|  |  |
| --- | --- |
| teacher.jpg | **دانشیار موسسه بیوشیمی بیوفیزیک- دانشگاه تهران**  **محمد حسین کریمی جعفری** |
| تلفن دفتر: +98 (21)  پست الکترونیکی: mhkarimijafari@ut.ac.ir |  |

|  |  |
| --- | --- |
| **تحصیلات** | کارشناسی,1380,شیمی,دانشگاه تهران P.H.D,1386,شیمی فیزیک,دانشگاه تهران M.S,1382,شیمی فیزیک,دانشگاه تهران |

|  |  |
| --- | --- |
| **زمینه­های تخصصی**  **و حرفه­ای** |  |

|  |  |
| --- | --- |
| **سوابق کاري و فعالیت های اجرایی** | بازرس اصلی انجمن بیوانفورماتیک ایران-(از 1397) معاون اجرایی و دانشجویی-(از 1395) عضو هیات مدیره انجمن بیوانفورماتیک ایران-(از 1394) |
|  |  |

|  |  |
| --- | --- |
| **فعالیت های علمی** | * مقالات   **- Intermediate-aided allostery mechanism for α-glucosidase by Xanthene-11v as an inhibitor using residue interaction network analysis. Moosavi Movahedi Zahra, Salehi Najmeh, Habibi Rezaei Mehran, Qassemi Farzad, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2023)., JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS & MODELLING, 122(1), 108495.  - Identification of Catechins’ Binding Sites in Monomeric Aβ42 through Ensemble Docking and MD Simulations. Firozi Roholla, Sowlati-Hashjin Shahin, Chavez-Garcia Cecilia, Ashoori Mitra, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Karttunen Mikko (2023)., INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES, 24(9), 8161.  - Design of a dual-function agent by fusing a designed anti-VEGF-A binder and CPG-2 enzyme. Etemadi Ali, Karimi-jafari Mohammad Hossein, negahdari Babak, Asgari Yazdan, Khorramizadeh Mohammad Reza, Mohammadian Farideh, Mazloomi Mohammadali (2023)., JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS, 1(1), 1-8.  - Metastatic triple negative breast cancer adapts its metabolism to destination tissues while retaining key metabolic signatures. Roshanzamir Fariba, Robinson Jonathan, Cook Daniel, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Nielsen Jens (2022)., Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 119(35).  - Binder design for targeting SARS-CoV-2 spike protein: An in silico perspective. Etemadi Ali, Moradi Hamid Reza, Mohammadian Farideh, Karimi-jafari Mohammad Hossein, نگاهداری بابک, Asgari Yazdan, Mazloomi Mohammadali (2022)., Gene Reports, 26(1), 101452.  - Structural insights into the substrate‐binding site of main protease for the structure‐based COVID‐19 drug discovery. Firozi Roholla, Ashoori Mitra, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2022)., PROTEINS-STRUCTURE FUNCTION AND BIOINFORMATICS, 1(1).  - Electrostatically induced pKa shifts in oligopeptides: the upshot of neighboring side chains. نوروزی امیر, Lazar Alexandra, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Firozi Roholla, Nau Werner (2022)., AMINO ACIDS, 54(2), 277-287.  - Ensemble learning from ensemble docking: revisiting the optimum ensemble size problem. Mohammadi Sara, Narimani Zahra, Ashoori Mitra, Firozi Roholla, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2022)., Scientific Reports, 12(1).  - Prediction of antimicrobial peptides toxicity based on their physico-chemical properties using machine learning techniques. Khabbaz Khob H.., Karimi-jafari Mohammad Hossein, Saboury Ali Akbar, Babaali Bagher (2021)., BMC BIOINFORMATICS, 22(1).  - Integration and gene co-expression network analysis of scRNA-seq transcriptomes reveal heterogeneity and key functional genes in human spermatogenesis. Salehi Najmeh, Karimi-jafari Mohammad Hossein, توتونچی مهدی, امیری یکتا امیر (2021)., Scientific Reports, 11(1).  - Computational evidence of new putative allosteric sites in the acetylcholinesterase receptor. Moghadam Behnaz, Ashoori Mitra, Roohi Hossein, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2021)., JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS & MODELLING, 107(1), 107981.  - ET‐score: Improving Protein‐ligand Binding Affinity Prediction Based on Distance‐weighted Interatomic Contact Features Using Extremely Randomized Trees Algorithm. Rayka Milad, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Firouzi Rohouhllah (2021)., Molecular Informatics, 40(1).  - کاربرد روشهای مکانیک کوانتومی نیمه تجربی در تخمین برهمکنشهای مولکولهای زیستی. کریمی جعفری محمد حسین, فیروزی روح الله, باقری صالح (1399)., شیمی و مهندسی شیمی ایران, 40(2).  - Using the Semiempirical Quantum Mechanics in Improving the Molecular Docking: A Case Study with CDK2. bagheri saleh, Behnejad Hassan, Firozi Roholla, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2020)., Molecular Informatics, 39(9), 2000036.  - iMM1865: A New Reconstruction of Mouse Genome-Scale Metabolic Model. Khodaee Saeideh, Asgari Yazdan, totonchi mehdi, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2020)., Scientific Reports, 10(1).  - Identification of a missense variant in CLDN2 in obstructive azoospermia. Askari Masomeh, Karamzadeh Razieh, Ansari-Pour Naser, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Almadani Navid, Sadighi Gilani Mohammad Ali, Gourabi Hamid, Vosough Taghi Dizaj Ahmad, Mohseni Meybodi Anahita, صادقی مهدی, Bashamboo Anu, McElreavey Ken, totonchi mehdi (2019)., JOURNAL OF HUMAN GENETICS, 64(10), 1023-1032.  - ʺPolymyxins interaction to the human serum albumin: A thermodynamic and computational study. Poursoleiman Atefeh, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Zolmajd-Haghighi Zahara, Bagheri Mojtaba, Haertle T.., Rezaei Behbehani G.., Ghasemi A.., Stroylova Y.Y., Muronetz V.I., Saboury Ali Akbar (2019)., SPECTROCHIMICA ACTA PART A-MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY, 217(1), 155-163.  - Efficient construction of a diverse conformational library for amyloid-β as an intrinsically disordered protein. Salehi Najmeh, Amininasab Mehriar, Firouzi Rohouhllah, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2019)., JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS & MODELLING, -(-), -.  - Biological evaluation of 9-(1H-Indol-3-yl) xanthen-4-(9H)-ones derivatives as noncompetitive α-glucosidase inhibitors: kinetics and molecular mechanisms. Nourisefat Maryam, Salehi Najmeh, Yousefinejad Saeed, Panahi Farhad, Amanlou Massoud, کوثر باقرزاده, علی خلفی نژاد, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Sheibani Nader, Moosavi Movahhedi Ali Akbar (2018)., STRUCTURAL CHEMISTRY, -(-), -.  - Hersintuzumab: A novel humanized anti-HER2 monoclonal antibody induces potent tumor growth inhibition. Amiri Mohammad Mehdi, Golsaz-shirazi Forough, Soltantoyeh Tahereh, Hosseini-ghatar Reza, Bahadori Tannaz, Khoshnoodi Jalal, Navabi Shadi Sadat, Farid Samira, Karimi-jafari Mohammad Hossein, محمود جدی تهرانی, شکری فاضل (2017)., INVESTIGATIONAL NEW DRUGS, -(-), 1-16.  - Machine Learning and Network Analysis of Molecular Dynamics Trajectories Reveal Two Chains of Red/Ox-specific Residue Interactions in Human Protein Disulfide Isomerase. Karamzadeh Razieh, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Sharifi-zarchi Ali, Chitsaz Hamidreza, Hosseini Salekdeh Ghasem, Moosavi Movahhedi Ali Akbar (2017)., Scientific Reports, 7(1), 3666.  - Histidine substitution in the most flexible fragments of firefly luciferase modifies its thermal stability. Rahban Mahdie, Salehi Najmeh, Saboury Ali Akbar, Hosseinkhani Saman, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Firouzi R.., Rezaei-ghaleh N.., Moosavi Movahhedi Ali Akbar (2017)., ARCHIVES OF BIOCHEMISTRY AND BIOPHYSICS, 629(1), 8-18.  - Insights into the molecular interaction between two polyoxygenated cinnamoylcoumarin derivatives and human serum albumin. Khammari Anahita, Saboury Ali Akbar, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Khoobi M.., Ghasemi Atiyeh, Yousefinejad S.., Abou-ziede O.. (2017)., PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 19(1), 10099-10115.  - Red/ox states of human protein disulfide isomerase regulate binding affinity of 17 beta-estradiol. Karamzadeh Razieh, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Saboury Ali Akbar, Hosseini-salekdeh Gh., Moosavi Movahhedi Ali Akbar (2017)., ARCHIVES OF BIOCHEMISTRY AND BIOPHYSICS, 619(619), 35-44.  - Micro-solvation of a bisphosphonate group: an ab initio and effective fragment potential analysis. Ashoori Mitra, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Maghari Ali (2017)., STRUCTURAL CHEMISTRY, 28(4), 1201-1210.  - Proteochemometric Modeling of the Interaction Space of Carbonic Anhydrase and its Inhibitors: An Assessment of Structure-based and Sequence-based Descriptors. Rasti Behnam, Namazi Mosen, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Ghasemi Jahan Bakhsh (2016)., Molecular Informatics, 00(00), 00.  - Quantitative Characterization of the Interaction Space of the Mammalian Carbonic Anhydrase Isoforms I, II, VII, IX, XII, and XIV and their Inhibitors, Using the Proteochemometric Approach. Rasti Behnam, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Ghasemi Jahan Bakhsh (2016)., Chemical Biology & Drug Design, 88(3), 341-353.  - Complexation of Sm3+ and pamidronate: A DFT study. Arabieh Masood, Khodabandeh Mohammad Hassan, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Platas-iglesias Carlos, زارع کریم (2015)., JOURNAL OF RARE EARTHS, 33(3), 310-319.  - Hydrogen bonding motifs in a hydroxy-bisphosphonate moiety: revisiting the problem of hydrogen bond identification. Ashoori Mitra, Maghari Ali, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2015)., PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 17(20), 13290-13300.  - Adsorption behavior of Co and C2H2 on the graphite basal surface: A quantum chemistry study. Hosseinnejad Tayebeh, عبداله زاده میرزایی رسول, نظری فریبا, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2013)., JOURNAL OF STRUCTURAL CHEMISTRY, 54(5), 850-856.  - Computational study on the structure and properties of ternary complexes of Ln3+ (Ln = La, Ce, Nd AND Sm) with 5,7-dichloroquinoline-8-ol and 4-vinyl pyridine. Hosseinnejad Tayebeh, احمدی سید جواد, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2013)., JOURNAL OF STRUCTURAL CHEMISTRY, 54(2), 283-291.  - Low-energy conformers of pamidronate and their intramolecular hydrogen bonds: a DFT and QTAIM study. Arabieh Masood, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Ghannadi Maragheh Mohammad (2012)., JOURNAL OF MOLECULAR MODELING, 19(1), 427-438.  - Intermolecular Potential Energy Surface of the N 2 −CO Dimer: Ab Initio Investigation and Analytical Representation . Karimi-jafari Mohammad Hossein, Maghari Ali, Farjamnia Azar (2011)., JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 115(6), 1143-1151.  - Quantifying the anisotropy of intermolecular potential energy surfaces: a critical assessment of available N2–N2 potentials. Karimi-jafari Mohammad Hossein, Ashouri Mitra (2011)., PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 13(20), 9887.  - Coping with the anisotropy in the analytical representation of an ab initio potential energy surface for the Cl2 dimer. Karimi-jafari Mohammad Hossein, Ashouri Mitra, Yeganeh-jabri Azadeh (2009)., PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 11(27), 5561.  - Thermophysical Properties of Nitrogen from a New Potential Energy Surface Using the Mason–Monchick Approximation. Karimi-jafari Mohammad Hossein, Maghari Ali (2006)., INTERNATIONAL JOURNAL OF THERMOPHYSICS, 27(5), 1449-1462.  - An improved ab initio potential energy surface for N2–N2. Karimi-jafari Mohammad Hossein, Maghari Ali, شهبازیان شانت (2005)., CHEMICAL PHYSICS, 314(1-3), 249-262.**   * کنفرانس ها   **- A predictive model for discriminating toxic and non-toxic anti-microbial peptides based on their physico-chemical properties. Khabbaz Khob H.., Karimi-jafari Mohammad Hossein, Babaali B.., Saboury Ali Akbar (2021)., 6th IASBS Symposium in Biological Sciences and 16th Conference of Iran Society of Biophysical Chemistry (ISOBC), 4-5 February.  - Substitution of His by Asp modify thermal stability of Firefly luciferase (2018)., 15th CBC Conference on Biophysical Chemistry, Gorgan, Iran, 23-24 October, Gorgan, Iran.  - Substitution of His by Asp modify thermal stability of firefly luciferase (2018)., 15th Iranian Biophysical Chemistry Conference, 23-24 October, Gorgan, Iran.  - Intrinsically Disordered Proteins: The Problem of Sampling and The Curse of Dimensionality. Karimi-jafari Mohammad Hossein (2018)., The 7th Conference on Bioinformatics, 3-5 January.  - Study of Red/ox Dynamics of Human Protein Disulfide Isomerase by Machine Learning and Network Analysis. Karamzadeh Razieh, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Sharifi-zarchi Ali, Chitsaz Hamidreza, Hosseini Salekdeh Ghasem, Moosavi Movahhedi Ali Akbar (2018)., The 7th Conference on Bioinformatics, 3-5 January.  - Substitution of His by lysine and aspartate in the flexible fragment of Luciferase. Rahban Mahdiyeh, Salehi Najmeh, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Saboury Ali Akbar, Hosseinkhani Saman, Moosavi Movahhedi Ali Akbar (2017)., 3rd IASBS Symposium in Biological Sciences, 2-4 November, zanjan, Iran.  - Reconstruction of context-specific metabolic models for mouse Hematopoietic Stem and Progenitor Cells. Khodaee Saeideh, Asgari Yazdan, توتونچی مهدی, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2016)., The 6th Conference on Bioinformatics, 13-15 December.  - Automatic generation of internal coordinates. Meimandi Parizi Farzaneh, Ashoori Mitra, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2016)., The 6th Conference on Bioinformatics, 13-15 December.  - PHCD: a database of natural chemical compositions of Persian medicinal herbs. Karimi-jafari Mohammad Hossein, Ashouri Mitra, Poursoleiman Atefeh, Firouzi Rohouhllah (2016)., The 6th Conference on Bioinformatics, 13-15 December.  - Metabolic network reconstruction for mouse pluripotent cells. Khassafi Fatemeh, Meimandi Parizi Farzaneh, Roshan Zamir Fariba, Sharifi-zarchi Ali, Baharvand Hossein, Karimi-jafari Mohammad Hossein, توتونچی مهدی (2016)., The 6th Conference on Bioinformatics, 13-15 December.  - Construction of Structural Libraries for Intrinsically Disordered Proteins. Salehi Najmeh, Firouzi Rohouhllah, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2016)., The 6th Conference on Bioinformatics, 13-15 December.  - EFFECT OF FAMILIAL MUTATIONS ON SALT-BRIDGE FORMATION IN AB42 MONOMERS. Aghayari Mohsen, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Firouzi Rohouhllah (2016)., 19th Iranian Physical Chemistry Conference, 15-17 September.  - Hydrogen bonding motifs in the conformational space of a hydroxy-bisphosphonate moiety. Ashoori Mitra, Maghari Ali, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2016)., 18th Iranian Physical Chemistry Conference, 5-8 March, Kish, Iran.  - A Simulated Annealing - Molecular Dynamic Approach for Conformational Sampling of full-length Amyloid-beta Peptide. Salehi Najmeh, Nasrollahtabar R.., Karimi-jafari Mohammad Hossein, Firouzi R.. (2016)., 18th Iranian Physical Chemistry Conference, 5-8 March, Kish, Iran.  - Binding of polymyxin B to human serum albumin: Thermodynamics and theoretical approach. Poursoleiman Atefeh, Saboury Ali Akbar, Bagheri Mojtaba, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2015)., 13th Conference on Biophysical Chemistry, 26-27 May, Iran.  - Binding of polymyxin B to human serum albumin: Thermodynamics and theoretical approac. Poursoleiman A.., Saboury Ali Akbar, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Bagheri Mojtaba (2015)., 13rd Iranian Biophysical Chemistry Conference, 26-27 May.  - Experimental and Theoretical Evaluation of 17-β Estradiol Interaction on Redox-dependent Conformations of Human Protein Disulfide Isomerase. Karamzadeh R.., Hosseini Salekdeh Ghasem, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Moosavi Movahhedi Ali Akbar (2015)., 13th Iran Biophysical Chemistry Conference, 26-27 May, Iran.  - A thermodynamics study of the interaction between human serum albumin and polymyxin B as A group of peptide antibiotics. Poursoleiman A.., Saboury Ali Akbar, Bagheri Mojtaba, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2014)., The National Conference on Protein & Peptide Sciences: From Basic to Medical and Indastrial Applications, 10-11 December, Shiraz, Iran.  - Computational investigation of the interaction between mushroom tyrosinase and it’s refrence inhibitor: tropolon. Ghasemi Zahra, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Saboury Ali Akbar (2014)., the 5th iranian conference on bioinformatics, 20-22 May.  - Finding the best binding modes of protein-ligand interaction by using the docking on the ensemble structures of human serum albumin. Khammari Anahita, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Saboury Ali Akbar (2014)., the 5th iranian conference on bioinformatics, 20-22 May.  - Molecular dynamics simulation of Gramicidin like channel. Arasteh Shima, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Golyaei Bahram (2014)., 58th Annual Meeting of the Biophysical Society, 15-19 February, San Francisco, United States Of America.  - Investigation of the interaction of anti asthma drugs with human serum albumin (HSA). Ghasemi Z.., Karimi-jafari Mohammad Hossein, Saboury Ali Akbar (2013)., First Tabriz International Life Science & 12nd Iranian Biophysical Chemistry Conference, 22-24 May, Iran.  - Molecular dynamics simulation study of gramicidin like channel. Karimi-jafari Mohammad Hossein, Golyaei Bahram, Arasteh Shima (2013)., First Tabriz International Life Science & 12nd Iranian Biophysical Chemistry Conference, 22-24 May, Tabriz, Iran.  - Interaction between (E)- 3 -(3-(2,3- dimethoxyphenyl) acryloyl)- 6- hydroxy -2H- chromen-2- one (DAC) with human serum albumin. Khammari A.., Karimi-jafari Mohammad Hossein, Saboury Ali Akbar (2013)., First Tabriz International Life Science & 12nd Iranian Biophysical Chemistry Conference, 22-24 May, Iran.  - Using GO annotation clustering to improve protein-protein interaction prediction. Zahiri Javad, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Emamjomeh Aabasali, Masoudi-Nejad Ali, ابراهیم پور رضا (2012)., 4th Conference on Systems Biology of mammalian Cells, 5-7 September, Leipzig, Germany.  - an analytical potential energy surface for P2-He dimer from ab initio calculations. Arashzar Seyed Mahdi, Maghari Ali, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Rezaei Zahra (2012)., 15th iranian physical chemistry conference, 3-6 September, Tehran, Iran.  - simulation of N2-CO mixture usin g an ab initio potential and study of thermodiffusion phemomena. Toosi Mohammad Reza, Fallah Hosein, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Cheraghali Reza (2012)., 15th iranian physical chemistry conference, 3-6 September, Tehran, Iran.  - CHARMM general force field parametrization for Curcumin. Alimohammadi Keyvani Zahra, زاهدی منصور, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2012)., 15th iranian physical chemistry conference, 3-6 September, Tehran, Iran.  - an accurate CHARMM compatible force field for bisphosphonate pharmaceuticals. Ashouri Mitra, Maghari Ali, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2012)., 15th iranian physical chemistry conference, 3-6 September, Tehran, Iran.  - PARAMATICA: A MATHEMATICA package for biomolecular force field development. Karimi-jafari Mohammad Hossein (2012)., 15th iranian physical chemistry conference, 3-6 September, Tehran, Iran.  - a theoretical study on the structural features of bisphosphonate pharmaceuticals. Arabieh Masood, احمدی سید جواد, قنادی مراغه محمد, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2012)., 15th iranian physical chemistry conference, 3-6 September, Tehran, Iran.  - A novel ensemble learning for protein protein interaction. Zahiri Javad, Karimi-jafari Mohammad Hossein, ابراهیم پور علیرضا, Masoudi-Nejad Ali (2012)., 4th Conference on Systems Biology of Mammalian Cells 2012, 9-11 July, Leipzig, GERMANY (FED REP GER).  - MathParam: A MATHEMATICA Package for Biomolecular Force Field Development. Karimi-jafari Mohammad Hossein (2012)., The First International & 11th Iran Biophysical Chemistry Conference, 13-15 June, Iran.  - Semi-empirical Analysis of Interaction Between Bisphosphonates and Farnesyl Pyrophosphate Synthase. Karimi-jafari Mohammad Hossein, Firouzi Rohouhllah (2012)., The First International & 11th Iran Biophysical Chemistry Conference, 13-15 June, Iran.  - سطح انرژی پتانسیل برای دیمر BeH2-He از طریق محاسبات ab initio. مقاری علی, کریمی جعفری محمد حسین (1390)., چهاردهمین کنفرانس شیمی فیزیک ایران, 1-1 دی, کیش, ایران.  - Ab initio computation of thermophysical properties of dilute fluorine gas. Maghari Ali, Karimi-jafari Mohammad Hossein (2009)., ICAPM international conferance on Applied physics and mathematics (ICAPM 2009, 26-31 December, Singapore, Singapore.**   * کتب   **- Machine Learning and Pattern Recognition Methods in Chemistry from Multivariate and Data Driven Modeling. Namazi Mohsen, Karimi-jafari Mohammad Hossein, Qassemi Farzad, Ghasemi Jahan Bakhsh (2023).**   * مجلات |

|  |  |
| --- | --- |
| **پایان نامه ها و رساله ها** | **- مهندسی متابولیک سامانه‌ای باسیلوس سوبتیلیس به منظور افزایش تولید پروتئاز قلیایی، آوا جهادمحمدی، محمد حسین کریمی جعفری، کارشناسی ارشد، 1402/6/27   - تحلیل پویایی پروتئین با استفاده از شبکه زمانمند، یک روش تشخیص مولفه های کلیدی، زهرا موسوی موحدی، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1402/6/26   - شناسایی ویژگیهای تمایزگذارنده بین سلولهای سالم و سرطانی از طریق مدلسازی متابولیکی در سطح سیستم، فریبا روشن ضمیر، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1401/11/23   - تلفیق روش های داکینگ و یادگیری هنگرد به منظور بهبود پیش بینی بر همکنش های پروتئین - لیگاند، سارا محمدی، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1400/12/18   - بررسی نقش ویژگی های فیزیکوشیمیایی پپتیدهای ضدمیکروبی در سمیت سلولی و بر همکنش آن ها با غشا، حسین خبازخوب، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1400/11/30   - توصیف متابولیکی سلولهای واقع بر منظره وادینگتون، سعیده خدایی، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1399/7/30   - بکارگیری روش های مکانیک کوانتومی نیمه تجربی به منظور تخمین قدرت اتصال مولکول های کوچک دارویی با برخی پروتئین های دخیل در انواع سرطان مانند کیناز های وابسته به سیکلین، صالح باقری، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1399/11/7   - طراحی سامانمند هنگرد ساختاری پروتئین های بی نظم ذاتی، نجمه صالحی، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1397/11/27   - اثر مهارکننده های سولفونامیدی بر ساختار و فعالیت آنزیم کربنیک انیدراز انسانی II در حالات طبیعی و گلایکه شده، لقمان علایی، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1397/10/25   - بررسی اثر جهش زایی در نواحی انعطاف پذیر بر پایداری آنزیم لوسیفراز، مهدیه رهبان، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1396/6/20   - مطالعه تجربی و نظری تاثیر بر همکنش هورمون 17 -? استرادیول بر آنزیم پروتئین دی سولفید ایزومراز انسانی، راضیه کرم زاده، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1396/2/24   - مطالعه تجربی و نظری تأثیر برهمکنش هورمون ١٧ بتا-استرادیول بر آنزیم پروتئین دیسولفید ایزومراز انسانی، راضیه کرم زاده، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1396/02/24   - Experimental and Theoretical Studies of 17 beta-esteradiol Interaction with Human Protein Disulfide Isomerase، راضیه کرم زاده، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1396/02/24   - مطالعه پروتئوکمومتریکی فضای برهمکنش ایزوفرم های کربونیک انیدراز و برخی از مهارکننده های آنها، بهنام راستی، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1395/6/29   - محاسبه توابع میدان نیرو برای برخی مولکول های دارویی با استفاده از روش های شیمی کوانتومی و بکار گیری آنها در شبیه سازی برهمکنش با بافت هدف، میترا آشوری، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1394/3/27   - مطالعه ترمودینامیکی ونظری بر هم کنش آلبومین سرم انسانی با آنتی بیوتیکهای پپتیدی از گروه پلی میکسین ها، عاطقه پورسلیمان، محمد حسین کریمی جعفری، کارشناسی ارشد، 1393/12/13   - شبیه سازی دینامیک مولکولی بارگذاری داروی ضد سرطان به درون نانو لوله کربنی ، ارش براتی، محمد حسین کریمی جعفری، کارشناسی ارشد، 1393/11/1   - شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بارگذاری داروی ضدسرطان به درون نانولوله‌کربنی، آرش براتی، محمد حسین کریمی جعفری، کارشناسی ارشد، 1393/11/01   - شبیه سازی دینامیک مولکولی عملکرد کانال شبه گرامیسیدینی به عنوان یک نانو تیوب پپتیدی، َشیما آراسته، محمد حسین کریمی جعفری، کارشناسی ارشد، 1392/6/27   - پیشگویی شبکه بر هم کنش پروتئین ها به وسیله ترکیب طبقه بندها، جواد ظهیری، محمد حسین کریمی جعفری، دکتری، 1392/12/24   - بررسی محاسباتی برهمکنش مولکولی میان آنزیم تیرویناز و دو مهارگر مرجع آن (کوجیک اسید وتروپولن)، زهرا قاسمی، محمد حسین کریمی جعفری، کارشناسی ارشد، 1392/11/30   - مطالعه ترمودینامیکی و نظری برهمکنش آلبومین سرم انسانی با برخی از مشتقات سینامویل کومارین ها، آناهیتا خمری، محمد حسین کریمی جعفری، کارشناسی ارشد، 1392/11/20** |