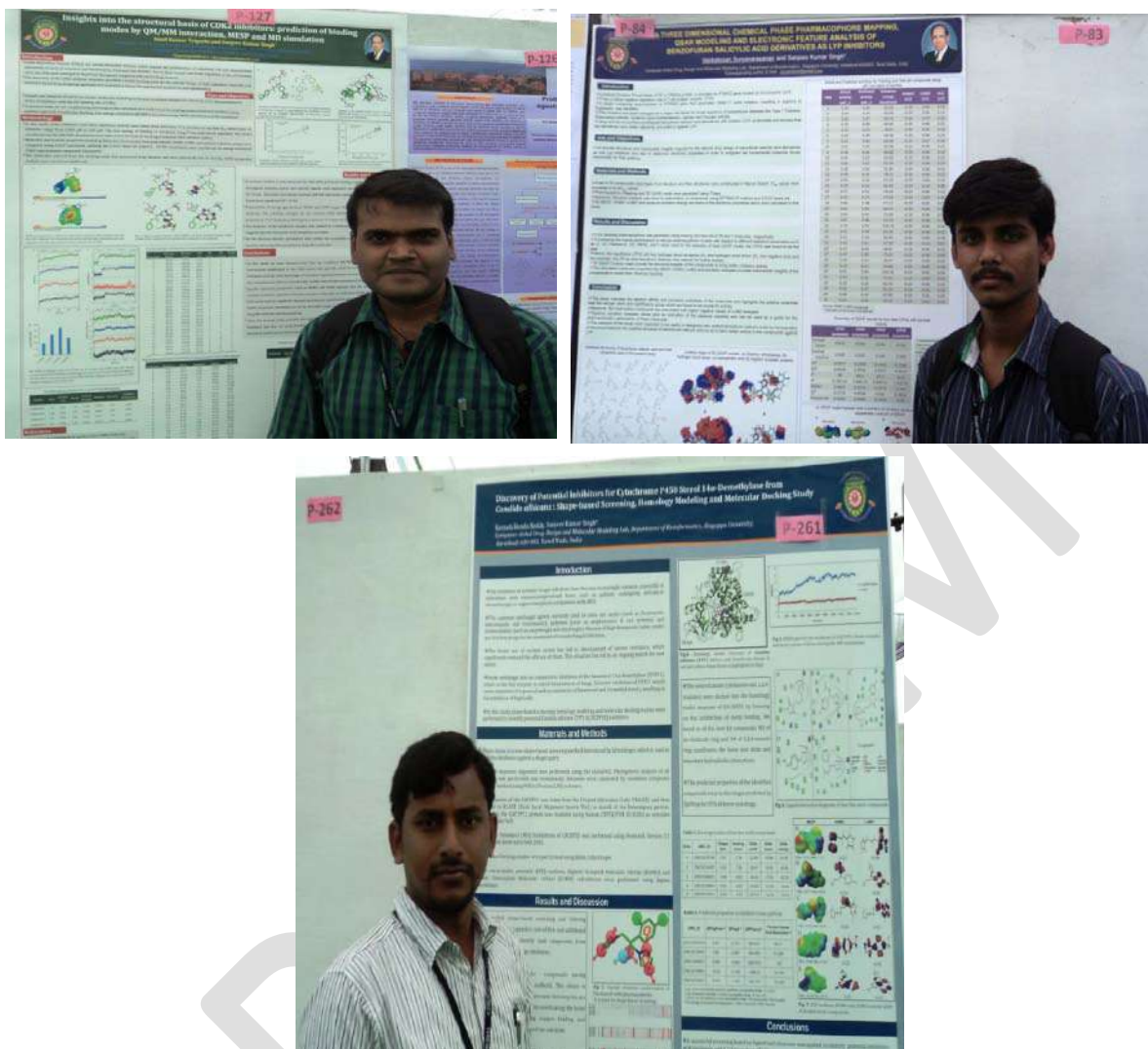
International Conference on Biomolecular forms and functions

Dr. Sanjeev Kumar Singh has attended International Conference on Biomolecular forms and functions at Indian institute of science, Bangalore, Karnataka, India during 8th-11th January, 2013.

CTDDR-2013

Dr. Sanjeev Kumar Singh along with his Ph.D students Mr. Sunil Kumar Tripathi, Mr. Karnati Konda Reddy, Mr. C. Selvaraj and Mr. V. Suryanarayan attended and presented poster at CTDDR-2013 “Drug Development for Orphan/Neglected Diseases” CSIR-Central Drug Research Institute, Lucknow during 26th-28th February 2013.





Dr. Sanjeev Kumar Singh along his Students has attended the conference at CTDDR- 2013

International conference on Phytocongress 2013

Mrs. A. Sudha under the guidance of Dr. P. Srinivasan attended and presented a poster at International conference on Phytocongress 2013, Sastra University during 7 -8 March 2013.

IWBBIO-2013

Dr. Sanjeev Kumar Singh attended International Work-Conference on Bioinformatics and Biomedical Engineering IWBBIO at Granada, Spain during 18th-20th March 2013.

Joint Conference of HGM 2013 and 21st International Congress of Genetics of Global Health and Sustainability

Dr. P. Srinivasan attended Joint Conference of HGM 2013 and 21st International Congress of Genetics of Global Health and Sustainability at Genomic Institute of Singapore during 13th -18th April 2013.

Workshop on Innovative and creative approaches for sustainable development of india

Dr. M. Karthikeyan attended the Workshop on Innovative and creative approaches for sustainable development of india at Industry and Consultancy Cell, Alagappa University on 30th April 2013.

Research Projects

S. No.	Principal Investigator	Project Title	Period		Funding Agency	Amount ₹ (in lakhs)
			From	To		
1.	Dr. J. Jeyakanthan	Structure and functional studies on PH0140 protein from <i>Pyrococcus horikoshii</i> OT3	07/2012	06/2015	UGC	12.90
		Structural and Functional analysis of Orotate Phosphoribosyl transferase (TTHA1742) and Dihydroorotate Dehydrogenase (TTHA0779) from <i>Thermus thermophilus</i> HB8	07/2012	07/2015	DBT	50.25
		Structure determination of CPS and ATCase of <i>Thermus thermophilus</i> HB8 and identification of potential inhibitors	09/2012	09/2015	DBT	32.16
		Structural and Functional Studies of Translation Initiation factors from <i>Pyrococcus horikoshii</i> OT3	01/2013	05/2016	DBT - Twin	77.00
		Structural and Functional Studies of Purine Biosynthesis complex from <i>Pyrococcus horikoshii</i> OT3	07/2013	07/2016	DST	48.98
2.	Dr. Sanjeev Kumar Singh	Shape and chemical feature based 3D-Pharmacophore Model generation, Virtual	02/2011	01/2014	UGC	7.48

		Screening and MESP studies to identify Potential Leads for Antifungal Azoles.				
		Computational Screening of CDK2 Inhibitors by Combined approach of Pharmacophoric study, QPLD and Molecular Dynamics Simulation analysis	05/2011	04/2014	DST	18.95
		QM/MM partial charges, binding pocket contours analysis and FEP calculation for designing potent inhibitors of HTLV-Protease: A de novo drug design approach	03/2012	03/2015	CSIR	16.02
3.	Dr. P. Srinivasan	Genome characterization and molecular docking of Bacillus phages and their inhibitory effects against shrimp pathogenic bacteria	07/2010	06/2012	TNSCST	1.89
		Molecular characterization, molecular docking and biocontrol effect of Vibrio bacteriophages from shrimp aquaculture environment	07/2011	07/2014	UGC	7.64
		Diversity of Salmonella specific bacteriophages in Tamilnadu and screening potent phages to treat salmonellosis	08/2012	08/2015	ICMR	16.33
		Development of Microarray for the detection of Bacteria / Bacteriophages and controlling measures against pathogenic bacteria from shrimp aquaculture environment	08/2012	08/2015	DST-FAST TRACK	23.44
4.	Dr. M. Karthikeyan	Investigation of binding of HA Protein with sialic acid ligand base	02/2011	01/2014	CSIR	15.98

		lead identification of neuraminidase inhibitor of H1N1 2009 influenza virus				
--	--	---	--	--	--	--

DBI as a Springboard

Consultancy for Research Training and Technical Exposure

The abundance of enriched computational and experimental facilities at Department of Bioinformatics a collective sum of revenue has been generated from the consultancy services provided to many students hailing from different institutions to complete their M.Sc Dissertation thesis and carry out their part of Doctoral Research based on their objectives and requirement

S.No	Name	Institution	Duration
1.	Ms. S. Yogapriya	Bharathidasan University	22 nd May – 30 th Aug, 2012
2.	Ms. B. Dhivya		
3.	Ms. M. Nishadevi	PSR Engineering College	10 th December, 2011– 30 th April, 2012
4.	Ms. K. Rajakumari		
5.	Mr. N. Saravanakumar		
6.	Mr. M. G. Karthick		
7.	Ms. M. Ranjani	Bharathidasan University	01 st February – 31 st May, 2012
8.	Ms. K. Nalini		
9.	Ms. R. Arul Salomee Kamalabi		
10.	Ms. P. Ilakkiya		
11.	Mr. RY. Ramanathan	SRM University	01 st November – 31 st December, 2012
12.	Ms. J. Shivashankari	SASTRA University	27 th December, 2012 – 30 th April, 2013
13.	Dr. Prema	Govt. Arts and Science College for Men	23 rd May, 2013

Student's Achievements



Dr. C. Selvaraj at Centre for Translational Medicine NUS Yong Loo Lin School of Medicine on July, 2012



Dr. C. Selvaraj has received Bioclues Innovation Research Development Award (BIRD) for his outstanding contribution in the field of Functional Genomics and Bioinformatics in December, 2012.

Publications

1. Saranya N, **Jeyakanthan J**, Selvaraj S. (2012), "Impact of protein binding cavity volume (PCV) and ligand volume (LV) in rigid and flexible docking of Protein-ligand complexes". *Bioorg Med Chem Lett* .22(24) pp:7593-7597. (IF: 2.338).
2. Grover, A., Katiyar, S.P., **Jeyakanthan, J.**, Dubey, V. and Sundar, D. (2012), "Blocking Protein Kinase C signaling pathway: mechanistic insights into the anti-leishmanial activity of prospective herbal drugs from *Withania somnifera*". *BMC Genomics* 13(7): S20. (IF: 4.397).
3. M. Uthayakumar, B. Benazir, Sanjeev Patra, M. Kirti Vaishnavi, M. Gurusaran, K. Sureka, **Jeyaraman Jeyakanthan** and K. Sekar (2012), "Homopeptide Repeats: Implications in protein structure, function and evolution". *Genomics Proteomics Bioinformatics* 10(4), pp: 217-225.
4. Abhinav Grover, Shashank Prakash Katiyar, **Jeyaraman Jeyakanthan**, Vikash Kumar Dubey and Durai Sundar. (2012), "Mechanistic insights into the dual inhibition strategy for checking Leishmaniasis". *J Biomol Struct Dyn*. 30(4), pp: 439–452.
5. Anita R. Chacko, **J. Jeyakanthan**, G. Ueno, K. Sekar, C. Durga Rao, Eleanor J. Dodson, Kaza Suguna, Randy J. Read. (2012), "A new pentameric structure of rotavirus NSP4 revealed by molecular replacement". *Acta Crystallogr D Biol Crystallogr.*, D68, pp: 57–61. (IF: 14.103).
6. Kh. Dhanachandra Singh, Palani Kirubakaran, Shanthi Nagarajan, Sugunadevi Sakkiah, Karthikeyan Muthusamy, D.Velmurgan, **Jeyaraman Jeyakanthan**. (2012), "Homology Modeling, Molecular Dynamics, e-Pharmacophore mapping and Docking Study of *Chikungunya Virus* nsp2 Protease". *J Mol Model*. 18(1), pp: 39-51. (IF: 1.984).
7. Tripathi SK, Selvaraj C, **Singh SK**, Reddy KK., (2012), "Molecular docking, QPLD, and ADME prediction studies on HIV-1 integrase leads", *Med Chem Res.*, 21(12): 4239-4251 (IF=1.402).
8. Selvaraj C, **Singh SK**, Tripathi SK, Reddy KK, Rama M., (2012), "In silico screening of Indinavir based compounds targeting proteolytic activity in HIV-PR: Binding Pocket Fit Approach. *Med Chem Res.*, 21(12):4060-4068 (IF:1.40).
9. Tripathi SK, **Singh SK**, Singh P, Chellaperumal P, Reddy KK, Selvaraj C., (2012), "Exploring the selectivity of a ligand complex with CDK2/CDK1: a molecular dynamics simulation approach", *J MolRecognit.*, 25(10):504-12 (IF:2.151).
10. Fazil MH, Kumar S, Rao NS, Selvaraj C, **Singh SK**, Pandey HP, Singh DV., (2012), "Comparative structural analysis of two proteins belonging to quorum sensing system in *Vibrio cholera*", *J Biomol Struct Dyn.*, 30(5):574-84 (IF:2.91).

11. **Singh SK**, Tripathi SK, Dessalew N, Singh P., (2012), "Cyclin Dependent Kinase as Significant Target for Cancer Treatment", *Current Cancer Therapy Reviews*, **8**(3), 225-235.
12. Grover A, Katiyar SP, **Singh SK**, Dubey VK, Sundar D., (2012), "A leishmaniasis study: structure-based screening and molecular dynamics mechanistic analysis for discovering potent inhibitors of spermidine synthase", *Biochim Biophys Acta.*, 1824(12):1476-83 (IF:3.83).
13. Reddy KK, **Singh SK**, Dessalew N, Tripathi SK, Selvaraj C., (2012), "Pharmacophore modelling and atom-based 3D-QSAR studies on N-methyl pyrimidones as HIV-1 integrase inhibitors. *J Enzyme Inhib Med Chem.* 2012; 27 (3): 339-47 (IF:2.33).
14. Daisy P; Vijayalakshmi P, Selvaraj C, **Singh SK**, Saipriya K., (2012), "Targeting Multidrug Resistant *Mycobacterium tuberculosis* HtrA2 with Identical Chemical Entities of Fluoroquinolones", *Indian J Pharm Sci.*,74 (3): 217-22 (IF:0.47).
15. Rayalu DJ, Selvaraj C, **Singh SK**, Ganeshan R, Kumar NU, Seshapani P., (2012), "Homology modeling, active site prediction, and targeting the anti hypertension activity through molecular docking on endothelin - B receptor domain", *Bioinformation.*, 8(2):81-6 (IF:0.5).
16. **Pappu Srinivasan**, Arumugam Sudha, Umamaheswari, N., Ramar Vanajothi, & Palanivel Rameshthangam. (2012), "Modeling of quorum sensing regulatory LuxR protein, isolated from *Vibrio harveyi* and *in silico* prediction of active drugs", *International Journal of Current Science*, 2, 5-13.
17. Sundaraj Rajamanikandan, Ramar Vanajothi, Arumugam Sudha, Palanivel Rameshthangam & **Pappu Srinivasan**, (2012), "*In silico* analysis of deleterious SNPs of the FGFR2 gene", *Journal of Biological Sciences*, 12, 83-90.
18. **Pappu Srinivasan**, Ramar Manikandan & Chinnasamy Arulvasu, (2012), "Inhibition of cyclin dependent kinase-2 and glycogen synthase kinase-3 by herbal derivative 1, 2 disubstituted idopyranose through *in silico* analysis", *Journal of Advanced Scientific Research*, 3, 65-72.
19. Khuraijam Dhanachandra Singh, Palani Kirubakaran, Manikanda Prabhu, Nagamani, S., **Pappu Srinivasan** & Muthusamy Karthikeyan, (2012), "Docking studies of adenosine analogues with NS5 methyltransferase of Yellow Fever Virus", *Indian Journal of Microbiology*, 52, 28-34. (IF: 0.899).
20. Ramar Vanajothi, Arumugam Sudha, **Pappu Srinivasan**, Ramar Manikandan & Palanivel Rameshthangam (2012), "*Luffa acutangula* and *Lippia nodiflora* leaf extract induces growth inhibitory effect through induction of apoptosis on human lung cancer cell line", *Biomedicine and Preventive Nutrition*, 2, 287-293.
21. Arumugam Sudha, **Pappu Srinivasan**, Manikandaselvi, N. S. & R. Thinagarbabu, (2012), "Protective effect and antioxidant role of *Achyranthus aspera* L. against

ethanol-induced oxidative stress in rats”, *International Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences*, 4, 280-284. (IF: 1.59)

22. Ramar Vanajothi, Sundaraj Rajamanikandan, Arumugam Sudha & **Pappu Srinivasan**, (2012), “Structural and functional analysis of KIT gene encoding receptor tyrosine kinase and its interaction with sunitinib and HDAC inhibitors: An *in silico* approach”, *Pakistan Journal of Biological Sciences*, 15, 121-131.
23. **Pappu Srinivasan**, Palanivel Rameshthangam, Narayanan Marimuthu Prabhu & Chinnasamy Arulvasu, (2012), “Variation in lipid classes and fatty acid content during ovarian maturation of *Albunea symmysta*”, *Journal of Advanced Scientific Research*, 3, 60-64.
24. Prasanth Kumar S, Saumya K Patel, Yogesh T Jasrai, Himanshu A Pandya & **Pappu Srinivasan**, (2012), “Biocomputational Analysis of Filaggrin Sequence Repeats for Rheumatoid Arthritis”, *Electronic Journal of Biology*, 8, 29-33.
25. Thangaraj Sindhu, Sundaraj Rajamanikandan, & **Pappu Srinivasan**, (2012), “Computational prediction of phylogenetically conserved sequence motifs for the candidate genes involved in Type II diabetic nephropathy”, *Iranian Journal of Public Health*, 41, 24-33 (IF: 0.55)
26. Nagamani S, **Karthikeyan M**, Kirubakaran P, Singh KhD, Gopinath K, (2012), “Theoretical studies on benzimidazole derivatives as *E. coli* biotin carboxylase inhibitors”, *Medicinal Chemistry Research*, 21 (9): 2169-2180. DOI: 10.1007/s00044-011-9738-6 (IF: 1.271)
27. Nagamani S, Kesavan C, **Karthikeyan M**, (2012), “E-Pharmacophore mapping and docking studies on Vitamin D receptor (VDR)”, *Bioinformation*, 8(15):705-10. PMID: 23055614, DOI: 10.6026/97320630008705, (IF: 1.0)
28. Kirubakaran P, **Karthikeyan M**, Singh KhD, Nagamani S, (2012), “Homology modeling, molecular docking and molecular dynamics study on *Trichomonas vaginalis* carbamate kinase”, *Medicinal Chemistry Research*, 21(8): 2105-2016. DOI: 10.1007/s00044-011-9719-9 (IF: 1.271)
29. Singh KhD, **Karthikeyan M**, Kirubakaran P, Sathya V, Nagamani S, (2012), “Structure-base drug discovery of ApoE4 inhibitor from the plant compound”, *Medicinal Chemistry Research*, 21 (6): 825-833. DOI: 10.1007/s00044-011-9595-3, (IF: 1.271)
30. Kirubakaran P, **Karthikeyan M**, Singh KhD, Nagamani S, (2012), “Ligand based pharmacophore modeling; Atom based 3D-QSAR analysis and Molecular docking studies of Phosphoinositide-dependent kinase-1 inhibitors”, *Indian Journal of Pharmaceutical Sciences*, 74(2):141-51. PMID: 23325995, DOI: 10.4103/0250-474X.103846, (IF: 0.626)

31. Singh KhD, Kirubakaran P, Manikandaprabhu S, Nagamani S, Srinivasan P, **Karthikeyan M**, (2012), “Docking studies of adenosine analogues with NS5 methyltransferase of Yellow Fever Virus”, *Indian Journal of Microbiology*, 52(1): 28-34. PMID:23449064, DOI: 10.1007/s12088-011-0201-7 (IF: 0.46)
32. Singh KhD, Kirubakaran P, Nagarajan S, Sakkiah S, **Karthikeyan M**, Velmurgan D, Jeyakanthan J, (2012), “Homology Modeling, Molecular Dynamics, e-Pharmacophore mapping and Docking Study of Chikungunya Virus nsP2 Protease”, *Journal of molecular modeling*, 18(1):39-51. PMID: 21445710, (IF : 1.871)

Student's/Scholar's Corner

Scientific BrainBank

Journal Club has been initiated and followed as a regular practice where the research scholars are made to present on recent research topic of their interest for about 45 – 60 minutes and thereafter deliberations on the much hyped subject leads to the stimulation of thought provoking process and formation of novel ideas for their research doings.

Journal Club Schedule

Name	Title of the paper	Date
Mrs. Sudha. A	Chamaejasmine induces apoptosis in human lung adhiocarcinoma A459 cells through a ROS-mediated Mitochondrial pathway	06-07-2012
Mr. Kh.Dhanachandra Singh	Pharmacophore in brief : Experimental and Computational approaches	13-07-2012
Ms. Vanajothi. A	Cytotoxic effect of Green Synthesized silver nanoparticles using <i>Melia azedaraeh</i> against in vitro HeLa cells line and Lymphoma mice model	20-07-2012
Mr.Kirubakaran. P	Mechanistic insights into the dual inhibition strategy for checking Leishmaniasis	27-07-2012
Mr. Karnati Konda Reddy	Global Landscape of HIV-human protein complex and insights into the interaction between HIV-1 integrase and human LEDGF/P75	03-08-2012
Mr. Sunil Kumar Tripathi	Can we really computer-aided drug design	10-08-2012
Mr. Gopinath. K	Chemprot: a disease chemical biology	17-08-2012
Ms. Sureka. K	Polar bears, Antibiotics and the evolution ribosome (Nobel Lecture)	24-08-2012

Mr. Nagamani. S	Molecular docking and pharmacophore filtering in the discovery of dual-inhibitors for human Leukotriene A4 hydrolase and leukotriene C4 synthase	07-09-2012
Mr. Selvaraj. C	A Comparative study of HIV-1 and HTLVs protease structure and dynamics reveals a conserved residue interaction network	14-09-2012
Mr. Nachiappan. M	Molecular dynamics simulation of the <i>Staphylococcus aureus</i> YsxC protein molecular insights into ribosome assembly and allosteric inhibition of protein.	21-09-2012
Mr. Sathishkumar. C	Efficient synthesis of silver nanoparticles from prosopis juliflora leaf extract and its antimicrobial activity using sewage	28-09-2012
Mr. Rajamanikandan. S	Isolation and characterization of a lytic myoviridae bacteriophage PAS-1 with Broad Infectivity in <i>Aeromonas salmonicida</i>	05-10-2012
Ms. Sindhu. T	Antidiabetic activity of some pentacyclic acid triterpenoids, role of PTP-1B: <i>In vitro</i> , <i>In silico</i> and <i>In vivo</i> approaches.	12-10-2012
Ms. Sasikala. D	Novel lytic bacteriophage AB7-1BB1 of <i>Acinetobacter baumami</i> : isolation, characterization and its effect on biofilm	19-10-2012
Mr. Suryanarayanan. V	Exploring the role of H ₂ O molecule for docking & receptor guided 3D-QSAR analyses of Naphthydine derivatives as spleen tyrosine kinase inhibitors (SYK)	02-10-2012
Mrs. Sudha. A	Anti-Inflammatory activities of cinnamonum cassia constituents <i>in vitro</i> & <i>in vivo</i>	08-11-2012
Ms. Vanajothi. R	Effects of fraction obtained from Korean cornifrutus extracts causing Anti-proliferation and P53 Dependent Apoptosis in A549 lung cancer cells	16-11-2012
Mr. Kh. Dhanachandran Singh	Pharmacogenomics steps towards personalized medicine	23-11-2012
Mr. Karnati Konda Reddy	HIV-1 Tat binding to BCAF Bromodomain structural determinants	30-11-2012

	from computational methods	
Mr.Kirubakaran. P	Homology Modeling, docking and structure based pharmacophore of inhibitors of DNA methyltransferase	07-12-2012
Mr.Sunil Kumar Tripathi	Limking CDK from yeast to humans a basis for CDK inhibitor design in anti-cancer drug research	14-12-2012
Mr.Selvaraj. C	Structural changes of Listeria monocytogenes sortase A: A key to understanding the catalytic mechanism	21-12-2012
Mr.Gopinath. K	PolysacDB: A Database of microbial polysaccharide antigens and their antibodies.	28-12-2012
Ms.Sureka. K	Ribosome –Structure and the mechanism of translation	04-01-2013
Mr.Nagamani. S	Pharmacophore generation and atom based 3D-QSAR of novel (4-methylsulfonyl phenyl) pyrimidines as Cox-2 inhibitors	11-01-2013
Mr.Nachiappan. M	Role of water in molecular docking studies of cytochrome P4502D6	18-01-2013
Mr.Sathish Kumar. C	Biosynthesis of silver nanoparticles from Tribulus terrestris and its antimicrobial activity: A biological novel approach.	01-02-2013
Mr.Rajamanikandan. S	Characterization of a new phage, termed ϕ A318, which is specific for vibrio alginolyticus	08-02-2013
Ms.Sindhu. T	Extract of cytosorus acuminatus attenuates diabetic nephropathy in mice via modifying peroxisome proliferated activated receptor signaling pathway	01-03-2013
Ms.Sasikala. D	Isolation and partial characterization of a virulent bacteriophage 1HQ1 specific for <i>Aeromonas punctata</i> from stream water	08-03-2013
Mr.Suryanarayanan. V	Pharmacophore modeling and density functional theory analysis for a series of nitroaminazole compounds with antitubercular activity	15-03-2013
Ms.Karthiga. A	Roscovitina confers tumor suppressive effect on therapy-resistant breast tumor cells	22-03-2013
Mr.Stalin. N	Isolation of lytic bacteriophage	05-04-2013

	against <i>vibriolarveyi</i>	
Mr.Santhosh. R	Biolip: a semi-manually curated database for biologically relevant ligand-protein interactions	12-04-2013

DBI-BIM

மாணவர்கள் மென் திறன்களை வளர்த்து கொள்ள வேண்டும் துணை வேந்தர் சேது கடலைமுத்து பேச்சு

காலராக்குடி அக.31-
மாணவர்கள் மென் திறன்
களை வளர்த்து கொள்ள
வேண்டும் என்று துணை
வேந்தர் சேது கடலை
முத்து கூறினார்.

மென் திறன் குறித்த பயிற்சி

காலராக்குடி அழகப்பா
பல்கலைக்கழகத்தின் தொழில்
வழிகாட்டல் மற்றும் கலாநி
தாய்வு மையத்தின் சார்பில்
தொழில் வழிகாட்டல் மற்றும்
மென் திறன் குறித்த 3 நாள்
பயிற்சி நடைபெற்றது.
தொடக்க விழாவுக்கு அழ
கப்பா பல்கலைக்கழக துணை
வேந்தர் சேது கடலை முத்து
தலைமையாக இயங்கினார்.
அப்போது அவர் கூறியதா
வது-

பாடத்தல் போதிய அறிவு
பெற்றிருக்கும் மென் திறன்
களில் குறைந்த அளவே
திறமை இருப்பதால் மாணவர்

களால் சரியான வேலை
வாய்ப்பை பெற முடியாத சூழ்
நிலை உள்ளது. இக்கால கட்ட
த்தில் திறமைகள் மட்டுமே
போதாது திறமைகளை நன்கு
கையாளவும் திறமைக்கேற்ப
வேலைவாய்ப்பை அடைவதற்
குமென் திறன்பயிற்சியிலும்
அவசியமாகிறது.

ஆளுமை திறன்

கல்வி என்பது அறிவுசார்
வளர்ச்சியுடனும் இல்லை.
திறன்சார் கல்வியும் சேர்த்து
ஆகலால் மாணவர்கள் ஆய்வி
ல்பு பேச்சாற்றல், கணிதப்
பயிற்சி, ஆளுமை திறன் மற்
றும் மென் திறன்களை வளர்த
துக்கொள்ள வேண்டும்.
அப்போதுதான் மாணவர்கள்
நாய்கள் தெரிவு செய்த
இலக்கை எளிதில் அடைய
முடியும்.

மாணவர்களின் மென்
திறன்களை வளர்த்துக்கொள்

ளும் நோக்கில் அழகப்பா பல
கலைக்கழகம் தொடர்ந்து
இது போன்ற பலவேறு பயிற்சி
வகுப்புகளை நடத்தி வரு
கிறது. பல்கலைக்கழக மாண
வர்கள் அனைவரும் இந்த
பயிற்சியில் பல்கு பெற்று தய
கனது தனித்திறமைகளை
வளர்த்து கொள்ள வேண்
டும்.

இவ்வாறு அவர் கூறினார்.
விழாவில் அழகப்பா பல
கலைக்கழக ஆட்சிக்குழு
உறுப்பினர் சஞ்சீவ் ராஜா,
சென்னை டிரான்ஸ்பார்ட்ஸ்
பயிற்சி நிபுணர் ரகுநாதன்
ஆகியோர் தொடக்க உரை
காற்றினார். தொழில் வழிகா
ட்டல் மற்றும் கலந்தாய்வு
மைய ஒருங்கிணைப்பாளர்
ஜெயசுந்தன் வரவேற்றார்.
பல்கலைக்கழகத்தை சேர்ந்த
பல்வேறு துறைகளை சார்ந்த
மாணவர்கள் பயிற்சியில்
கலந்து கொண்டனர்.



விழாவில் துணைவேந்தர் சேது கடலைமுத்து பேசிய போது எடுத்த படம்.

மாணவர்கள் தனித்திறமைகளை வளர்த்துக் கொள்வது அவசியம்

துணைவேந்தர்

காரைக்குடி அழகப்பா பல்கலைக்கழக மாணவர்கள் தங்கள் தேர்வு செய்த இலக்குகளை அடைய வேண்டுமெனில் தனித்திறமைகளை வளர்த்துக் கொள்வது அவசியம் என்று அழகப்பா பல்கலைக்கழகத் துணைவேந்தர் சே.து.சுடலைமுத்து தெரிவித்தார். காரைக்குடி அழகப்பா பல்கலைக்கழகத்தில் தொழில் வழிகாட்டல் மற்றும் கல்வியியல் மையம் சார்பில் தொழில் வழிகாட்டல் மற்றும் மென் திறன் குறித்த 3 நாள் பயிற்சி துவக்க விழா திங்கள் கிழமை நடைபெற்றது. இதில் துணைவேந்தர் தலைமை வகித்துப் பேசினார். மாணவர்களில் குறைந்த அளவு திறமைகளை மாணவர்கள் கொண்டிருப்பதால்



காரைக்குடி அழகப்பா பல்கலைக்கழகத்தில் நடைபெற்ற தொழில் வழிகாட்டல் மற்றும் மென் திறன் குறித்த பயிற்சி துவக்க விழாவில் பேசிய துணைவேந்தர் சே.து.சுடலைமுத்து.

வேலைவாய்ப்பு பெற முடியாத சூழ்நிலை உள்ளது. திறமைகளை நன்கு கையாள்வதும் திறமைக்கேற்ப வேலைவாய்ப்பை அடைவதற்கும் மென் திறன் பயிற்சி அவசியம் என்று கல்வி என்பது அறிவுசார் வளர்ச்சி மட்டுமல்ல, திறன் சார்ந்ததும் கல்விக்குரியது. அதனால் மாணவர்கள் ஆங்கிலப் பேச்சுநிறல், கணிவிப்பு பயிற்சி, ஆளுமைத் திறன் மற்றும் மென் திறமைகளை வளர்த்துக் கொள்ள வேண்டும் என்றார். இதில் பல்கலை, ஆட்சிக்குழு உறுப்பினர் சி.சுப்பிரமணியன், சென்னை டிரான்ஸ் டாப் பயிற்சி நிபுணர் ரகுநாதன் ஆகியோர் பேசினர். முன்னதாக மைய ஒருங்கிணைப்பாளர், தொழில்நுட்ப வரவேற்றார். பல்கலைக்கழகத்தின் பல்வேறு துறைகளைச் சார்ந்த மாணவர்கள், போலிசியர்கள் கலந்து கொண்டனர்.

வாழ்க்கை முறை மாற்றங்களால் மக்கள் நரம்பு சார்ந்த பாதிப்புகளுக்கு ஆளாக வாய்ப்பு

சென்னை பல்கலை. பேராசிரியர் தகவல்



அழகப்பா பல்கலைக்கழகத்தில் உயிரி தகவலியல் துறை சார்பில் நடைபெற்ற தேசியக் கருத்தரங்கில் மலரை வெளியிடுகிறார் துணைவேந்தர் சேது.கூடவைமுத்து (இடமிருந்து 3 ஆவது). உடன் சென்னை பல்கலைக்கழக உயிர் இயற்பியல் துறைத் தலைவர் டி.வேல்முருகன் (இடமிருந்து 2 ஆவது).

வரைக்குடி, பிப் 19: வாழ்க்கை முறை மாற்றங்களால் வரும் 2025 ஆம் ஆண்டுக்குள் 60 மில்லியன் மக்கள் நரம்பு சார்ந்த பாதிப்புகளுக்கு ஆளாக வாய்ப்புகள் உள்ளதாக சென்னை பல்கலைக்கழகத்தின் படி.கவியல் மற்றும் உயிர் இயற்பியல் துறை பேராசிரியர் டி.வேல்முருகன் தெரிவித்தார்.

காரைக்குடி அழகப்பா பல்கலைக்கழகத்தில் உயிரி தகவலியல் துறை சார்பில் கூட்டமைப்பு உயிர் தகவலியல் மற்றும் கணினி சார்ந்த மருத்துவ கண்டுபிடிப்புகளில் நவீன வளர்ச்சி குறித்த தேசிய அளவிலான நான்கு நாள் கருத்தரங்கை செவ்வாய்க்கிழமை துவக்கி வைத்து அவர் மேலும் பேசியது:

ஃபிளெஸ்கோ நிறுவனம் 2014 ஆம் ஆண்டை உலகளாவிய படி.கவியல் ஆண்டாக அறிவித்து கொண்டுவந்துள்ளது. 1912-2014 ஆண்டுகளில் படி.கவியல் துறை

யில் அளப்பரிய சாதனைகளைப் புரிந்த ஆராய்ச்சியாளர்களை கௌரவிப்படுத்தும் விதமாக இந்த அறிவிப்பு உள்ளது.

நமது வாழ்க்கை முறை மாற்றம், உணவு, சுற்றுச்சூழல் மாற்றங்கள் இவற்றாலும், புரத மூலக்கூறுகள் போன்றவற்றாலும் நான்கு நாள் நம்மை நம்புகள் சார்ந்த நோய்கள் அச்சுறுத்திக்கொண்டே இருக்கின்றன. புதிய, புதிய நோய்கள் உருவாகி வருவதால் அதைக் கட்டுப்படுத்த உரிய மருந்துகள் கண்டுபிடிக்கப்பட வேண்டும். அதற்கு இந்த துறையில் பயிலும் மாணவர்கள் மற்றும் ஆராய்ச்சியாளர்கள் விழிப்புணர்வுடன் செயலாற்ற வேண்டும் என்றார்.

அழகப்பா பல்கலைக்கழக துணைவேந்தர் சேது.கூடவைமுத்து கருத்தரங்க மலரை வெளியிட்டுப் பேசுகையில், நாட்டின் தேவைக்கேற்ப புதிய மருந்துகளை வடிவமைத்தல், உருவாக்கு

தல் அவசியம். தற்போது நிலம் வரும் நோய் பரவதல், சுற்றுச்சூழல் பாதிப்பு போன்றவைகளால் மருந்துகளின் தன்மையும், தேவையும் மாறிக்கொண்டே வருகின்றன. இந் நிலையில், கணினிகள் துணை கொண்டு மருந்துகளை உருவாக்குதல், சோதனை மேற்கொள்ளுதல் வேண்டும் என்றார்.

விழாவில் அண்ணா பல்கலைக்கழக மதுரை மண்டல இயக்குநர் கே. சிவக்குமார் சிறப்புரையாற்றினார். பல்வேறு மாநிலங்களிலிருந்து 150 க்கும் மேற்பட்ட அறிவியல் வல்லுநர்கள், மாணவர்கள், ஆய்வாளர்கள் கருத்தரங்கில் பங்கேற்றனர்.

மூன்றதாக பல்கலையில் உயிரி தகவலியல் துறைத் தலைவர் ஜெ. ஜெயகாந்தன் வரவேற்று ஆய்வு ரங்கத்தின் முக்கியத்துவம் குறித்துப் பேசினார்.

உதவிப் பேராசிரியர் ப. சீனிவாசன் நன்றி கூறினார்.

மரபணு மாற்றத்தால் வீரியம் இழக்கும் மருந்துகள்

காரைக்குடி, பிப்.20-
"மரபணு மாற்றத்தால், நோய்க்
களுக்கு உரிய மருந்துகள், வீரியம்
இழந்து வருகின்றன," என,
சென்னை பல்கலை பேராசிரியர்
வேல்முருகன் பேசினார்.

காரைக்குடி அழகப்பா பல்கலை,
உயிர்தகவியல் துறை சார்பில், கருத்
தரங்கு நடந்தது.

துணைவேந்தர் சேது சுடலை
முத்து துவக்கி வைத்தார். துறைத்
தலைவர் ஜெயகாந்தன் வரவேற்றார்.
சென்னை பல்கலை படிக்கவியல்
மற்றும் உயிரி இயற்பியல் துறை
தலைவர் வேல்முருகன் பேசியதா
வது:

உயிர் மூலக்கூறுகள் சம்மந்தமான
கண்டுபிடிப்புக்கு, இதுவரை 40
க்கும் மேற்பட்ட நோயல் பரிசு

சென்னை பல்கலை பேராசிரியர் பேச்சு

வழங்கப்பட்டுள்ளது. சமீப கால
மாக, முக்கிய நோய்களுக்கு, பயன்ப
டுத்தப்படும் மருந்துகள், வீரியம்
இழந்து வருகின்றன. மரபணுக்கள்
மாற்றமே, இதற்கு காரணம்.

சிக் குன் -குனியா, டெங்கு, காச
நோய், புற்றுநோய் அதிகரித்து
உள்ளது. இவற்றை போக்க,
இயற்கை நமக்கு பல வசதிகளை தந்
துள்ளது. கடல் மற்றும் நிலத் தாவ
ரங்களில் இருந்து, மூலக்கூறுகளை
பிரித்தெடுத்து, இந்நோய்களை
தீர்க்க முடியும்.

இதன் மூலம், உயிர்காக்கும் மருத்
துகளை உருவாக்க முடியும்.

சிக் குன் -குனியா மூலக்கூறின்,
முப்பரிமாண அமைப்பு, இதுவரை

கண்டறியப்படவில்லை. பெங்கு
காய்ச்சலின் நிலை- 2 க்கான மூலக்
கூறு கண்டறியப்பட்டுள்ளது.

இயற்கை மருந்தை அளிக்கும்
தாவரங்களை வெளிநாட்டுக்கு
அனுப்பி, மருந்தாக விலை
கொடுத்து வரங்குகிறோம். நோய்
தீர்க்கும் மருந்தை கண்டுபிடிக்க, 14
ஆண்டுகளாகிறது. அதற்குள்
நோயின் தன்மை மாறிவிடுகிறது.

வெளிநாடுகளில் மருந்துகள், குறிப்
பிட்ட கால இடைவெளியில் அழிக்
கப்படுகின்றன. நம்தாட்டில் அப்படி
இல்லை, என்றார்.

அண்ணா பல்கலை இயக்குனர்
சிவகுமார், பேராசிரியர் சீனிவாசன்
பங்கேற்றனர்.



Contact Us

**The Chief Editor
DBI-BIM**

Department of Bioinformatics
Alagappa University
Karaikudi-630 004
Tamil Nadu, India
E-Mail: bioinfoau@gmail.com
Ph no: +91-4565-230725
Fax: +91-04565-225202

