

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 کنون

### جوایز و تقدیر نامه ها

عضو هیات علمی از سال ۱۳۹۵ تا کنون

### موضوعات تدریس تخصصی

شیمی فیزیک

کوانتوم شیمی

طیف سنجی مولکولی  
شیمی محاسباتی  
ریاضی در شیمی فیزیک

فعالیت های علمی و اجرایی  
عضو هیات علمی از سال ۱۳۹۵ تا کنون

زمینه های تدریس  
شیمی فیزیک  
کوانتوم شیمی  
طیف سنجی مولکولی  
شیمی محاسباتی  
ریاضی در شیمی فیزیک

#### مقالات در همایش ها

1. H2S adsorption on hexagonal boron nitride: A DFT study, \_ .pp, بیستمین کنگره شیمی ایران, - .pp, مشهد, 17 07 2018.
2. Investigation of adsorption properties of CS2 on hexagonal boron nitride, \_ .pp, بیستمین کنگره شیمی ایران, - .pp, مشهد, 17 07 2018.
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, 11 07 2018.
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, 11 07 2018.
5. Investigating the pi pi interaction between pyrazine and its different derivatives, ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی, - .pp, تهران, 04 09 2017.
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, 04 09 2017.

#### مقالات در نشریات

1. فرزانه فرزاد، عذرا هاشم زهی، سیده لیلا رضوی خوسفی، حیدر رئیسی، Significantly enhanced performance for phenol compounds removal by MOF-5 nano-composite via its surface modification, Npj clean water, مجلد ۴۴، شماره ۷، شماره صفحات ۱-۱۲، ۲۰۲۴، ISI, JCR, Scopus.
2. seyede leila Razavi Khoosfi, azra hashemzehi, Significantly enhanced performance for phenol compounds removal by MOF-5 nano-composite via its surface modification, Npj clean water, Vol. 44, No. 7, pp. 1-12, 2024, ISI, JCR, Scopus.
3. Advanced porous covalent organic framework (COF) materials for the capture of alizarin dye, and its derivatives from the aquatic environment, Applied Water Science, Vol. 8, No. 14, pp. 184-196, 2024, ISI, JCR, Scopus.
4. Sedigheh Abdollahi, Examine stability polyvinyl alcohol-stabilized nanosuspensions to

overcome the challenge of poor drug solubility utilizing molecular dynamic simulation,Scientific Reports,Vol. 1,No. 14,pp. 17386-17397,2024,ISI.JCR.Scopus

Engineered nanoparticles as Selinexor drug delivery systems across the cell membrane and, related signaling pathways in cancer cells,Journal of Molecular Graphics and Modelling,Vol. 1,No. 131,pp. 108809-108817,2024,JCR.Scopus

seyede leila Razavi Khoosfi,Graphene oxide and silicene as 2D platforms for complexation and intracellular delivery of siRNA,Journal of Drug Delivery Science and Technology,Vol. 1,No. 95,pp. 105514-105524,2024,ISI.JCR.Scopus

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

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

afsaneh ghahari,REZA AZADNEJAD,The strategy of three-dimensional Covalent Organic Frameworks to exclude dye contaminants in aqueous solutions,Npj clean water,Vol. 1,No. 7,pp. 27-39,2024,ISI.JCR.Scopus

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

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

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

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

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

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

parisa taherpoor,ameneh zaboli arbab din mohamad,Performance evaluation and efficiency of functionalized cellulose nanocomposites for the removal of pharmaceutical contaminants from the aqueous environment,Journal of Molecular Liquids,Vol. 1,No. 392,pp. 1-17,2023,ISI.JCR.Scopus

Abdul Raqib Haqyar,Hassan Hashemzadeh,A strategy toward therapeutic improvement of electric field-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

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

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

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
- 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
- fatemeh najafi, Interactions of boron nitride nanosheet with amino acids of differential polarity, *Scientific Reports*, Vol. 1, No. 12, pp. 11156-11168, 2022, JCR, Scopus
۲۳. 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 acid conjugated Silicene nanosheets: DFT calculation and MD simulation, *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, مجلد ۱, شماره ۳۸, شماره صفحات ۲۰۲۰-۲۲, ISI, JCR, Scopus
۲۴. 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 ۳۰۱, شماره صفحات ۰-۲۰۲۰, JCR, Scopus
۲۵. 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 ۰-۲۰۲۰, JCR, Scopus
۲۶. حیدر رئیسی, حسن هاشم زاده, فرزانه فرزاد, Design of New Materials Based on Functionalization of Cu-BTC for Adsorption and Separation of CH<sub>4</sub> and CO<sub>2</sub>: GCMC and MD Simulations Study, *Russian Journal of Physical Chemistry A*, مجلد ۷, شماره ۹۴, شماره صفحات ۱۴۱۵-۱۴۱۹, JCR, Scopus
۲۷. 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 ۰-۲۰۱۹, JCR
۲۸. 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
۲۹. 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
۳۰. ameneh zabol 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
۳۱. 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
۳۲. 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
۳۳. 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
۳۴. 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
۳۵. Probing the effect of polyethylene 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
36. 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
37. 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
38. 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
39. 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
40. 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
41. 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

## پایان نامه ها

۱. ارائه روش بهینه برای حذف آلاینده های دارویی دیکلوفناک و کتوپروفن از پساب های صنعتی و بیمارستانی ، مهدی براتی ، ۱۴۰۳/۶/۱۹
۲. تأثیر پلیمر جاذب غیرکووالانسی بر جذب سه داروی ضد سرطان فلوراوراسیل، تموزولوماید و تالیدوماید بر روی حامل نانولوله کربنی ، سمیه همسایگان ، ۱۴۰۳/۶/۱۰
۳. بررسی مکانیسم جذب و رفتار دینامیکی MoF-5 به عنوان یک جاذب موثر برای حذف کلروفنل ها ، عذرا هاشم زهی ، ۱۴۰۲/۶/۲۸
۴. استخراج برخی از ترکیبات زیست فعال با استفاده از حلال های یوتکتیک عمیق ، عاطفه صابری ، ۱۴۰۲/۶/۲۱
۵. بررسی استفاده از آنزیم ها به عنوان یک روش برای استخراج ترکیبات طبیعی از گیاهان با استفاده از محاسبات دینامیک مولکولی ، فاطمه طلائی ، ۱۴۰۲/۶/۱۸
۶. حذف فلزات سنگین از آب با استفاده از نانو لوله های کربنی ، زینب قاسمی ، ۱۴۰۱/۶/۲۳
۷. بررسی برهمکنش داروی ضد سرطان جمسیتابین با حامل گرافن بدون عامل و عامل دار ، زهرا نجفی راد ، ۱۴۰۰/۱۱/۲۰
۸. سنتز کاتالیزور منگنز-پامام تثبیت شده بر روی نانوذرات کبالت-فریت و کاربرد آن در واکنشهای اکسایش. ، فاطمه صالحی عامل خشمخی ، ۱۴۰۰/۱۱/۱۷
۹. سنتز کاتالیزور منگنز-پامام تثبیت شده بر روی نانوذرات کبالت-فریت و کاربرد آن در واکنشهای اکسایش. ، فاطمه صالحی عامل خشمخی ، ۱۴۰۰/۱۱/۱۷
۱۰. ارزیابی اثریلی پیرول، میدان الکتریکی خارجی و نقص دار کردن بستر در جذب داروی جیمسیتابین بر روی نانو ساختار CuBDC ، حقیر عبدالرقيب ، ۱۴۰۰/۱۱/۱۴
۱۱. بررسی برهم کنش دارو ضد سرطان اپیروبیسین با سامانه های دارورسانی دو بعدی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی ، رقيه يعقوبی ، ۱۴۰۰/۱۱/۱۳
۱۲. بررسی برهمکنش داروی ضد سرطان داکسوروبیسین با حامل بورونیتريد بدون عامل و عامل دار ، صفرعلی نظری ، ۱۴۰۰/۷/۷
۱۳. بررسی اثرات حلال بر روی واکنش های آزاد سازی اکسیژن در سطح منیزیم اکسید ، پریسا طاهرپورفیروزکوهی ، ۱۴۰۰/۶/۳۱
۱۴. بررسی جذب، انتقال و رهایش مولکول های زیستی توسط نانو مواد نوین ، حسن هاشم زاده ، ۱۴۰۰/۲/۱۵
۱۵. بررسی اثرات کاتیون-پای در جذب داروی دوکسوروبیسین بر روی سطح گرافن ، فائزه فلاحی ، ۱۳۹۹/۱۱/۹
۱۶. بررسی اثر پلی اتیلن گلیکول بر روی انرژی آزاد جذب آمینواسید های منفرد روی نانو صفحه بورنیتريد ، فاطمه نجفی ، ۱۳۹۹/۱۱/۹

۱۷. بررسی به دام انداختن دی اکسید کربن توسط غشای دو لایه اسفینگوسین کیناز ، سیده طاهره حسینی ،  
۱۳۹۸/۶/۳۰
۱۸. مکانیسم برهمگنش داروهای ضد سرطان و غشاء سلولی ، مجید پاکدل ، ۱۳۹۸/۶/۳۰
۱۹. بررسی جذب، انتقال و رهایش هدفمند داروهای ضدسرطان 5-فلوروراسیل و پیرازینامید توسط نانو حامل  
کربن نیتريد ، آمنه زابلی ارباب دین محمد ، ۱۳۹۸/۶/۲۸
۲۰. بررسی برهم کنش های داروهای ضد سرطان آناستروزول و ملفالان با حامل سیلیسن بدون عامل و عامل دار ،  
سیده لیلا رضوی خوشفی ، ۱۳۹۸/۶/۲۷
۲۱. بررسی جذب داروی سیتارابین بر روی گرافن اکساید عاملدار شده ، نفیسه رحمانی مقدم ، ۱۳۹۷/۱۱/۱۰
۲۲. بررسی جذب داروهای ضد سرطان استرپتوزوسین، سورافنیب، سانیتینیب بر روی نانو لوله های کربنی عاملدار  
شده با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی ، نرجس ده نشین ، ۱۳۹۶/۱۰/۲۶
۲۳. شبیه سازی دینامیک مولکولی بر همکنش داروهای سیتارابین، اتوپوساید، دانوروبیسین بر روی نانولوله های  
کربنی بدون عامل و عامل دار شده ، سیده اعظم موسوی بایگی ، ۱۳۹۶/۱۰/۲۴
۲۴. اثر کایرالیته و قطر نانولوله های کربنی عاملدار شده بر روی جذب 3 داروی ضد سرطان آگزمستان، لتروزول و  
فولوسترانت با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی ، زهرا قدری بورنگ ، ۱۳۹۶/۱۰/۲۰
۲۵. شبیه سازی دینامیک مولکولی جذب داروی پاکلیتاکسل بر روی نانولوله کربنی عامل-دار شده ، حسن هاشم  
زاده ، ۱۳۹۵/۶/۲۰
۲۶. بررسی جذب داروی 5-فلوئورو اوراسیل بر روی گرافن اکسید ، فاطمه صفدری ، ۱۳۹۴/۷/۲۲
۲۷. بررسی جذب گاز خردل بر روی گرافن ، سمانه پاسبان موشکی ، ۱۳۹۴/۷/۲۱
۲۸. جنب گاز HCN بر روی نانو لوله برلیوم اکساید ، مینا مروی خیابانی ، ۱۳۹۳/۶/۲۴
۲۹. بررسی خواص الکتروشیمیایی و فتو الکتروشیمیایی نیکل تنگستات نانو ساختاری جهت کاربرد در سل های  
خورشیدی ، سیدامیرحسین حسینی ، ۱۳۹۲/۷/۱۶