فرزانه فرزاد

استادیار

دانشکده: علوم

گروه: شیمی

حضور در دفتر کار یا آزمایشگاه شیمی محاسباتی

سوابق تحصیلی

مقطع تحصیلی	سال اخذ مدرک	رشته و گرایش تحصیلی	دانشگاه
کارشناسی	۱۳۷۹	شیمی	پیام نور
کارشناسی ارشد	۱۳۸۳	شیمی فیزیک	فردوسی مشهد
دکترای تخصصی	۱۳۹۲	شیمی فیزیک	بیرجند

اطلاعات استخدامی

محل خدمت	عنوان سمت	نوع استخدام	نوع همکاری	پایه
بیرجند	عضو هیات علمی	پیمانی	تمام وقت	۳

سوابق اجرایی

عضو هیات علمی از سال ۱۳۹۵ تا ککنون

جوایز و تقدیر نامه ها

عضو هیات علمی از سال ۱۳۹۵ تا ککنون

موضوعات تدریس تخصصی

شیمی فیزیک

کوانتوم شیمی

طیف سنجی مولکولی

شیمی محاسباتی

ریاضی در شیمی قیزیک

فعالیت های علمی و اجرایی

عضو هیات علمی از سال ۱۳۹۵ تا ککنون

زمینه های تدریس

شیمی فیزیک

کوانتوم شیمی

طیف سنجی مولکولی

شیمی محاسباتی

ریاضی در شیمی قیزیک

مقالات در همایش ها

1. _ , H2S adsorption on hexagonal boron nitride: A DFT study, بیستمین کنگره شیمی ایران ,pp. - ,مشهد ,2018 07 17.
2. _ , Investigation of adsorption properties of CS2 on hexagonal boron nitride, بیستمین کنگره شیمی ایران ,pp. - ,مشهد ,2018 07 17.
3. _ , Monte Carlo simulation of CH4 and CO2 Adsorption and Separation in Single-Walled Carbon Nanotubes, اولین کنگره بین المللی شیمی و نانو شیمی از پژوهش تا فناوری ,pp. - ,تهران ,2018 07 11.
4. _ , Single-Walled Boron Nitride Nanotubes as Effective Adsorbent for Separation and Adsorption CO2 and CH4 Monte Carlo Simulation, اولین کنگره بین المللی شیمی و نانو شیمی از پژوهش تا فناوری ,pp. - ,تهران ,2018 07 11.
5. _ , Investigating the pi pi interaction between pyrazine and its different derivatives, ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی ,pp. - ,تهران ,2017 09 04.
6. _ , Study on the interaction of Single-Walled Carbon Nanotube with organometallic transition metal compounds, ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی ,pp. - ,تهران ,2017 09 04.

مقالات در نشریات

1. seyede leila Razavi Khoosfi,Efficient immobilization of horseradish peroxidase enzyme on transition metal carbides,Journal of Molecular Liquids,Vol. 1,No. 386,pp. 1-10,2023,ISI،JCR،Scopus.

2. ameneh zaboli arbab din mohamad,Hassan Hashemzadeh,The state of art in the prediction of efficiency and modeling of the processes of Benzene removal from water environment,Journal of Molecular Liquids,Vol. 1,No. 378,pp. 1-35,2023,ISI،JCR،Scopus.
3. parisa taherpoor,ameneh zaboli arbab din mohamad,Investigation of the effects of solvent on oxygen evolution reactions on the surface of magnesium oxide,Results in Materials,Vol. 1,No. 21,pp. 1-8,2024,Scopus.
4. Zeynab Ghasemi,ameneh zaboli arbab din mohamad,State-of-the-art predictive modeling of heavy metal ions removal from the water environment using nanotubes,Scientific Reports,Vol. 1,No. 13,pp. 1-10,2023,JCR،Scopus.
5. parisa taherpoor,ameneh zaboli arbab din mohamad,Engineering of surface-modified CuBTC-MXene nanocarrier for adsorption and co-loading of curcumin/paclitaxel from aqueous solutions for synergistic multi-therapy of cancer,Journal of Biomolecular Structure and Dynamics,Vol. 1,No. 40,pp. 1-12,2023,JCR،Scopus.
6. ameneh zaboli arbab din mohamad,Graphene Oxide Hosting a pH-Sensitive Prodrug: An In Silico Investigation of Graphene Oxide-Based Nanovehicle toward Cancer Therapy,ACS Applied Bio Materials,Vol. 1,No. 1,pp. 1-11,2023,Scopus.
7. afsaneh ghahari,Design of a hydroxy channel based on the selectivity of water permeation via ions exclusion,Npj clean water,Vol. 1,No. 6,pp. 1-9,2023,JCR.
8. seyede leila Razavi Khoosfi,Validation of an MD simulation approach for electrical field responsive micelles and their application in drug delivery,Scientific Reports,Vol. 1,No. 13,pp. 1-12,2023,JCR،Scopus.
9. Ahmad Haghi,On the role of alkanethiol Au complex in the formation of gold deposits; an in-silico approach,Chemical Geology,Vol. 1,No. 610,pp. 121101-121112,2022,JCR،Scopus.
10. ameneh zaboli arbab din mohamad,Faezeh Fallahi,Cation-pi interaction: A strategy for enhancing the performance of graphene-based drug delivery systems,Inorganic Chemistry Communications,Vol. 1,No. 141,pp. 109542-109550,2022,JCR،Scopus.
11. fatemeh najafi,Interactions of boron nitride nanosheet with amino acids of diferential polarity,Scientific Reports,Vol. 1,No. 12,pp. 11156-11168,2022,JCR،Scopus.
12. afsaneh ghahari,Proposing two-dimensional covalent organic frameworks material for the capture of phenol molecules from wastewaters,Npj clean water,Vol. 1,No. 5,pp. 1-7,2022,JCR.
13. seyede leila Razavi Khoosfi,Strategy to improve Cu-BTC metal-organic frameworks performance in removal of Rhodamine B: MD and WT-MtD simulations assessment,Npj clean water,Vol. 1,No. 5,pp. 1-8,2022,JCR.
14. Abdul Raqib Haqyar,Hassan Hashemzadeh,A strategy toward therapeutic improvement of electric feld-sensitive gemcitabine prodrugs in 2D metal–organic frameworks in view of their structure and interactions,Inorganic Chemistry Communications,Vol. 14,No. 135,pp. 109281-109288,2022,JCR،Scopus.
۱۵. حیدر رئیسی,سیده لیلا رضوی خوسفی,حسن هاشم زاده,فرزانه فرزاد،Molecular Insights into the Loading and Dynamics of Anticancer Drugs on Silicene and Folic acidconjugated Silicene nanosheets: DFT calculation and MD simulation،Journal of Biomolecular Structure and Dynamics،مجلد ۱،شماره ۳۸،شماره صفحات ۱-۲۰،۲۰۲۲،Scopus،JCR،ISI.
۱۶. فرزانه فرزاد,مریم زابلی,نفیسه رحمانی مقدم,حیدر رئیسی،Probing the adsorption and release mechanisms of cytarabine anticancer drug on/from dopamine functionalized graphene oxide as a highly efficient drug delivery system،Journal of Molecular Liquids،مجلد ۱،شماره ۳۰۱،شماره صفحات ۱۱۲۴۵۸-۲۰۲۰،۱۱۲۴۷۰،Scopus،JCR.
۱۷. فرزانه فرزاد,نفیسه رحمانی مقدم,حیدر رئیسی,مریم زابلی،Probing the adsorption and release mechanisms of cytarabine anticancer drug on/from dopamine functionalized graphene oxide as a highly efficient drug delivery system،Journal of Molecular Liquids،شماره صفحات ۰-۰،۲۰۲۰،Scopus،JCR.
۱۸. حیدر رئیسی,حسن هاشم زاده,فرزانه فرزاد،Design of New Materials Based on Functionalization of

Cu-BTC for Adsorption and Separation of CH۴ and CO۲: GCMC and MD Simulations Study،Russian Journal of Physical Chemistry A،مجلد ۷،شماره ۹۴،شماره صفحات ۱۴۱۵-۱۴۲۱،۲۰۱۹،Scopus،JCR.

۱۹. فرزانه فرزاد،زهرا قدری بورنگ،حیدر رئیسی،مهناز شهابی چشمه موسی،Molecular dynamics simulation study of Glycine tip-functionalisation of single-walled carbon nanotubes as emerging nanovectors for the delivery of anticancer drugs،MOLECULAR SIMULATION،مجلد ۱،شماره ۱،شماره صفحات ۱-۲۰۱۹،۱۲،JCR.

20. _,Development of the poly(L-histidine) grafted carbon nanotube as a possible smart drug delivery vehicle,Computers in Biology and Medicine,Vol. 11,No. 143,pp. 105336-105345,2022,JCR،Scopus.

21. seyede leila Razavi Khoosfi,Surface functionalization of graphene nanosheet with poly (l-histidine) and its application in drug delivery: covalent vs non-covalent approaches,Scientific Reports,Vol. 12,No. 1,pp. 1-9,2022,JCR،Scopus.

22. ameneh zaboli arbab din mohamad,Molecular interpretation of the carbon nitride performance as a template for the transport of anti-cancer drug into the biological membrane,Scientific Reports,Vol. 1,No. 11,pp. 18981-18993,2021,JCR،Scopus.

23. seyede leila Razavi Khoosfi,Assessment of the effect of external and internal triggers on adsorption and release of paclitaxel from the PEI functionalized silicene nanosheet: A molecular dynamic simulation,Journal of Molecular Graphics and Modelling,Vol. 1,No. 106,pp. 107930-107938,2021,JCR،Scopus.

24. afsaneh ghahari,Design of a new drug delivery platform based on surface functionalization 2D covalent organic frameworks,Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers,Vol. 1,No. 125,pp. 15-22,2021,JCR،Scopus.

25. Ali Bina,Conjugation of a smart polymer to doxorubicin through a pH-responsive bond for targeted drug delivery and improving drug loading on graphene oxide†,RSC Advances,Vol. 1,No. 11,pp. 18809-18817,2021,ISI،JCR،Scopus.

26. Ali Bina,Surface functionalization of boron nitride nanosheet with folic acid: Toward an enhancement in Doxorubicin anticancer drug loading performance,Journal of Molecular Graphics and Modelling,Vol. 1,No. 110,pp. 108041-108052,2021,JCR،Scopus.

27. _,Probing the effect of polyethene glycol on the adsorption mechanisms of Gem on the hexagonal boron nitride as a highly efficient polymerbased drug delivery system: DFT, classical MD and Well-tempered Metadynamics simulations,Journal of Molecular Graphics and Modelling,Vol. 1,No. 98,pp. 107613-107621,2020,JCR،Scopus.

28. _,Using molecular dynamics simulation to explore the binding of the three potent anticancer drugs sorafenib, streptozotocin, and sunitinib to functionalized carbon nanotubes,Journal of Molecular Modeling,Vol. 159,No. 25,pp. 0-0,2019,JCR،Scopus.

29. _,Enhance the efficiency of 5-fluorouracil targeted delivery by using a prodrug approach as a novel strategy for prolonged circulation time and improved permeation,International Journal of Pharmaceutics,No. 568,pp. 118491-0,2019,JCR،Scopus.

30. Mahnaz Shahabi,Molecular dynamics simulation study of Glycine tip-functionalisation of single-walled carbon nanotubes as emerging nanovectors for the delivery of anticancer drugs,MOLECULAR SIMULATION,pp. 0-0,2019,JCR.

31. Torkzadeh ,& Mahani Masoud,Zaboli Mahdiye,Stabilization of d-lactate dehydrogenase diagnostic enzyme via immobilization on pristine and carboxyl-functionalized carbon nanotubes, a combined experimental and molecular dynamics simulation study,ARCHIVES OF BIOCHEMISTRY AND BIOPHYSICS,Vol. 661,pp. 178-186,2019,JCR.

32. Hossein Farsi,Quantum chemical studies on molecular conformations, energetic and intramolecular hydrogen bonding in ground and electronic excited state of (thioxosilyl) ethyleneselenol,Journal of Sulfur Chemistry,Vol. 2,No. 35,pp. 152-163,2014,JCR،Scopus.

33. ,,,Theoretical Description of Substituent Effects in 2,4-Pentanedione: AIM, NBO, and NMR

.Study,Bulletin of the Chemical Society of Japan,Vol. 1,No. 85,pp. 87-92,2012,JCR،Scopus

پایان‌نامه‌ها

۱. بررسی مکانیسم جذب و رفتار دینامیکی Mof-5 به عنوان یک جاذب موثر برای حذف کلروفنل‌ها
۲. استخراج برخی از ترکیبات زیست فعال با استفاده از حلال های یوتکتیک عمیق
۳. بررسی استفاده از آنزیم ها به عنوان یک روش برای استخراج ترکیبات طبیعی از گیاهان با استفاده از محاسبات دینامیک مولکولی
۴. حذف فلزات سنگین از آب با استفاده از نانو لوله های کربنی
۵. بررسی برهمکنش داروی ضد سرطان جمسیتابین با حامل گرافن بدون عامل وعامل دار
۶. سنتز کاتالیزور منگنز-پامام تثبیت شده بر روی نانوذرات کبالت-فریت و کاربرد آن در واکنشهای اکسایش.
۷. سنتز کاتالیزور منگنز-پامام تثبیت شده بر روی نانوذرات کبالت-فریت و کاربرد آن در واکنشهای اکسایش.
۸. ارزیابی اثرپلی پیرول، میدان الکتریکی خارجی و نقص دار کردن بستر در جذب داروی جیمسیتابین برروی نانو ساختار CuBDC
۹. بررسی برهم کنش دارو ضد سرطان اپیروبیسین با سامانه های دارورسانی دو بعدی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی
۱۰. بررسی برهمکنش داروی ضد سرطان داکسروبیسین با حامل بورونیترید بدون عامل وعامل دار
۱۱. بررسی اثرات حلال بر روی واکنش های آزاد سازی اکسیژن در سطح منیزیم اکسید
۱۲. بررسی جذب، انتقال و رهایش مولکول های زیستی توسط نانو مواد نوین
۱۳. بررسی اثرات کاتیون-پای در جذب داروی دوکسوروبیسین بر روی سطح گرافن
۱۴. بررسی اثر پلی اتیلن گلیکول بر روی انرژی آزاد جذب آمینواسید های منفرد روی نانو صفحه بورنیترید
۱۵. بررسی به دام انداختن دی اکسید کربن توسط غشای دو لایه اسفینگوسین کیناز
۱۶. مکانیسم برهمگنش داروهای ضد سرطان و غشاء سلولی
۱۷. بررسی جذب، انتقال و رهایش هدفمند داروهای ضدسرطان 5-فلوروراسیل و پیرازینامید توسط نانو حامل کربن نیترید
۱۸. بررسی برهم کنش های داروهای ضد سرطان آناستروزول و ملفالان با حامل سیلیسن بدون عامل و عامل دار
۱۹. بررسی جذب داروی سیتارابین بر روی گرافن اکساید عاملدار شده
۲۰. بررسی جذب داروهای ضد سرطان استرپتوزوسین، سورافنیب، سانیتینیب بر روی نانو لوله های کربنی عاملدار شده با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی
۲۱. شبیه سازی دینامیک مولکولی بر همکنش داروهای سیتارابین،اتوپوساید،دانوروبیسین بر روی نانولوله های کربنی بدون عامل و عامل دار شده
۲۲. اثر کایرالیته و قطر نانولوله های کربنی عاملدار شده بر روی جذب 3 داروی ضد سرطان اگزمستان، لتروزول و فولوسترانت با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی
۲۳. شبیه¬سازی دینامیک مولکولی جذب داروی پاکلیتاکسل بر روی نانولوله کربنی عامل¬دار شده
۲۴. بررسی جذب داروی 5-فلوئورو اوراسیل برروی گرافن اکسید
۲۵. بررسی جذب گاز خردل بر روی گرافن
۲۶. جنب گاز HCN بر روی نانو لوله بریلیوم اکساید
۲۷. بررسی خواص الکتروشیمیایی و فتو الکتروشیمیایی نیکل تنگستات نانو ساختاری جهت کاربرد در سل های خورشیدی