## حیدر رئیسی

استاد

دانشکده: علوم

گروه: شیمی

### سوابق تحصیلی

| مقطع تحصیلی | سال اخذ مدرک | رشته و گرایش تحصیلی | دانشگاه |
|---|---|---|---|
| کارشناسی | ۱۳۷۱ | شیمی-شیمی کاربردی | سیستان بلوچستان |
| کارشناسی ارشد | ۱۳۷۳ | شیمی- شیمی فیزیک | بیرجند |
| دکترای تخصصی | ۱۳۸۱ | شیمی-شیمی فیزیک | فردوسی مشهد |

### اطلاعات استخدامی

| محل خدمت | عنوان سمت | نوع استخدام | نوع همکاری | پایه |
|---|---|---|---|---|
| دانشگاه بیرجند | عضو هیات علمی | رسمی قطعی | تمام وقت | ۲۰ |

## سوابق اجرایی

–سال ۱۳۸۱ شروع به کار در دانشگاه بیرجند به عنوان عنوان عضو هیئت علمی پیمانی
سال ۱۳۸۲ تا ۱۳۹۰ – معاونت بخش شیمی و نماینده تحصیلات تکمیلی گروه
سال ۱۳۹۰ تا ۱۳۹۳ – مدیر گروه شیمی
سال ۱۳۹۲ تا ۱۳۹۳ – مسئول امور پژوهشی دانشکده علوم
۱۳۹۶سال ۱۳۹۳ تا - معاونت آموزشی دانشگاه بیرجند
سال ۱۳۹۶-۱۳۹۷ - معاونت اداری و مالی دانشگاه بیرجند

## جوایز و تقدیر نامه ها

سال ۱۳۹۷-۱۳۹۶-۱۳۹۴-۱۳۹۲-۱۳۸۵ پژوهشگر نمونه دانشگاه
سال ۱۳۹۷-۱۳۹۲-۱۳۹۱-۱۳۸۴ استاد نمونه

## موضوعات تدریس تخصصی

شیمی فیزیک- کوانتوم- طیف سنجی- دینامیک مولکولی

## زمینه های تدریس

شیمی فیزیک- کوانتوم- طیف سنجی- دینامیک مولکولی

## مقالات در همایش ها

۱. حیدر رئیسی,کامل مائده,مرسلی علی،Quantum mechanical study of the interaction of DNA pyrimidine bases with Flutamide anticancer،ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی،شماره صفحات -،تهران،۲۰۱۷ ۰۹ ۰۴.

۲. حیدر رئیسی,زهرا کمالی,فریبا ملانیا،The effect of substituted F and CH۳ on the structure and the HBS in the N-hydroseleno-Nthioxoimidoformamide compound،دهمین همایش ملی شیمی دانشگاه پیام نور،شماره صفحات -،کرمان،۲۰۱۲ ۱۰ ۱۰.

۳. حیدر رئیسی,سعیده سهیلی,فریبا ملانیا،Theoretical study of substitution effect on strength of the IHB in (Z)-N-(nitrosomethylene)selenohydroxylamine،دهمین همایش ملی شیمی دانشگاه پیام نور،شماره صفحات -،کرمان،۲۰۱۲ ۱۰ ۱۰.

۴. حیدر رئیسی,شهیرا اسلام‌دوست جامی,فریبا ملانیا،Effect of substitution CH۳ and F on the intramolecular hydrogen bonding of ۳-Amino-propeneselenal DFT AIM and NBO studies،دهمین همایش ملی شیمی دانشگاه پیام نور،شماره صفحات -،کرمان،۲۰۱۲ ۱۰ ۱۰.

۵. حیدر رئیسی,زهرا کمالی,مهدی یوسفیان سقی،Investigation of stable conformers in (thioxosilyl) ethyleneselenol compond،دهمین همایش ملی شیمی دانشگاه پیام نور،شماره صفحات -،کرمان،۲۰۱۲ ۱۰ ۱۰.

۶. حیدر رئیسی,سعیده سهیلی,مهدی یوسفیان سقی،Theoretical study on intramolecularr hydrogen bonding in ۳-Hydroxy-propeneselenal title compound،دهمین همایش ملی شیمی دانشگاه پیام نور،شماره صفحات -،کرمان،۲۰۱۲ ۱۰ ۱۰.

۷. حیدر رئیسی,شهیرا اسلام‌دوست جامی,مهدی یوسفیان سقی،Theoretical Study the molecular structure and intramolecular hydrogen bond energies conformers of ۳-Amino-propeneselenal (APS) Energetic NBO and AIM analyses،دهمین همایش ملی شیمی دانشگاه پیام نور،شماره صفحات -،کرمان،۲۰۱۲ ۱۰ ۱۰.

۸. حیدر رئیسی,حکم آبادی لیلا،Theoretical comparison of ۱ ۱ ۱-Trifluoro-۴-mercapto-but-۳-ene-۲-thione and ۴ ۴ ۴-Trifluoro-۳-thioxo-butanethial conformers،دهمین همایش ملی شیمی دانشگاه پیام نور،شماره صفحات -،کرمان،۲۰۱۲ ۱۰ ۱۰.

۹. حیدر رئیسی,خانمحمدی آزاده،-۱ Theoretical study of the intramolecular hydrogen bond strength in (thionitrosomethylene) hydrazine AIM and NBO studies)،دهمین همایش ملی شیمی دانشگاه پیام نور،شماره صفحات -،کرمان،۲۰۱۲ ۱۰ ۱۰.

۱۰. حیدر رئیسی,خانمحمدی آزاده،-N-(Z) S H . . .S intramolecular hydrogen bonds in mercaptothionitrosomethanimine The influence of external agents on -electron Delocalization،دهمین همایش ملی شیمی دانشگاه پیام نور،شماره صفحات -،کرمان،۲۰۱۲ ۱۰ ۱۰.

۱۱. حیدر رئیسی,حکم آبادی لیلا،A theoretical study of the photochromic compound ۳-(۲ ۵-Dimethyl-thiophen-۳-ylmethylene)-۴-methylene-dihydro-furan-۲.۵-dione،دهمین همایش ملی شیمی دانشگاه پیام نور،شماره صفحات -،کرمان،۲۰۱۲ ۱۰ ۱۰.

۱۲. حیدر رئیسی،Theoretical study of substitution effect on strength of the intramolecular hydroge bond in (Z)-N-،دومین کنفرانس مهندسی صنایع،شماره صفحات -،یزد،۲۰۰۳ ۰۲ ۱۸.

۱۳. حیدر رئیسی,زهرا کمالی,فریبا ملانیا،The effect of substituted F and CH۳ on the structure and the strength of hydrogen bond in the N-hydroseleno-Nthioxoimidoformamide compound،دومین کنفرانس مهندسی صنایع،شماره صفحات -،یزد،۲۰۰۳ ۰۲ ۱۸.

14. _ ,Sensitivity mechanism of single-walled carbon nanotube as a drug delivery system toward the anticancer drug molecules, بیستمین کنگره شیمی ایران ,pp. - ,مشهد ,2018 07 17.

15. Mortazavi far Azam ,A computational study on the electronic properties of single walled boron nitride nanotube as carrier for Carmustine molecule by DFT, بیستمین کنگره شیمی ایران ,pp. - ,مشهد ,2018 07 17.

16. _ ,Theoretical study of adsorption behaviour of Thioguanine anticancer drug on the surface

of fullerene C60 nanocage, بیستمین کنگره شیمی ایران, .pp - ,مشهد ,17 07 2018.
17. _ , Theoretical Study on Adorption of methane molecule on nanostructured functionlized, بیستمین کنگره شیمی ایران, .pp - ,مشهد ,17 07 2018. Graphnene with hydroxyl and epoxide
18. _ , Adsorption of Cr and Pd transition metal atoms on the pristine Zinc oxide nanotube a DFT, بیستمین کنگره شیمی ایران, .pp - ,مشهد ,17 07 2018. approach
19. _ , Single-Walled Boron Nitride Nanotubes as Effective Adsorbent for Separation and, اولین کنگره بین المللی شیمی و نانو شیمی از پژوهش تا فناوری, .pp - ,تهران ,11 07 2018. Adsorption CO2 and CH4 Monte Carlo Simulation
20. _ , Monte Carlo simulation of CH4 and CO2 Adsorption and Separation in Single-Walled, اولین کنگره بین المللی شیمی و نانو شیمی از پژوهش تا فناوری, .pp - ,تهران ,07 2018. Carbon Nanotubes
.11
21. _ , Adsorption and Diffusion of CH4 CO2 N2O and SO2 gases on MOF-5 Molecular Dynamics, ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی, .pp - ,تهران ,04 09 2017. study
22. _ , 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. ششمین
23. _ , Molecular Dynamics Simulationstudy of Adsorption and Diffusion of CH4 and CO2 gases, ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی, .pp - ,تهران ,04 09 2017. onHUKST-1
24. _ , Comprehensive Theoretical investigation of N2O gas adsorption on the single- wall carbon, ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی, .pp - ,تهران ,04 09 2017. nanotube
25. _ , Study on the interaction of Single-Walled Carbon Nanotube with organometallic transition, ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی, .pp - ,تهران ,04 09 2017. metal compounds
26. _ , Insight into the Interaction between anticancer drug melphalan and functionalized carbon, ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی, .pp - ,تهران ,04 09 2017. nanotube Density Functional Theory
27. _ , Interaction of anticancer drug melphalan with carbone nanotube surface as a nanocarrier, ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی, .pp - ,تهران ,04 09 2017. A Quantum Mechanical Approach
28. _ , Graphen oxide nanosheet A DFT study of NMR and NQR parameters, ششمین کنفرانس بین المللی شیمی، پلیمر و مهندسی شیمی, .pp - ,تهران ,04 09 2017.
29. _ , Sulfur mustard gas adsorption on single-layer aluminum nitride nanostructures A DFT, پنجمین همایش بین المللی شیمی، مهندسی شیمی و نانو ایران, .pp - ,تهران ,31 08 2017. STUDY
30. farzad farzaneh ,Investigation the intermolecular hydrogen bonding between DNA thymine سومین کنفرانس بین المللی دستاوردهای نوین پژوهشی در شیمی و مهندسی شیمی, .pp - ,تهران ,23 09 2016. base dimer and its different derivatives
31. farzad farzaneh ,Investigation of the As Ga B and N-doped (6 0) aluminum phosphide سومین کنفرانس بین المللی دستاوردهای نوین پژوهشی در شیمی و مهندسی شیمی, .pp - ,تهران ,23 09 2016. nanotubes interactions with H2S gas DFT study
32. _ , First-principles investigation of armchair aluminum phosphide nanotube for sensing, هجدهمین کنگره شیمی ایران, .pp - ,سمنان ,30 08 2015. phosgene
33. _ , The HCN adsorption on the outer surface of aluminum phosphide nanotube, هجدهمین کنگره شیمی ایران, .pp - ,سمنان ,30 08 2015. هجدهمین
34. Maasoumeh Jafarpour ,Structure and Properties of the Second and Third Generation هجدهمین کنگره شیمی ایران, pp. 262-262, سمنان ,30 08 2015. Manganese-oxo Porphyrins in the Presence of Imidazole A Comparative DFT Study
35. Maasoumeh Jafarpour ,Quantum-Chemical study on the Stacking Interactions between High هجدهمین کنگره شیمی ایران, pp. 263-263, سمنان ,30 08 2015, Valent oxo-Manganese Porphyrin Nanoparticles
36. Mola Adeleh ,investigation of pristine and Pd-Doped SWCNT as a Sensor for chemical, هفدهمین کنفرانس شیمی فیزیک ایران - دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی ,.pp -819, تهران ,21 10 2014. sensing of formaldehyde

37. A computational assessment of molecular structure intramolecular hydrogen bond and, _ ,شانزدهمین کنفرانس شیمی فیزیک ایران ,HNMR of hydrogeno- ethaneselenal ,بابلسر ,pp. 959-960 ,29 10 2013.
38. DFT study of the rotation barrier electronic structure intramolecular hydrogen bond, _ ,شانزدهمین ,topological parameters and aromaticity indices in (Z)-(nitrosomethylene)hydrazine کنفرانس شیمی فیزیک ایران ,pp. 957-958 ,بابلسر ,2013 10 29.
39. Theoretical study of intermolecular interaction between oxalic acidandH O NH NH CH, _ ,شانزدهمین کنگره شیمی ایران دانشگاه یزد ,pp. 1027-1027 ,یزد ,2013 09 07.
40. Hossein Farsi ,Preparation and electrochemical capacitive behaviors of nanostructured molybdenum oxides ,پانزدهمین سمینار شیمی فیزیک ایران ,pp. - ,تهران ,2012 09 03.
41. Hossein Farsi ,The Electrochemical Studies of Sol Gel Prepared Nanostructured Nickel Titanate ,چهاردهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران ,pp. - ,تهران ,2012 08 28.
42. Hossein Farsi ,On the Effects of Electrolyte on the Capacitive Bbehavior of Nanostructured Molybdenum Oxides ,سومین کنفرانس نانو ساختارها ,pp. 713-717 ,کیش ,2010 03 10.
43. Hossein Farsi ,Electrodeposition of nanostructured molybdenum oxide and its capacitive behavior ,دهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران ,pp. - ,زاهدان ,2008 05 14.

## مقالات در نشریات

1. Seyed Yousef Mosavian,Meissam Noroozifar,Mohammad Ali Karimi Zarchi,Zeinab Hamidi,Najmeh Sabbaghi,Derivatives of [P4-VP] 2% DVB as corrosion inhibitors for St-37 in 1 M H2SO4: an experimental and theoretical investigations,Polymer bulletin,Vol. 1,No. 1,pp. 1-30,2022,JCR،Scopus.
2. Mohammad Yahya Hanafi-Bojd,Milad Iranshahy,Asghar Zarban,The combination of polyphenols and phospholipids as an efficient platform for delivery of natural products,Scientific Reports,Vol. 1,No. 13,pp. 1-20,2023,JCR،Scopus.
۳. فرزانه فرزاد,عذرا هاشم زهی,سیده لیلا رضوی خوسفی,حیدر رئیسی،Significantly enhanced performance for phenol compounds removal by MOF-۵ nano-composite via its surface modification،Npj clean water،مجلد ۴۴،شماره ۷،شماره صفحات ۱-۱۲،۲۰۲۴،Scopus،JCR،ISI.
4. 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.
5. 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.
6. Halimeh Mirsalari,Afsaneh Maleki,Azim Soltanabadi,The assessment of boron nitride nanotubes and functionalized carbon nanotubes as containers for anticancer drug delivery of dacarbazine and effect of urea on adsorption process by molecular dynamics,Structural Chemistry,Vol. 3,No. 33,pp. 871-882,2022,JCR،Scopus.
۷. حیدر رئیسی,افسانه قهاری,سجاد اخضری،Architectural design of ۲D covalent organic frameworks (COFs) for pharmaceutical pollutant removal،Npj clean water،مجلد ۳۱،شماره ۷،شماره صفحات ۱-۱۵،۲۰۲۴،Scopus،JCR،ISI.
۸. حیدر رئیسی,افسانه قهاری،Ionic liquids and Graphene: The ultimate combination for High-Performance supercapacitors،Journal of Molecular Liquids،مجلد ۴۰،شماره ۴۰۱،شماره صفحات ۱۲۴۵۲۳-۱۲۴۵۴۵،۲۰۲۴،Scopus،JCR،ISI.
9. 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.
10. Molecular mechanism of drug transport and release through zeolitic imidazole framework,_ nanospheres for versatile drug delivery applications,Journal of Molecular Liquids,Vol. 1,No. 371,pp. 120822-120829,2023,JCR،Scopus.

11. 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.
12. 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.
13. Gholamreza Jafari,Ali Saberinasab,Phosphatidylcholine in the tear film of the eye: enhanced topical delivery of fluorometholone to the eye,Inorganic Chemistry Communications,Vol. 1,No. 150,pp. 110506-110511,2023,JCR،Scopus.
14. 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.
15. ameneh zaboli arbab din mohamad,roghayyeh yaghoubi,Assessment of two-dimensional materials on the biological membrane permeability of Epirubicin anti-cancer drug,Applied Surface Science,Vol. 1,No. 610,pp. 155557-155563,2022,JCR،Scopus.
16. 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.
17. 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.
18. 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.
19. _ A new insight into the transfer and delivery of anti- SARS-CoV-2 drug Carmofur with the assistance of graphene oxide quantum dot as a highly efficient nanovector toward COVID-19 by molecular dynamics simulation†,RSC Advances,Vol. 22,No. 12,pp. 14167-14174,2022,ISI،JCR،Scopus.
20. 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.
۲۱. حیدر رئیسی,سمانه پاسبان موشکی، New insights into Hexakis macrocycles as a novel nano-carrier for highly potent anti-cancer treatment: A new challenge in drug delivery،Colloids and Surfaces B: Biointerfaces،مجلد ۱۹۷،شماره ۲۰۲،شماره صفحات ۱-۸،۲۰۲۱،JCR،Scopus.
۲۲. حیدر رئیسی,حلیمه میرسالاری,افسانه مالکی,عظیم سلطان ابادی، Investigation of the Pristine and Functionalized Carbon Nanotubes as a Delivery System for the Anticancer Drug Dacarbazine: Drug Encapsulation،Journal of Pharmaceutical Sciences،مجلد ۲،شماره ۲۰،شماره صفحات ۲۰۰۵-۲۰۱۶،۲۰۲۱،Scopus،JCR،ISI.
۲۳. حیدر رئیسی,رابعه خرم پور,حسین شکی,علی مرسلی,حسن هاشم زاده، The scrutinised DFT and MD studies on the adsorption of D-penicillamine drug on □-Fe۲O۳ nanoparticle as a highly efficient carrier،MOLECULAR SIMULATION،مجلد ۱۶،شماره ۴۶،شماره صفحات ۱-۱۱،۲۰۲۰،JCR.
۲۴. حیدر رئیسی,علی عرب,نجمه داستانی، DFT computational study towards investigating Cladribine anticancer drug adsorption on the graphene and functionalized graphene،Structural Chemistry،مجلد ۳۱،شماره ۳۱،شماره صفحات ۱۶۹۱-۱۷۰۵،۲۰۲۰،Scopus،JCR.
۲۵. حیدر رئیسی,حیدر مرادنیا,مهناز شهابی چشمه موسی، The performance of the single-walled carbon nanotube covalently modified with polyethylene glycol to delivery of Gemcitabine anticancer drug in the aqueous environment،Journal of Biomolecular Structure and Dynamics،مجلد ۱،شماره ۳۴،شماره صفحات ۱-۹،۲۰۲۰،Scopus،JCR،ISI.
۲۶. 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 ۱-۲۰۲۰،۲۲،Scopus،JCR،ISI.
۲۷. حیدر رئیسی,حسن هاشم زاده،Understanding dual delivery of doxorubicin and paclitaxel with boron nitride and phosphorene nanosheets as highly efficient drug delivery systems،Journal of Biomolecular Structure and Dynamics،مجلد ۱،شماره ۳۴،شماره صفحات ۱-۲۰۲۰،۶،Scopus،JCR،ISI.
۲۸. حیدر رئیسی,مجید پاکدل,سیده طاهره حسینی،Evaluation the synergistic antitumor effect of methotrexate–camptothecin codelivery prodrug from selfassembly process to acid-catalyzed both drugs release: A comprehensive theoretical study،JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY،مجلد ۱۶،شماره ۴۱،شماره صفحات ۱۴۸۶-۲۰۲۰،۱۴۹۶،Scopus،JCR،ISI.
۲۹. حیدر رئیسی,مهناز شهابی چشمه موسی،The transport of Idarubicin therapeutic agent using a novel graphene sheet as a drug delivery platform through a biomembrane،Journal of Molecular Liquids،مجلد ۱،شماره ۲۹۷،شماره صفحات ۱-۲۰۲۰،۶،Scopus،JCR.
۳۰. حیدر رئیسی,مهناز شهابی چشمه موسی،Two dimensional porous frameworks of graphyne family as therapeutic delivery vehicles for Idarubicin biomolecule in silico: Density functional theory and molecular dynamics simulation،Journal of Molecular Liquids،مجلد ۱،شماره ۳۱۹،شماره صفحات ۱-۲۰۲۰،۶،Scopus،JCR.
۳۱. حیدر رئیسی,مریم زابلی,مهدیه زابلی،Investigation of nanotubes as the smart carriers for targeted delivery of mercaptopurine anticancer drug،Journal of Biomolecular Structure and Dynamics،مجلد ۱،شماره ۳۹،شماره صفحات ۱-۲۰۲۰،۱۴،Scopus،JCR،ISI.
۳۲. حیدر رئیسی,علی صابری نصب,حسن هاشم زاده،Predicting the efficiency of polyethylene glycol-functionalised graphene in delivery of temozolomide anticancer drug and investigating the effect of pH on the drug release process: DFT and free energy calculations،MOLECULAR SIMULATION،مجلد ۱۸،شماره ۴۶،شماره صفحات ۱-۲۰۲۰،۱۰،JCR.
۳۳. حیدر رئیسی,نجمه داستانی,علی عرب،DFT study of Ni-doped graphene nanosheet as a drug carrier for multiple sclerosis drugs،Computational and Theoretical Chemistry،مجلد ۱۰،شماره ۱۱۹۶،شماره صفحات ۱۱۳۱۱۴-۱۱۳۱۲۵،۲۰۲۰،Scopus،JCR.
۳۴. حیدر رئیسی,مهدیه کامل,حسن هاشم زاده,کمال محمدی فرد،Theoretical elucidation of the amino acid interaction with graphene and functionalized graphene nanosheets: insights from DFT calculation and MD simulation،Amino Acids،مجلد ۴،شماره ۵۲،شماره صفحات ۱۴۶۵-۱۴۷۸،۲۰۲۰،Scopus،JCR،ISI.
۳۵. 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،۰،۲۰۲۰،Scopus،JCR.
۳۶. 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 ۱۱۲۴۵۸-۱۱۲۴۷۰،۲۰۲۰،Scopus،JCR.
۳۷. 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.
۳۸. 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.
39. _ ,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.
40. _ ,PNIPAM/Hexakis as a thermosensitive drug delivery system for biomedical and pharmaceutical applications (vol 12, 14363, 2022),Scientific Reports,Vol. 1,No. 12,pp.

.1-12,2022,JCR،Scopus
41. 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.
42. Design of new drug delivery platform based on surface functionalization of black,_ phosphorus nanosheet with a smart polymer for enhancing the efficiency of doxorubicin in the treatment of cancer,Journal of Biomedical Materials Research Part A,Vol. 1,No. 109,pp. 1912-1921,2021,JCR،Scopus.
43. Nanotechnology-based approaches for targeting and delivery of drugs via Hexakis (m-PE),_ macrocycles,Scientific Reports,Vol. 1,No. 11,pp. 8256-8263,2021,JCR،Scopus.
44. 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.
45. 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.
46. 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.
47. Mohammad Mehdi Firoozabadi,Influence of high-electronegativity atoms on the 7 Be decay rate,Physical Review C,Vol. 1,No. 102,pp. 14606-14606,2020,JCR،Scopus.
48. 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.
49. Mortazavifar Azam,Comparative prediction of binding affinity of Hydroxyurea anti-cancer to boron nitride and carbon nanotubes as smart targeted drug delivery vehicles,Journal of Biomolecular Structure and Dynamics,pp. 1-11,2019,ISI،JCR،Scopus.
50. Understanding loading, diffusion and releasing of Doxorubicin and Paclitaxel dual delivery,_ in graphene and graphene oxide carriers as highly efficient drug delivery systems,Applied Surface Science,No. 500,pp. 144220-0,2019,JCR،Scopus.
51. Molecular Insight into Adsorption Affinities of Carmustine Drug on Boron and,خرم پور Nitrogen Doped Functionalized Single-walled Carbon Nanotubes Using Density Functional Theory Including Dispersion Correction Calculations and Molecular Dynamics Simulation,Journal of Biomolecular Structure and Dynamics,Vol. 16,No. 38,pp. 4817-4826,2019,ISI،JCR،Scopus.
52. 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.
53. Assessment of dynamical properties of mercaptopurine on the peptide-based,_ metal–organic framework in response to experience of external electrical fields: a molecular dynamics simulation,Journal of Molecular Modeling,Vol. 304,No. 25,pp. 0-0,2019,JCR،Scopus.
54. Loading and release of anticancer drug from phosphorene as a template material with high,_ efficient carrier: From vacuum to cell membrane,Journal of Molecular Liquids,Vol. 1,No. 291,pp. 111346-0,2019,JCR،Scopus.
55. 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.
56. A density functional theory-based analysis of the structural, topological and electronic,, properties of Gemcitabine drug adsorption on the pyrrolidine functionalized single-walled carbon

nanotube,Journal of Biomolecular Structure and Dynamics,Vol. 10,No. 37,pp. .2477-2486,2019,ISI،JCR،Scopus

.57 Theoretical investigation insights into the temperature triggered tegafur anticancer drug,_ release from the surface of graphene oxide nanosheet,Journal of Biomolecular Structure and .Dynamics,pp. 0-0,2019,ISI،JCR،Scopus

.58 Predicting doxorubicin drug delivery by singlewalled carbon nanotube through cell,_ membrane in the absence and presence of nicotine molecules: a molecular dynamics simulation .study,Journal of Biomolecular Structure and Dynamics,pp. 0-0,2019,ISI،JCR،Scopus

.59 Carbon and boron nanotubes as a template material for adsorption of 6-Thioguanine,_ chemotherapeutic: a molecular dynamics and density functional approach,Journal of .Biomolecular Structure and Dynamics,pp. 0-0,2019,ISI،JCR،Scopus

.60 Density functional theory study towards investigating the adsorption properties of the □-,,, Fe2O3 nanoparticles as a nanocarrier for delivery of Flutamide anticancer drug,Adsorption,pp. .1-15,2019,JCR،Scopus

.61 Understanding the role of hydrogen bonds in destruction of DNA by screening interactions,, of Flutamide anticancer drug with nucleotides bases: DFT perspective, MD simulation and free .energy calculation,Adsorption,pp. 0-0,2019,JCR،Scopus

.62 Ali Arab,Najme Dastani,,Adsorption of Ampyra anticancer drug on the graphene and functionalized graphene as template materials with high efficient carrier,Adsorption,Vol. 1,No. .26,pp. 879-893,2019,JCR،Scopus

.63 Hossein Farsi,Shokufeh Moghiminia,Andrew Riley,Zhihai Li,The effects of electrolyte on the capacitive behavior of nanostructured molybdenum oxides,JOURNAL OF CHEMICAL .TECHNOLOGY AND BIOTECHNOLOGY,Vol. 12,No. 94,pp. 3800-3805,2019,ISI،JCR،Scopus

.64 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

.65 A combined molecular dynamics simulation and quantum mechanics study on,_ mercaptopurine interaction with the cucurbit 67 urils Analysis of electronic structure,Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy,Vol. 188,pp. .647-658,2018,JCR،Scopus

.66 Boosting BeONT Reactivity with HCN by Calcium and Magnesium Doping A DFT,_ Investigation of Electronic Structure AIM NMR NQR and NBO Analysis,Journal of Cluster .Science,Vol. 29,pp. 101-110,2018,JCR،Scopus

.67 Density functional theory calculations and molecular dynamics simulations of the,_ adsorption of ellipticine anticancer drug on graphene oxide surface in aqueous medium as well as under controlled pH conditions,Journal of Molecular Liquids,Vol. 255,pp. .269-278,2018,JCR،Scopus

.68 Assessment of the chitosan-functionalized graphene oxide as a carrier for loading,_ Thioguanine an antitumor drug and effect of urea on adsorption process Combination of DFT computational and Molecular Dynamics Simulation Studies,Journal of Biomolecular Structure .and Dynamics,pp. 1-38,2018,ISI،JCR،Scopus

.69 Kamel Maedeh,Morsali Ali,Assessment of the adsorption mechanism of Flutamide anticancer drug on the functionalized single-walled carbon nanotube surface as a drug delivery vehicle An alternative theoretical approach based on DFT and MD,Applied Surface Science,Vol. 434,pp. .492-503,2018,JCR،Scopus

.70 Khorram Rabeeh,Morsali Ali,The computational study of the -Fe2O3 nanoparticle as Carmustine drug delivery system DFT approach,Journal of Biomolecular Structure and .Dynamics,Vol. 2,No. 37,pp. 454-464,2018,ISI،JCR،Scopus

.71 Mortazavifar Azam,Theoretical Prediction of Adsorption Properties of Carmustine Drug on Various Sites of the Outer Surface of the Single-Walled Boron Nitride Nanotube and Investigation

of Urea Effect on Drug Delivery by DFT and MD,Journal of Cluster Science,Vol. 29,No. 1,pp. .93-99,2018,JCR،Scopus
.72 Comprehensive theoretical prediction of the dynamics and stability properties of Tegafur,_ pharmaceutical agent on the Graphene based nanostructures in aqueous environment,Applied .Surface Science,Vol. 455,pp. 32-36,2018,JCR،Scopus
.73 Covalent organic framework as smart and high efficient carrier for anticancer drug delivery,_ a DFT calculations and molecular dynamics simulation study,Journal of Physics D: Applied .Physics,Vol. 51,pp. 345401-,2018,JCR،Scopus
.74 Assessment of solvent effects on the inclusion behavior of pyrazinamide drug into cyclic,_ peptide based nanotubes as novel drug delivery vehicles,Journal of Molecular Liquids,Vol. .268,pp. 326-334,2018,JCR،Scopus
.75 Bakhtiari Akbar,Moradnia Heidar,A density functional theory-based analysis of the structural topological and electronic properties of Gemcitabine drug adsorption on the pyrrolidine functionalized single-walled carbon nanotube,Journal of Biomolecular Structure and .Dynamics,Vol. 10,No. 37,pp. 2477-2486,2018,ISI،JCR،Scopus
.76 Khorram Rabeeh,Analysis of the structures energetics and vibrational frequencies for the hydrogen-bonded interaction of nucleic acid bases with Carmustine pharmaceutical agent a .detailed computational approach,Structural Chemistry,Vol. 29,pp. 1165-1174,2018,JCR،Scopus
.77 Akbari Alireza,Mortazavifar Azam,DFT and MD investigations on the functionalized boron nitride nanotube as an effective drug delivery carrier for Carmustine anticancer drug,Journal of .Molecular Liquids,Vol. 276,pp. 577-587,2018,JCR،Scopus
.78 Assessment of the chitosan-functionalized graphene oxide as a carrier for loading,_ Thioguanine, an antitumor drug and effect of urea on adsorption process: Combination of DFT computational and Molecular Dynamics Simulation Studies,Journal of Biomolecular Structure .and Dynamics,Vol. 10,No. 37,pp. 2487-2497,2018,ISI،JCR،Scopus
.79 The computational study of the □-Fe2O3 nanoparticle as Carmustine drug delivery system:,, .DFT approach,Journal of Biomolecular Structure and Dynamics,pp. 0-0,2018,ISI،JCR،Scopus
.80 Maasoumeh Jafarpour,Screening of different interactions in oxo-manganese porphyrin dimers containing axial N-donor ligands a theoretical study,RSC Advances,Vol. 8,pp. .9770-9774,2018,ISI،JCR،Scopus
.81 DFT Calculations and Molecular Dynamics Simulation Study on the Adsorption of 5-,_ Fluorouracil Anticancer Drug on Graphene Oxide Nanosheet as a Drug Delivery Vehicle,Journal of Inorganic and Organometallic Polymers and Materials,Vol. 27,No. 3,pp. .805-817,2017,JCR،Scopus
.82 The functionalization of carbon nanotubes to enhance the efficacy of the anticancer drug,_ paclitaxel a molecular dynamics simulation study,Journal of Molecular Modeling,Vol. 23,No. .8,pp. 222-232,2017,JCR،Scopus
.83 Solvent/co-solvent effects on the electronic properties and adsorption mechanism of,_ anticancer drug Thioguanine on Graphene oxide surface as a nanocarrier Density functional theory investigation and a molecular dynamics,Applied Surface Science,Vol. 422,pp. .1030-1041,2017,JCR،Scopus
.84 Investigation of graphene-based nanomaterial as nanocarrier for adsorption of paclitaxel,_ anticancer drug a molecular dynamics simulation study,Journal of Molecular Modeling,Vol. .23,pp. 36-43,2017,JCR،Scopus
.85 DFT and MD study of adsorption sensitivity of aluminium phosphide nanotube towards,_ .some air pollutant gas molecules,MOLECULAR SIMULATION,Vol. 43,No. 9,pp. 675-690,2017,JCR
.86 Evaluation of solvent and ion effects upon leflunomide adsorption characteristics on (60),_ zigzag single-walled carbon nanotube and immobilized dihydroorotate dehydrogenase activity A computational DFT and experimental study,Journal of Molecular Liquids,Vol. 231,pp. .528-541,2017,JCR،Scopus

87. Assessment of DFT Calculations and Molecular Dynamics Simulation on the Application of,_ Zinc Oxide Nanotube as Hydrogen Cyanide Gas Sensor,Journal of Inorganic and Organometallic .Polymers and Materials,Vol. 1,pp. 1-8,2017,JCR،Scopus
88. Screening of the structural topological and electronic properties of the functionalized,_ Graphene nanosheets as potential Tegafur anticancer drug carriers using DFT method,Journal of .Biomolecular Structure and Dynamics,Vol. 1,pp. 1-13,2017,ISI،JCR،Scopus
89. Khorram Rabeeh,Morsali Ali,Assessment of solvent effects on the interaction of Carmustine drug with the pristine and COOH-functionalized single-walled carbon nanotubes A DFT .perspective,Journal of Molecular Liquids,Vol. 240,pp. 87-97,2017,JCR،Scopus
90. Shaki Hosein,Morsali Ali,Hakimi Mohammad,Beyramabadi Ali,Mechanistic energetic and structural studies of single-walled carbon nanotubes functionalized with penicillamine,Journal of .the Serbian Chemical Society,Vol. 82,No. 1,pp. 1-14,2017,JCR،Scopus
91. Doped-SiCNT as a promising sensor for detection of CS2 molecule,Journal of Sulfur,_ .Chemistry,Vol. 38,No. 4,pp. 372-383,2017,JCR،Scopus
92. Kamel Maedeh,Morsali Ali,Theoretical study of solvent and co-solvent effects on the interaction of Flutamide anticancer drug with Carbon nanotube as a drug delivery system,Journal .of Molecular Liquids,Vol. 248,pp. 490-500,2017,JCR،Scopus
93. Investigation of the molecular structure electronic properties AIM NBO NMR and NQR,_ parameters for the interaction of Sc Ga and Mg-doped (6 0) aluminum nitride nanotubes with COCl2 gas by DFT study,JOURNAL OF INCLUSION PHENOMENA AND MACROCYCLIC .CHEMISTRY,Vol. 84,No. 1,pp. 99-114,2016,JCR،Scopus
94. Solvent effects on the structural electronic properties and intramolecular N H O hydrogen,_ bond strength of 5-aminomethylene-pyrimidine-2 4 6 trion with DFT calculations,Journal of .Molecular Liquids,Vol. 215,pp. 77-87,2016,JCR،Scopus
95. Solvent effects on the stability and the electronic properties of histidine/Pd-doped single-,,, walled carbon nanotube biosensor,Journal of Molecular Liquids,Vol. 214,pp. .313-318,2016,JCR،Scopus
96. Theoretical calculations of intramolecular hydrogen bond of the 2-Amino-2 4 6-,_ cycloheptatrien-1-one in the gas phase and solution Substituent effects and their positions,Journal of Theoretical and Computational Chemistry,Vol. 15,No. 7,pp. .1650063-1650087,2016,JCR،Scopus
97. Molecular dynamics simulation and quantum chemical studies on the investigation of,_ aluminum nitride nanotube as phosgene gas sensor,JOURNAL OF INCLUSION PHENOMENA AND .MACROCYCLIC CHEMISTRY,Vol. 86,No. 3,pp. 305-322,2016,JCR،Scopus
98. farzad Farzaneh,DFT study of the adsorption of H2S H2Se and SO2 gas molecules on the surface of Fullerene,International Journal of Advanced Biotechnology and Research,Vol. 7,No. .5,pp. 1227-1232,2016,ISI
99. Farzad Farzaneh,First-principles investigation of graphene sheet for sensing carbon dioxide,International Journal of Advanced Biotechnology and Research,Vol. 7,No. 5,pp. .1233-1238,2016,ISI
100. The influence of nicotine on pioglitazone encapsulation into carbon nanotube the,_ investigation of molecular dynamic and density functional theory,Journal of Biomolecular .Structure and Dynamics,Vol. 7,pp. 1-15,2016,ISI،JCR،Scopus
101. A theoretical study on the structure of 2-amino-1 3 4-thiadiazole and its 5-substituted,,, derivatives in the gas phase water THF and DMSO solutions,Journal of Molecular Liquids,Vol. .203,pp. 137-142,2015,JCR،Scopus
102. Structural QTAIM thermodynamic properties bonding aromaticity and NMR analyses of,_ cation interactions of mono and divalent metal cations ( Li Na K Be2,Journal of Theoretical and .Computational Chemistry,Vol. 14,No. 6,pp. 1550044-1550076,2015,JCR،Scopus
103. The analysis of electronic structures adsorption properties NBO QTAIM and NMR,_

parameters of the adsorbed hydrogen sulfide on various sites of the outer surface of aluminum .phosphide nanotube a DFT study,Structural Chemistry,Vol. 26,pp. 1059-1075,2015,JCR،Scopus

.104 Investigation of adsorption properties of CS2 on interior and exterior surfaces of single-,_ walled silicon-carbide nanotubes and effect of applied electric field electronic structure charge .density and NMR studies,RSC Advances,Vol. 5,pp. 84022-84037,2015,ISI،JCR،Scopus

.105 Effects of the HCN adsorption on the structural and electronic parameters of the beryllium,_ .oxide nanotube,Structural Chemistry,Vol. 1,pp. 1-15,2015,JCR،Scopus

.106 Quantum chemical study on influence of the substitution effect on the structural and,_ electronic properties and intramolecular hydrogen bonding of 2-nitrophenyl hydrosulfide in .ground and electronic excited state,Structural Chemistry,Vol. 26,pp. 971-987,2015,JCR،Scopus

.107 The hybrid of Pd and SWCNT (Pd loaded on SWCNT) as an efficient sensor for the,, formaldehyde molecule detection A DFT study,Sensors and Actuators B: Chemical,Vol. 212,pp. .55-62,2015,ISI،JCR،Scopus

.108 Maasoumeh Jafarpour,A DFT investigation of axial N-donor ligands effects on the high valent manganese-oxo meso-tetraphenyl porphyrin,Journal of Porphyrins and .Phthalocyanines,Vol. 19,pp. 651-662,2015,JCR،Scopus

.109 Maasoumeh Jafarpour,Stereoelectronic effects of porphyrin ligand on the oxygen transfer efficiency of high valent manganese-oxo porphyrin species A DFT study,Journal of Porphyrins .and Phthalocyanines,Vol. 19,pp. 1130-1139,2015,JCR،Scopus

.110 Maasoumeh Jafarpour,Significant hydrogen-bonding effect on the reactivity of high-valent manganese(V) oxo porphyrins in C H bond activation A DFT study,Journal of Porphyrins and .Phthalocyanines,Vol. 19,pp. 1197-1203,2015,JCR،Scopus

.111 Molecular structure and bonding character of mono and divalent metal cations (Li Na K,, Be2 Mg2 and Ca2 ) with substituted benzene derivatives AIM NBO and NMR analyses,Structural .Chemistry,Vol. 25,pp. 1327-1342,2014,JCR،Scopus

.112 Mohammad ali Nasseri,Ali Allahresani,Grafting of a chiral Mn(iii) complex on graphene oxide nanosheets and its catalytic activity for alkene epoxidation,RSC Advances,Vol. 4,pp. .26087-26094,2014,ISI،JCR،Scopus

.113 Mohammad ali Nasseri,Ali Allahresani,Mild oxidation of alkenes catalyzed by Fe3O4/SiO2 nanoparticles,Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis,Vol. 112,pp. .397-408,2014,JCR،Scopus

.114 Molecular structure conformational stability energetic and intramolecular hydrogen,_ bonding in ground and electronic excited state of 3-mercapto propeneselenal,Structural .Chemistry,Vol. 25,pp. 1153-1164,2014,JCR،Scopus

.115 Theoretical study of substituents effects on characteristics of resonance-assisted,_ hydrogen bond in (Z)-(thionitrosomethylene)hydrazine and its derivatives in ground and .electronic excited state,Structural Chemistry,Vol. 25,pp. 1099-1109,2014,JCR،Scopus

.116 Immunosuppressive agent leflunomide A SWNTs-immobilized dihydroortate,_ dehydrogenase inhibitory effect and computational study of its adsorption properties on zigzag single walled (6 0) carbon and boron nitride nanotubes as controlled drug delivery .devices,European Journal of Pharmaceutical Sciences,Vol. 56,pp. 37-54,2014,JCR،Scopus

.117 Comprehensive study of the structural and electronic properties of complexes formed by,_ .M z (Li Na K Be 2 Mg 2,Journal of Sulfur Chemistry,Vol. 36,pp. 48-66,2014,JCR،Scopus

.118 Electronic structures intramolecular hydrogen bond interaction and aromaticity of,_ substituted 4-amino-3-penten-2-one in ground and electronic excited state,Structural .Chemistry,Vol. 25,No. 6,pp. 505-505,2014,JCR،Scopus

.119 Mohammad ali Nasseri,Ali Allahresani,A new application of nano-graphene oxide as a heterogeneous catalyst in crossed,Iranian Journal of Catalysis,Vol. 4,No. 1,pp. .33-40,2014,isc،Scopus

.120 Hossein Farsi,Comparative optical and electrochemical studies of nanostructured NiTiO3

and NiTiO3-TiO2 prepared by a low temperature modified Sol-Gel route,Electrochimica Acta,Vol. .132,pp. 512-523,2014,JCR،Scopus
.121 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
.122 Khanmohammadi Azadeh,yoosefian mehdi,Ab initio and DFT studies on 1- (thionitrosomethylene) hydrazine conformers energies and intramolecular hydrogen-bond .strength,Structural Chemistry,Vol. 24,No. 4,pp. 1123-1133,2013,JCR،Scopus
.123 CONFORMATIONAL PROPERTIES AND INTRAMOLECULAR HYDROGEN BONDING OF 3-,_ AMINO-PROPENESELENAL AN AB INITIO AND DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDIES,Journal .of Theoretical and Computational Chemistry,Vol. 12,pp. 1350025-1350033,2013,JCR،Scopus
.124 Hossein Farsi,THEORETICAL INVESTIGATION OF SUBSTITUTION EFFECT IN 3-MERCAPTO- PROPENETHIAL,Journal of Theoretical and Computational Chemistry,Vol. 12,pp. .1350045-1350078,2013,JCR،Scopus
.125 Molecular structure vibrational assignments conformational stability ground and excited,_ state hydrogen-bonding analysis of 2-Nitroso vinyl amine,Journal of Theoretical and .Computational Chemistry,Vol. 12,pp. 1350072-1350100,2013,JCR،Scopus
.126 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. 35,pp. 152-163,2013,JCR،Scopus
.127 Substituent effect on the reaction mechanism of proton transfer in,_ formamide,International Journal of Quantum Chemistry,Vol. 112,pp. .2378-2381,2012,JCR،Scopus
.128 Hajiabadi H, Nowroozi A.R,Hasani M,Mohammadzadeh Jahani P,A comparative study of open-close and related rotamers methods to evaluate the intramolecular hydrogen bond energies in 3-imino-propen-1-ol and its derivatives,International Journal of Quantum Chemistry,Vol. 112,pp. .1384-1391,2012,JCR،Scopus
.129 The effect of substitution on structure intramolecular hydrogen bonding strength electron,_ density and resonance in 3-amino 2-iminomethyl acryl aldehyde,Journal of Theoretical and .Computational Chemistry,Vol. 11,No. 5,pp. 925-939,2012,JCR،Scopus
.130 Hydrogen bond studies in substituted imino-acetaldehyde oxime,Computational and,_ .Theoretical Chemistry,Vol. 996,pp. 68-75,2012,JCR،Scopus
.131 Comprehensive study of the interaction between hydrogen halides and methanol,_ .derivatives,International Journal of Quantum Chemistry,Vol. 112,pp. 2782-2786,2012,JCR،Scopus
.132 Theoretical study on -aminoacroleine Density functional theory atoms in molecules theory,_ and natural bond orbitals studies,Journal of Chemical Sciences,Vol. 124,No. 3,pp. .731-739,2012,JCR،Scopus
.133 Synthesis and theoretical study of intramolecular hydrogen bond at two possible positions,_ .in pyrazolo 1 2-b phthalazine,Chinese Journal of Chemistry,Vol. 30,pp. 779-784,2012,JCR،Scopus
.134 Conformational study of the (z)- (2-iminoethylidone)silyl amine at the MP2 DFT and,_ .G2MP2 levels,Computational and Theoretical Chemistry,Vol. 983,pp. 1-6,2012,JCR،Scopus
.135 Conformational study molecular structure and S..HN S..HN intramolecular hydrogen bond,_ in thioformyl-3-aminoacrylaldehyde,Journal of Sulfur Chemistry,Vol. 33,No. 1,pp. .75-85,2012,JCR،Scopus
.136 Nowroozi A.,Evaluation of the origin of conformational and tautomeric preferences in N- formylformamide - A quantum chemical study,International Journal of Quantum Chemistry,Vol. .112,pp. 489-497,2012,JCR،Scopus
.137 Hakimi Mohammad,Kukovec Boris ,& Marko,Pouyanmehr Leila,Mohr Fabian,Esther Schuh,Solvent Free synthesis and crystal structure of s-cis and s-trans N N-bis (2-hydroxy .cyclohexyl ethane-1 2-diamine),Structural Chemistry,Vol. 24,pp. 81-88,2012,JCR،Scopus

.138 shakhs Imampour Jalal,Karimi Mohammad,Theoretical Description of Substituent E ects in
2 4-Pentanedione AIM NBO and NMR Study,Bulletin of the Chemical Society of Japan,Vol. 85,No.
.1,pp. 87-92,2012,JCR،Scopus
.139 Theoretical study on - aminoacrolein Density functional theory atoma in molecules theory,,
and natural bond orbitals studies,Journal of Chemical Sciences,Vol. 124,No. 3,pp.
.731-739,2012,JCR،Scopus
.140 A comparative study in 3-imino-propen-1-ol and its derivatives,International Journal of,,,,
.Quantum Chemistry,Vol. 112,pp. 1384-1391,2012,JCR،Scopus
.141 Maasoumeh Jafarpour,Stoeckli ,& Evans Helen,Economical Oxygenation of Olefins and
Sulfides Catalyzed by New Molybdenum(VI) Tridentate Schiff Base Complexes Synthesis and
Crystal Structure,Zeitschrift fur Anorganische und Allgemeine Chemie,Vol. 638,No. 6,pp.
.1023-1030,2012,JCR،Scopus
.142 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
.143 Substituent effect on structure electron density and intramolecular hydrogen bonding in,,,
nitroso-oxime methane,International Journal of Quantum Chemistry,No. 111,pp.
.3505-3516,2011,JCR،Scopus
.144 Hajiabadi H,Jahani P.M,Reinvestigation of intramolecular hydrogen bond in malonaldehyde,
derivatives An ab initio AIM and NBO study,International Journal of Quantum Chemistry,No.
.111,pp. 3040-3047,2011,JCR،Scopus
.145 Nowroozi A.R, Roohi H, Poorsargol M,Jahani P.M,Hajiabadi H,N-H S and S-H N
intramolecular hydrogen bond in -thioaminoacrolein A quantum chemical study,International
.Journal of Quantum Chemistry,No. 111,pp. 3008-3016,2011,JCR،Scopus
.146 Nowroozi A.R,Ab initio and DFT computational studies on molecular conformations and
strength of the intramolecular hydrogen bond in different conformers of 3-amino-2-iminomethyl
.acryl aldehyde,Journal of Molecular Structure-theochem,No. 966,pp. 299-305,2011,ISI،JCR
.147 Nowroozi A.R, Roohi H,Hajiabadi H,Khalilinia E, Birgan M.N,O-H S intramolecular hydrogen
bond in thiomalonaldehyde derivatives A quantum chemical study,Journal of Molecular
.Structure-theochem,No. 963,pp. 517-524,2011,ISI،JCR
.148 Hossein Farsi,,Theoretical study of the effects of substitution solvation and structure on the
interaction between nitriles and methanol,International Journal of Quantum Chemistry,Vol.
.112,pp. 1273-1284,2011,JCR،Scopus
.149 Maasoumeh Jafarpour,Factors affecting the reactivity and selectivity in the oxidation of
sulfides with tetra-n-butylammonium peroxomonosulfate catalyzed by Mn (III) porphyrins
.Significant nitrogen donor effects,Polyhedron,Vol. 30,pp. 592-598,2011,JCR،Scopus
.150 Hossein Farsi,,On the pseudocapacitive behavior of nanostructured molybdenum
.oxide,JOURNAL OF SOLID STATE ELECTROCHEMISTRY,Vol. 14,pp. 643-650,2010,JCR،Scopus
.151 Hossein Farsi,gobal ferydoon,The pH effects on the capacitive behavior of nanostructured
molybdenum oxide,JOURNAL OF SOLID STATE ELECTROCHEMISTRY,Vol. 14,pp.
.681-686,2010,JCR،Scopus
.152 The effects of substituitions on structure electron density resonance and intramolecular,,,,
hydrogen bonding strength in a mercapto-propenethial,Journal of Molecular Structure-
.theochem,Vol. 960,pp. 1-9,2010,ISI،JCR
.153 Hossein Farsi,Intramolecular hydrogen bonding in 3-imino-propenylamine Theoretical
investigations,International Journal of Quantum Chemistry,Vol. 109,pp.
.1609-1616,2009,JCR،Scopus
.154 Flotation separation and electrotermal atomic absorption spectrometric determination of
.thallium in wastewater samples,Annali di Chimica,No. 96,pp. 17-23,2006,ISI،JCR

# پایان‌نامه‌ها

۱. ارائه روش بهینه برای حذف آلاینده های دارویی دیکلوفناک و کتوپروفن از پساب های صنعتی و بیمارستانی
۲. تأثیر پلیمر جاذب غیرکووالانسی بر جذب سه داروی ضد سرطان فلوراوراسیل، تموزولومایدو و تالیدومایدبر روی حامل نانولوله کربنی
۳. بررسی مکانیسم جذب و رفتار دینامیکی Mof-5 به عنوان یک جاذب موثر برای حذف کلروفنل‌ها
۴. استخراج برخی از ترکیبات زیست فعال با استفاده از حلال های یوتکتیک عمیق
۵. بررسی استفاده از آنزیم ها به عنوان یک روش برای استخراج ترکیبات طبیعی از گیاهان با استفاده از محاسبات دینامیک مولکولی
۶. ارزیابی اثرپلی پیرول، میدان الکتریکی خارجی و نقص دار کردن بستر در جذب داروی جیمسیتابین برروی نانو ساختار CuBDC
۷. بررسی برهم کنش دارو ضد سرطان اپیروبیسین با سامانه های دارورسانی دو بعدی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی
۸. بررسی امکان کاهش عوارض جانبی داروی ضدسرطانی دوکسربیسین بوسیله دارورسانی هوشمند و دارورسانی ترکیبی
۹. بررسی برهمکنش داروی ضد سرطان داکسروبیسین با حامل بورونیترید بدون عامل وعامل دار
۱۰. بررسی اثرات حلال بر روی واکنش های آزاد سازی اکسیژن در سطح منیزیم اکسید
۱۱. مطالعه برهمکنش داروی ضد سرطان دوکسوروبیسین با حامل گرافن اکسید و نقش پیش داروی پلی بتا مالیک اسید در رهایش داروی ضد سرطان بررسی شده
۱۲. تأثیر عوامل محیطی بر تغییرات میزان واپاشی هسته‌ای
۱۳. بررسی جذب، انتقال و رهایش مولکول های زیستی توسط نانو مواد نوین
۱۴. بررسی اثر پلی اتیلن گلیکول بر روی انرژی آزاد جذب آمینواسید های منفرد روی نانو صفحه بورنیترید
۱۵. بررسی اثر پلی اتیلن گلیکول بر روی انرژی آزاد جذب آمینواسید های منفرد روی نانو صفحه بورنیترید
۱۶. بررسی اثرات کاتیون-پای در جذب داروی دوکسوروبیسین بر روی سطح گرافن
۱۷. مکانیسم برهمگنش داروهای ضد سرطان و غشاء سلولی
۱۸. بررسی به دام انداختن دی اکسید کربن توسط غشای دو لایه اسفینگوسین کیناز
۱۹. بررسی جذب، انتقال و رهایش هدفمند داروهای ضدسرطان 5-فلوروراسیل و پیرازینامید توسط نانو حامل کربن نیترید
۲۰. بررسی برهم کنش های داروهای ضد سرطان آناستروزول و ملفالان با حامل سیلیسن بدون عامل و عامل دار
۲۱. بررسی جذب داروی سیتارابین بر روی گرافن اکساید عاملدار شده
۲۲. مطالعه محاسباتی پایداری سامانه های نوین دارورسانی برای جذب، رهاسازی و انتقال داروها
۲۳. بررسی برهم کنش داروهای ضد سرطان با نانو مواد
۲۴. مطالعه بر هم کنش بین نانولوله های مختلف با برخی داروهاو آلاینده ها
۲۵. مطالعه برهم کنش بین نانو لوله های کربنی و بورن نیترید با برخی ترکیبات داروئی به منظور استفاده از آن ها در رسانش و رهایش دارو و بررسی اثرات مهار آنزیمی آن ها
۲۶. بررسی جذب داروهای ضد سرطان استرپتوزوسین، سورافنیب، سانیتینیب بر روی نانو لوله های کربنی عاملدار شده با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی
۲۷. شبیه سازی دینامیک مولکولی بر همکنش داروهای سیتارابین،اتوپوساید،دانوروبیسین بر روی نانولوله های کربنی بدون عامل و عامل دار شده
۲۸. 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
۲۹. مطالعه بر هم کنش بین نانولوله سیلیکون کاربید و مولکول دی سولفید کربن همچنین بررسی برهمنش بین نانولوله های سیلیکون کاربید و بورون نیترید با برخی ترکیبات داروئی به منظور استفاده از ان ها در رسانش و رهایش دارو
۳۰. شبیه¬سازی دینامیک مولکولی جذب داروی پاکلیتاکسل بر روی نانولوله کربنی عامل¬دار شده
۳۱. بررسی عوامل موثر بر ماهیت و کارایی کاتالیزوری فلز – اکسو در اکسو پوروفیرین ها و پلی اکسومتالاتهای نانو ساختاری
۳۲. " بررسی برهمکنش متان با Mof-5 و پیامدهای آن برای طراحی و توسعه MOF های جدید
۳۳. بررسی جذب داروی 5-فلوئورو اوراسیل برروی گرافن اکسید
۳۴. بررسی جذب گاز خردل بر روی گرافن

۳۵. ارزیابی برخی رنگها و نیمه رساناهای نانوساختاری جهت کاربرد در سل های خورشیدی
۳۶. بررسی جذب گاز متیل مرکاپتان روی نانو لوله بور نیترید
۳۷. سنتز کمپلکسهای نیکل و مس5- استیل باربیتوریک اسید و مطالعه پایداری کوانتوم مکانیکی و توزیع بار در آنها
۳۸. بررسی جذب گاز فشردن بر روی نانو لوله های آلومینیوم نیترید
۳۹. جنب گاز HCN بر روی نانو لوله بریلیوم اکساید
۴۰. بررسی ذفتار الکتروشیمی رودامین بی بر روی الکترود کربن شیشه ای وتیتانیوم دی اکسید ناو ساختاری
۴۱. بررسی اثر استخلاف بر روی ساختار الکترونی، طیفهای ارتعاشی NMRپیوند هیدروژنی درون مولکولی و پارمترهای وابسته به رزوناسدر ترکیب 2- (E- ایمینو متیل) بنزن تیول در فاز گازی و محلول آبی
۴۲. بررسی پیوند هیردوژنی دوتایی در ترکیب 2- بورانیل - اتن تیول
۴۳. بررسیاثر استخلاف بر روی فرایند انتقال پروتون و قدرت پیوند هیدروژنی درون مولکولی در ترکیب 4- نیتروپیریدین -3-تیولو مطالعه اثر حلا در این فرایند
۴۴. اندازه گیری مقادیر ناچیز اورانیوم محلول در آب با پیریدین -2و6- دی کربوکسیلیک اسید به روش اسپکتروفلورمتری
۴۵. سنتز نانو ذرات Cds/Znsکوانتومی پوشیده شده با اسیارتیک اسید و بررسی پاره ای از مشخصات تجزیه ای مهم آن
۴۶. سنتز نانو ذرات کوانتومی znse پوشیده وشده با تیروزین و کاربرد آن در اندازه گیری هیپوکلریت در آب
۴۷. سنتز نانو ذرات Cdse پوشیده شده با لیگاند 2- مرکاپتونیکوتینیک اسید و استفاده از آن برای شنایایی و اندازه گیری کروم (VI) موجود در آب
۴۸. گونه شناسی و تعیین مقادیر ناچیز یونهای سریم به روش اسپکتروفلورومتری با استفاده از ترکیب 1 و4 دی آمینو آنتراکینون
۴۹. بررسی حذف اسیدهای آروماتیک متدوال از آب طی فرایند یک مرحله ای با استفاده از نانو ذرات کائولن به روش اسپکتروفلورمتری
۵۰. بررسی نظری صورت بندی ساختار، پیوند هیدورژنی درون مولوکولی، طیف ارتعاشی و NMR ترکیب 3- آمینو-پروپن- سلنال و مطالعه اثر استخلاف بر روی آن
۵۱. بررسی صورت بندی های ترکیب (3-(Z2 – هیدروکسی پروپ – 2- ان سلنال و مطالعه اثر استخلاف بر روی فرایند انتقال پروتون در ترکیب N- هیدروسلنو – N- اکسوایمیدوفرمامید
۵۲. تغلیط همزمان (TH)vاو U(IV) از محلول های آبی با استفاده از زرین پلیمری با رورسازی شده با 3 – هیدروکسی نفتالین 2- کربوکسیلیک اسید
۵۳. بررسی نظری اثرات فضایی، الکترون دهندگی و الکترون کشندگی گروه های استخلافی بر روی ساختار الکترونی طیف های ارتعاشی و NMR ترکیب 4- سلنوکسو – بوت – 2 – انال و مطالعه صورت بندی های 3- مرکاپتو – پروپن سلنال
۵۴. بررسی صورت بندی های ترکیب (2- (Z (تیوکسوسلیسل) اتیلن سلنول و مطالعه اثر استخلاف بر روی ساختار، دانسیته الکترونی و قدرت پیوند هیدروژنی در تکیب N- هیدروسلنو –N تیوکسوایمیدوفرمامید
۵۵. سنتز ((4- متیل – 6- مورفالینو – 5- نیترو پیریمیدنین 2- ایل ) آمیز) پروپانوئیک اسید، بررسی خواص و ثابت پایداری کمپلکس های آن با دسته ای از فلزات
۵۶. سنتز2،2 –((5-برمو-6-متیل پیریمیدین -2،4 دی ایل) بیس (آزانیدیل) دی پروپانوییک اسید، بررسی خواص و ثابت پایداری کمپلکس های آن با دسته ای از فلزات
۵۷. بررسی نانو ذرات کوانتومی Cds پوشده شده از سیستین به عنوان ردیاب فلوئور سانس یون آرسنیک
۵۸. بررسی واکنش آلومینیوم (III) با 3-هیدروکسی -نفتالین-2-کربوکسیلیک اسید به روش اسپکترو فلوریمتری و کاربد آن در اندازه گیری آلومینیوم موجود در نمونه های آب-
۵۹. سنتز نانو ذرات کوانتومی cds پوشیده شده با 2 و 2-دی تیودیبنزوئیک اسید و مطالعه اندرکنش آن با تعدادی از یون های فلزات واسطه
۶۰. بررسی نظری صورت بندی های ترکیب آمینو-اکسو-دی تیو استیک اسید و مطالعه اثر استخلاف روی این ترکیب و ترکیب ایمینو - دی تیو استیک اسید
۶۱. بررسی واکنش انتقال پروتن در ترکیب 2( Z---I-آمینواتیلیدین سیلان آمین و اثر استخلاف بر روی آن و مطالعه صورت بندی های سد چرخشی این ترکیب
۶۲. بررسی اثر استخلاف برروی قدرت پیوند هیدروزنی درون مولکولی و رزونانس در ترکیب 2z هیدروکسی سیلیلن استالدئید و مطالعه صورت بندی های این ترکیب
۶۳. تععین پتانسیومتری ثابت پایداری کمپلکس های فنیل آلانین با یون های فلزی دوظرفیتی کبالت نیکل مس

روی و سرب در مخلوط های حلال آبی - آلی ارزیابی پارامترهای ترمودینامیکی فنیل آلانین و مطالعه صورت بندهای آلانین
۶۴. تعیین ثابت پایداری کمپلکسهای کبالت نیکل مس روی سرب آهن یا اسید آمینه هیستیدین در حلال آب دی اکسان در محدوده دمایی 25-40 درجه سانتیگراد به روش پتانسیومتری و مطالعه صورت بندی های هیستیدین
۶۵. سنتز ساختار فعالیت کاتالیزوری و مطالعه تئوری بر روی کمپلکس های شیف باز مولیبدن و وانادیوم
۶۶. مطالعه اصولی برهم کنش برخی از یون های فلزی دوظرفیتی با نانوذرات پوشیده Cds توسط مرکاپتو سوکسینیک اسید به عنوان ردیاب فلورسانس
۶۷. اندازه گیری مستقیم نیتریت در آب با استفاده از ترکیبات آمینوآنتراکینون به روش اسپکتروفتومتری مشتقی
۶۸. انتقال پروتون این ترکیب و توابع پتانسیل آنها
۶۹. مطالعه نظری کنفومرهای ترکیب 3-آمینو2-ایمینومتیل آکریل آلدهید و بررسی واکنش انتقال پروتون در استخلاف های این ترکیب و توابع پتانسیل آنها
۷۰. سنتز مایعات یونی و کاربرد جدید آنها به عنوان حلال های سبز در واکنشهای آلی
۷۱. بررسی ساختاروصورت بندیهای ترکیبات3_آمینو_3_هیدروکسی2_نیترو_اکریلامیدونیتروزواکسیم متان وبررسیاثراستخلاف درترکیب نیتروزواکسیم متان
۷۲. بررسی نظری ساختار،پایداری و پیوند هیدروژنی درون مولکولی در صورت بندهای 3_آمینو_5_تیوکسو_پنت_2_انال
۷۳. بررسی حذف اسیدهای آمینه آروماتیک متداول از آب طی فرآیند یک مرحله ای با استفاده از ارگانوبنتونیت به روش اسپکتروفلومتری
۷۴. تعیین ثابت تشکیل کمپلکس های یون های فلزی مسII رویII نیکلII کبالتII و سربII با تریپتوفان در حلال آب-دی اکسان،ارزشیابی پارامترهای ترمودینامیکی و مطالعه کانفورمرهای تریپتوفان
۷۵. مدلسازی ترمودینامیکی انرژی آزاد در نانو کلاستر DNA با دندرونایز پلیمر
۷۶. بررسی برهم کنشهای بین مولکولی و پیوند هیدروژنی در جفت بازهای ادنین تیمین
۷۷. گونه شناسی و اندازه گیری نیترات/نیتریت در آب با استفاده از ترکیب 1-آمینو آنتراکینون به دو روش اسپکتروفتو متری و اسپکترو فلورومتری
۷۸. مطالعه صورت بندی های تیروزین تعیین ثابت های ژایداری تشکیل کمپلکس اسید آمینه تیروزین با یون های فلزی با استفاده از روش زروم با کاربرد نرم افزار BEST
۷۹. ساخت و بررسی الکتروشیمیایی اکسید مولیبدن نانو ساختاری
۸۰. سنتز و بررسی صورت بندی ساختمان طیف سنجی ارتعاشی و پیوند هیدروژنی درون مولکولی در ترکیبات آمینو باربیتوریک اسید ومتیل آمینوبابیتوریک اسید
۸۱. بررسی پیوند هیدروژنی SHO و مطالعه طیف سنجی ارتعاشی و پیوند هیدروژنی در ترکیب 4-اتیل آمینو-پنت-3-ان-2-ان
۸۲. بررسی حذف آمین های آروماتیک متداول از آب طی فرایند یک مرحله ای با استفاده از بنتونیت به روش اسپکتروفلورومتری
۸۳. گونه شناسی کروم (III)/(VI) در آب به روش استخراج فاز جامد با استفاده از نانوذرات ZRO واندازه گیری نهایی به روش اسپکترومتری و اسپکتروفلوریمتری با استفاده از کیورستین به عنوان یک آنتی اکسیدان طبیعی
۸۴. گونه شناسی و تعیین مقادیر ناچیز یونهای کروم در آب به روش اسپکتروفتومتری و اسپکتروفلوریمتری با استفاده از ترکیب 1و4- در آمینوآنتراکینون
۸۵. رزینهای بارور شده توسط حلال جداسازی و تغلیظ مقادیر ناچیز برخی از یونهای فلزی موجود در آب به روش جریانی و اندازه گیری آنها با روش جذب اتمی
۸۶. مطالعه ساختمانی کی لیتهای روی ،مس،کادمیم و نیکل با کنیزارین و تعیین ثابت پایداری آنها به روش اسپکتروفتومتری
۸۷. مطالعه ثابت تشکیل کمپلکس کاتیون های فلزی با تریپتوفان به روش پتانسیومتری و تعیین پایدارترین ساختار مولکولی آن به روش محاسبات مکانیکی کوانتوم
۸۸. بررسی صورت بندی ،ساختمان ،طیف سنجی ارتعاشی ترکیب3-آمینو-4،4،4-تری فلورو1-فنیل2-بوتن1-ان
۸۹. تعیین پایدارترین ساختار مولکولی فنیل آنالین و مطالعه ثابت پایداری کمپلکس های این اسید امینه با یونهای فلزیZn,Fe,Ni,Cu,Co
۹۰. تهیه،بررسی پیوند هیدروژنی درون مولکولی ،تفسیر طیف ارتعاشی و مطالعه صورت بندهای ترکیب 2-آمینومتیلن مالنالدهید همراه با محاسبات AIM و NBO
۹۱. بررسی نظری اثر استخلاف الفا بر ساختار و قدرت پیوند هیدروژنی استیل استون، تجزیه و تحلیل لاتین AIM و NBO

۹۲. بررسی صورت بندی ،ساختمان ، طیف سنجی ارتعاشی نظریه AIM و پیوند هیدروژنی درون مولکولی در ترکیب تری فلوروبنزوئیل استون