

# به نام خداوند یکتا

## رزومه علمی



### اطلاعات فردی

دکتر مهدی شکوریان فرد جهرمی

۱۳۶۱/۱/۵

استان فارس-جهرم

متأهل

خراسان جنوبی- بیرجند، دانشگاه صنعتی بیرجند، عضو هیأت علمی گروه مهندسی

شیمی- اتاق ۲۱۸- تلفن: ۰۵۶-۳۲۳۹۱۲۳۳

m\_shakori1361@yahoo.com,

mehdi.shakorian27@gmail.com, shakourian@birjandut.ac.ir

نام و نام خانوادگی:

تاریخ تولد:

محل تولد:

وضعیت تأهل:

آدرس محل کار:

آدرس ایمیل:

### سوابق تحصیلی

سال اخذ مدرک	محل تحصیل	رشته و گرایش تحصیلی	مقطع تحصیلی
۱۳۸۴	دانشگاه فردوسی-مشهد	شیمی محض	کارشناسی
۱۳۸۷	دانشگاه صنعتی شریف- تهران	شیمی آلی (محاسباتی)	کارشناسی ارشد
۱۳۹۳	دانشگاه صنعتی شریف- تهران	شیمی آلی (تجربی-محاسباتی)	دکتری
۱۳۹۱-۱۳۹۲	دانشگاه میسوری-کلمبیا (آمریکا)- ۱۰ ماه	-	فرصت مطالعاتی

پسادکتری  
فرصت مطالعاتی  
در جامعه و صنعت

پژوهشگاه شیمی و مهندسی شیمی ایران-۶ ماه ۱۳۹۳-۱۳۹۴  
شرکت درخشان ماکارون پارس-۳ ماه تابستان ۱۴۰۰

مقطع تحصیلی	عنوان پروژه / پروپوزال	اساتید راهنما / مشاور
کارشناسی	اندازه گیری اسیدهای چرب آزاد در پلاسماي خون با روش تیتراسیون	دکتر راضیه جلال
کارشناسی ارشد	بررسی خواص ترموشیمی نوکلئوباز تیمین و داکسی تیمیدین به روش محاسباتی	دکتر علیرضا فتاحی
دکتری	بررسی نظری ساختار و خواص الکترونی مایعات یونی و جذب آنها بر روی سطوح گرافن و بور-نیتريد؛ سنتز $\alpha$ -آمینو فسفوناتها با استفاده از نانو ذرات مغناطیسی $Fe_3O_4$	دکتر علیرضا فتاحی (راهنمای اول) دکتر محمد محمودی هاشمی (راهنمای دوم) دکتر زهرا جمشیدی (مشاور)

### اطلاعات استخدامی

محل خدمت	عنوان سمت	مرتبۀ علمی	نوع استخدام	نوع همکاری	پایه	سال استخدام
دانشگاه صنعتی بیرجند	عضو هیأت علمی	دانشیار	رسمی قطعی	تمام وقت	۱۰	بهمن ۱۳۹۴

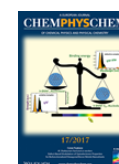
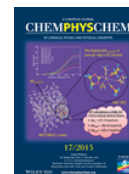
### سوابق اجرایی

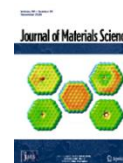
- سرپرست آزمایشگاه مرکزی در دانشگاه صنعتی بیرجند از تاریخ ۱۳۹۶/۷/۱۹ تا ۱۳۹۷/۱۲/۱
- سرپرست اداره تربیت بدنی دانشگاه صنعتی بیرجند از تاریخ ۱۳۹۷/۱۲/۱ تا ۱۴۰۱/۱/۸
- عضو اصلی گروه تخصصی بررسی تخلفات پژوهشی دانشگاه صنعتی بیرجند از تاریخ ۱۳۹۵/۱۰/۲۶ تا ۱۳۹۶/۱۰/۲۶
- عضو اصلی شورای پژوهشی دانشگاه صنعتی بیرجند از تاریخ ۱۳۹۸/۸/۲۸ تاکنون
- عضو حقیقی شورای نظارت و ارزیابی دانشگاه صنعتی بیرجند از تاریخ ۱۳۹۸/۱۰/۱۵ تا ۱۳۹۹/۱۱/۱۵
- نائب رئیس کمیته فنی ISIRI/ISO/TC249 با موضوع طب سنتی چینی از تاریخ ۱۳۹۸/۱۰/۲ تاکنون
- نماینده تام‌الاختیار دانشگاه صنعتی بیرجند برای پیگیری امور مربوط به خرید تجهیزات آزمایشگاهی و کارگاهی از آزمایشگاه تجهیزات و مواد آزمایشگاهی ساخت ایران از تاریخ ۱۳۹۷/۹/۲۷ تاکنون
- سرپرست آزمایشگاه مرکزی در دانشگاه صنعتی بیرجند از تاریخ ۱۴۰۱/۱/۹ تا کنون
- سرپرست کتابخانه مرکزی و مرکز اطلاع رسانی و اسناد دانشگاه صنعتی بیرجند از تاریخ ۱۴۰۱/۱/۸ تا ۱۴۰۱/۶/۱
- مدیر امور پژوهشی دانشگاه از تاریخ ۱۴۰۱/۶/۲ تا کنون

## مقالات علمی

ردیف	مقالات در زمینه شیمی محاسباتی	توضیحات
۱)	<b>M. Shakorian Fard Jahromi</b> and A. Fattahi, * "DFT study of the interaction thymine with Cu <sup>+</sup> and Zn <sup>2+</sup> ", <b>Scientia Iranica</b> , 2009, 16 (2), 75-80.	Selected as top 5% in Scientia Iranica
۲)	<b>M. Shakourian-Fard</b> , A. Fattahi, * "Theoretical investigation on the structural and electronic properties of complexes formed by thymine and 2'-deoxythymidine with different anions", <b>Struct. Chem.</b> , 2012, 23(1), 17-28.	
۳)	<b>M. Shakourian-Fard</b> , Alireza Fattahi, * Ahmad Bayat, "Ionic Liquid Based on $\alpha$ -Amino Acid Anion and N7,N9-Dimethylguaninium Cation ([dMG][AA]): Theoretical Study on the Structure and Electronic Properties" <b>J. Phys. Chem. A</b> , 2012, 116, 5436-5444.	
۴)	M.S. Ahmadi, <b>M. Shakourian-Fard</b> , A. Fattahi, * "Molecular structure and character of bonding of mono and divalent metal cations (Li <sup>+</sup> , Na <sup>+</sup> , K <sup>+</sup> , Mg <sup>2+</sup> , Ca <sup>2+</sup> , Zn <sup>2+</sup> , and Cu <sup>+</sup> ) with guanosine: AIM and NBO analysis", <b>Struct. Chem.</b> , 2012, 23 (3), 613-626.	
۵)	Z. Aliakbar Tehrani, A. Fattahi, * <b>M. Shakourian-Fard</b> , "What roles do boron substitutions play in structural, tautomeric, base pairing, and electronic properties of uracil? NBO & AIM analysis", <b>J. Phys. Org. Chem.</b> , 2012, 25 (9), 787.	
۶)	M. Nasiri, <b>M. Shakourian-Fard</b> , A. Fattahi, * "Influence of the hydrogen bonding on the basicity of selected macrocyclic amines", <b>J. Phys. Org. Chem.</b> , 2012, 25 (9), 803.	
۷)	<b>M. Shakourian-Fard</b> , M. Nasiri, A. Fattahi, * M. Vafaezadeh, "Influence of the water molecules (n=1-6) on the interaction between Li <sup>+</sup> , Na <sup>+</sup> , K <sup>+</sup> cations and indole molecule as tryptophan amino acid residue", <b>Struct. Chem.</b> , 2012, 23:857-865.	
۸)	<b>M. Shakourian-Fard</b> , Alireza Fattahi, * "Influence of cation-heteroatom (Li <sup>+</sup> , Na <sup>+</sup> and K <sup>+</sup> ) interaction on the structural and thermochemical properties of 2'-deoxythymidine nucleoside: QTAIM and NBO analyses", <b>J. Theor. Comput. Chem.</b> , 2012, 12 (02), 1250113.	
۹)	<b>M. Shakourian-Fard</b> , A. Fattahi, * Z. Jamshidi, "Interaction of cations with 2'-deoxythymidine nucleoside and analysis of nature and strength of cation bonds", <b>J. Phys. Org. Chem.</b> , 2012, 25 (2), 153-161.	
۱۰)	Z. Aliakbar Tehrani, <b>M. Shakourian-Fard</b> , A. Fattahi, * "Computational investigation of thermochemical properties of non-natural C-nucleobases: different hydrogen-bonding preferences for non-natural Watson-Crick base pairs", <b>Struct. Chem.</b> , 2013, 24, 1015-1025.	
۱۱)	<b>M. Shakourian-Fard</b> , Z. Jamshidi, A. Bayat, A. Fattahi, * "Structural and electronic properties of alkyl-trifluoroborate based ionic liquids: a theoretical study", <b>J. Fluorine Chem.</b> , 2013, 153, 96-100.	
۱۲)	G. Kamath <sup>1</sup> , R. Cutler, S.A. Deshmukh, <b>M. Shakourian-Fard</b> , R. Parrish, J. Huether, D. Butt, H. Xiong, S.K.R.S. Sankaranarayanan, * "In silico based rank-order determination and experiments on nonaqueous electrolytes for sodium ion battery applications", <b>J. Phys. Chem. C</b> , 2014, 118 (25), 13406-13416.	

- ۱۳) A. Najdian, **M. Shakourian-Fard**, A. Fattahi,\* “Cooperativity effects of intramolecular OH...O interactions on pKa values of polyolalkyl sulfonic acids in gas and solution phase: a DFT study”, **J. Phys. Org. Chem.**, 2014, 27, 604–612.
- ۱۴) **M. Shakourian-Fard**, G. Kamath, Z. Jamshidi,\* “Trends in Physisorption of Ionic Liquids (ILs) on Boron-Nitride Surface”, **J. Phys. Chem. C**, 2014, 118 (45), 26003–26016.
- ۱۵) **M. Shakourian-Fard**,\* G. Kamath, S.K.R.S. Sankaranarayanan, “Electronic structure insights into the solvation behavior of Mg<sup>2+</sup> Ion with Cyclic/Acyclic Carbonates”, **ChemPhysChem**, 2015, 16 (17), 3607-3617. **Selected as Journal Cover: December 1, 2015, Volume 16, Issue 17, page 3738.**
- ۱۶) **M. Shakourian-Fard**, G. Kamath,\* K. Smith, H. Xiong, S.K.R.S. Sankaranarayanan,\* “Trends in Na-ion Solvation with Alkyl-Carbonate Electrolytes for Sodium-Ion Batteries: Insights from First Principles Calculations,” **J. Phys. Chem. C**, 2015, 119 (40), 22747–22759.
- ۱۷) **M. Shakourian-Fard**, Z. Jamshidi,\* A. Bayat, G. Kamath, “Meta-hybrid density functional theory study of adsorption of imidazolium and ammonium-based ionic liquids on graphene sheet”, **J. Phys. Chem. C**, 2015, 119 (13), 7095–7108.
- ۱۸) **M. Shakourian-Fard**,\* Z. Jamshidi, G. Kamath, “Surface Charge-Transfer Doping of Graphene Nanoflakes Containing Double-Vacancy (5-8-5) and Stone–Wales (55-77) Defects through Molecular Adsorption”, **ChemPhysChem**, 2016, 17 (20), 3289-3299.
- ۱۹) **M. Shakourian-Fard**,\* G. Kamath,\* S.K.R.S. Sankaranarayanan,\* “Evaluating the Free Energies of Solvation and Electronic Structures of Lithium-Ion Battery Electrolytes”, **ChemPhysChem**, 2016, 17(18):2916-30.
- ۲۰) **M. Shakourian-Fard**,\* A. Bayat, G. Kamath, “Effect of mono-vacant defects on the opto-electronic properties of ionic liquid functionalized hexagonal boron-nitride nanosheets,” **J. Mol. Liq.**, 2017, 249, 1172-1182.
- ۲۱) **M. Shakourian-Fard**,\* H. Heydari, G. Kamath, “Defect based modulation of opto-electronic properties for bio-functionalized hexagonal boron nitride nanosheets”, **ChemPhysChem**, 2017, 18 (17), 2328–2335. **Selected as Journal Cover: September 6, 2017, Volume 18, Issue 17, page 2304.**
- ۲۲) **M. Shakourian-Fard**,\* G. Kamath, “The Effect of Defect Types on the Electronic and Optical Properties of Graphene Nanoflakes Physisorbed by Ionic Liquids”, **Phys. Chem. Chem. Phys.**, 2017,19, 4383-4395.
- ۲۳) **M. Shakourian-Fard**,\* S.M. Taimoory, V. Semeniuchenko, G. Kamath, J.F. Trant, “The effect of ionic liquid adsorption on the electronic and optical properties of fluorographene nanosheets’, **J. Mol. Liq.**, 2018, 268, 206–214.
- ۲۴) H.R. Ghenaatian, **M. Shakourian-Fard**,\* G. Kamath, “The effect of sulfur and nitrogen/sulfur co-doping in graphene surface on the adsorption of toxic heavy metals (Cd, Hg, Pb)”, **J Mater Sci**, 2019, 54, 13175–13189.
- ۲۵) H.R. Ghenaatian, **M. Shakourian-Fard**,\* M. Rohani Moghadam, G. Kamath, M. Rahmanian, “Tailoring of graphene quantum dots for toxic heavy metals detection”, **Applied Physics A**, 2019, 125, 754.





- ۲۶) **M. Shakourian-Fard**,\* G. Kamath, S.M. Taimoory, J.F. Trant, “Calcium-Ion Batteries: Identifying Ideal Electrolytes for Next-Generation Energy Storage Using Computational Analysis”, **J. Phys. Chem. C**, 2019, 123, 15885–15896.
- ۲۷) B. Borhani, M. Mohsennia,\* **M. Shakourian-Fard**,\* “Structural and electronic properties of adsorbed nucleobases on Si-doped hexagonal boron nitride nanoflake: a computational study”, **Struct. Chem.**, 2019, 30, 1-11.
- ۲۸) **مهدی شکوریان فرد**,\* حمید رضا قناعتیان، مرتضی گل محمدی " مطالعه نظری ماهیت و قدرت برهمکنش نوکلئوبازهای متیله شده DNA با مایعات یونی " ، پذیرفته شده در نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران، ۱۴۰۱، دوره ۴۲، شماره ۲، ۲۷۱-۲۴۷.
- ۲۹) **M. Shakourian-Fard**,\* H.R. Ghenaatian, G. Kamath, S.M. Taimoory, “Unraveling the effect of nitrogen doping on graphene nanoflakes and the adsorption properties of ionic liquids: A DFT study”, **J. Mol. Liq.**, 2020, 312, 113400.
- ۳۰) H.R. Ghenaatian, **M. Shakourian-Fard**,\* G. Kamath, “Adsorption mechanism of toxic heavy metal ions on oxygen-passivated nanopores in graphene nanoflakes”, **J Mater Sci**, 2020, 55, 15826–15844. **Selected as Journal Cover: November 2020, Volume 55, Issue 33.**
- ۳۱) H. R. Ghenaatian,\* **M. Shakourian-Fard**, G. Kamath, “Interaction of  $Cu_n$ ,  $Ag_n$  and  $Au_n$  ( $n = 1-4$ ) nanoparticles with  $ChCl:Urea$  deep eutectic solvent”, **J. Mol. Graph. Model.**, 2021, 105, 107866.
- ۳۲) A. Khajeh,\* **M. Shakourian-Fard**, “Chemical structure based models for prediction of deep eutectic solvents densities”, **J. Mol. Liq.**, 2021, 343, 117595.
- ۳۳) A. Khajeh,\* K. Parvaneh, **M. Shakourian-Fard**, “Refractive index prediction of deep eutectic solvents by molecular approaches”, **J. Mol. Liq.**, 2021, 332, 115843.
- ۳۴) **M. Shakourian-Fard**,\* S.M. Taimoory, H.R. Ghenaatian, G. Kamath, J.F. Trant, “A DFT study of the adsorption of deep eutectic solvents onto graphene and defective graphene nanoflakes”, **J. Mol. Liq.**, 2021, 327, 114850.
- ۳۵) A. Khajeh,\* **M. Shakourian-Fard**, K. Parvaneh, “Quantitative structure-property relationship for melting and freezing points of deep eutectic solvents”, **J. Mol. Liq.**, 2021, 321, 114744.
- ۳۶) **M. Shakourian-Fard**,\* H.R. Ghenaatian, V. Alizadeh, G. Kamath, B. Khalili, “Density functional theory investigation into the interaction of deep eutectic solvents with amino acids”, **J. Mol. Liq.**, 2021, 343, 117624.
- ۳۷) **M. Shakourian-Fard**,\* S. Maryamdokht Taimoory, H.R. Ghenaatiand, G. Kamath, J.F. Trant, “Effect of mono-vacant defects on the adsorption properties of deep eutectic solvents onto hexagonal boron-nitride nanoflakes”, **J. Mol. Liq.**, 2022, 349, 118122.
- ۳۸) H.R. Ghenaatian,\* **M. Shakourian-Fard**, V. Alizadeh, G. Kamath, “DFT study of interaction of Palladium  $Pd_n$  ( $n = 1-6$ ) nanoparticles with deep eutectic solvents”, **J. Mol. Graph. Model.**, 2022, 110, 108072.
- ۳۹) H.R. Ghenaatian,\* **M. Shakourian-Fard**, G. Kamath, J.F. Trant, F.S. Mjalli, “The interaction of deep eutectic solvents with pristine carbon nanotubes and

their associated defects: A density functional theory study”, *J. Mol. Liq.*, 2022, 363, 119855.

- ۴۰) F.S. Mjalli,\* **M. Shakourian-Fard**, G. Kamath, G. Murshid, J. Naser, S. Al Ma'awali, “Experimental and theoretical study of the physicochemical properties of the novel imidazole-based eutectic solvent”, **J. Mol. Graph. Model.**, 2023, 118 (2023) 108319.
- ۴۱) F.R. Al-Fazari, F.S. Mjalli,\* **M. Shakourian-Fard**,\* G. Kamath, J. Naser, G. Murshid, S. Al Ma'awali, “Imidazole–monoethanolamine-based deep eutectic solvent for carbon dioxide capture: A combined experimental and molecular dynamics investigation”, **J. Chem. Eng. Data**, 2023, 68, 5, 1077–1090. **Selected as Front Cover Art Work in J. Chem. Eng. Data.**
- ۴۲) F. Boorboor Ajdari,\* A. Fathollahi Zonouz,\* A. Heydari, H. Shokouei Mehrabani, **M. Shakourian-Fard**, G. Kamath, F. Ghasemi, M. Kahrizi, “Exploring the effects of dopamine and DMMP additives on improving the cycle boosting and nonflammability of electrolytes in full-cell lithium-ion batteries (18650)”, **J. Phys. Chem. C**, 2023, 127, 17, 8195–8207.
- ۴۳) **M. Shakourian-Fard**,\* H.R. Ghenaatian, G. Kamath, F.S. Mjalli, J.F. Trant,\* , “Pristine and vacancy defective boron nitride nanotubes absorb deep eutectic solvents”, **Chemical Physics Letters**, 2023, 830, 140814.
- ۴۴) **M. Shakourian-Fard**,\* H.R. Ghenaatian, G. Kamath, “Geminal Dicationic Ionic Liquids (GDILs) and Their Adsorption on Graphene Nanoflakes”, **ACS Omega**, 2024, 9, 7, 7575–7587.
- ۴۵) F. Boorboor Ajdari,\* M. Niknam Shahrak,\* M. Ershadi, **M. Shakourian-Fard**, F. Abbasi, G. Kamath, F. Akbari Beni, F. Ghasemi, H.R. Ghenaatian, S. Ramakrishna, “Lithium–sulfur batteries beyond lithium-ion counterparts: reasonable substituting challenges, current research focus, binding critical role, and cathode designing”, *Rev Chem Eng*, 2024, <https://doi.org/10.1515/revce-2023-0059>

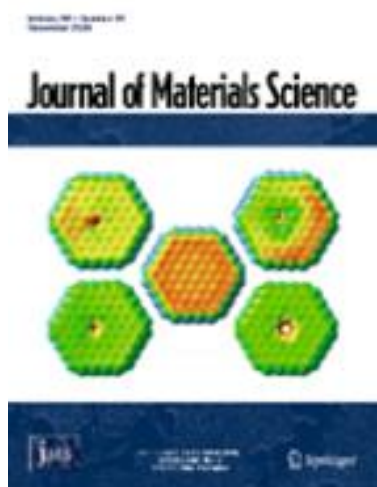
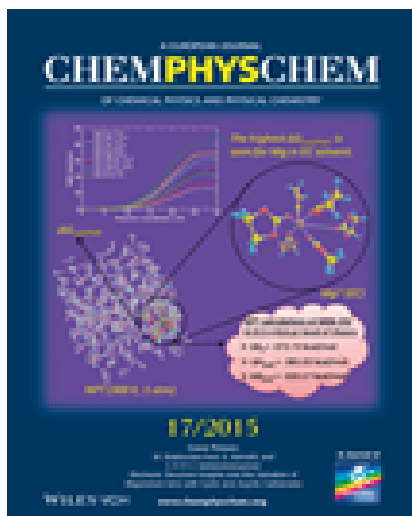


#### مقالات در زمینه تجربی

- ۴۶) M. Vafaezadeh, M. Mahmoodi Hashemi,\* **M. Shakourian-Fard**, ”Silica supported task-specific ionic liquid system: an efficient catalyst for oxidation of cyclohexene to adipic acid with 30% H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>”, **Catal. Commun.**, 2012, 26, 54-57.
- ۴۷) **M. Shakourian-Fard**, A.H. Rezayan,\* S. Kheirjou, A. Bayat, M. Mahmoodi Hashemi, ”Synthesis of  $\alpha$ -Aminophosphonates in the Presence of a Magnetic Recyclable Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@SiO<sub>2</sub>-2mimSO<sub>3</sub>H Nano-Catalyst”, **Bull. Chem. Soc. Jpn**, 2014, 87 (9), 982-987.
- ۴۸) A. Bayat, **M. Shakourian-Fard**, M. Mahmoodi Hashemi,\* “Selective oxidation of sulfides to sulfoxides by a molybdate-based catalyst using 30% hydrogen peroxide”, **Catal. Commun.**, 2014, 52, 16-21.
- ۴۹) A. Bayat, **M. Shakourian-Fard**, M. Mahmoodi Hashemi,\* “A magnetic supported iron complex for selective oxidation of sulfides to sulfoxides using 30% hydrogen peroxide at room temperature”, **RSC Adv.**, 2014, 4, 44274-44281.

- ۵۰) A. Ziyaei Halimehjani,\* **M. Shakourian-Fard**, M. Raeesi, M. Mahmoodi Hashemi, H. Behzadi, "Design and synthesis of new family of ionic liquids based on 2-iminium-1,3-dithiolanes: A combined theoretical and experimental effort", **J. Mol. Struct.**, 2014, 1056-1057, 56-62.
- ۵۱) A. Bayat, **M. Shakourian-Fard**, N. Ehyaei, M. Mahmoodi Hashemi,\* "Silver Nanoparticles Supported on Silica-Coated Ferrite as Magnetically and Reusable Catalyst for Oxidant-Free Alcohol Dehydrogenation", **RSC Adv.**, 2015, 5, 22503-22509.
- ۵۲) A. Bayat, **M. Shakourian-Fard**, S. Ramezanpour, Mohammad Mahmoodi Hashemi,\* "A Green Procedure for Direct Oxidation of Organic Halides to Aldehydes and Ketones Catalyzed by Molybdate-Based Catalyst", **New J. Chem.** 2015, 39 (5), 3845-3851.
- ۵۳) S. Kheirjou, R. Kheirjou, A.H. Rezayan,\* **M. Shakourian-Fard**, M.M. Hashemi," Selective aqueous oxidation of alcohols catalyzed by copper (II) phthalocyanine nanoparticles", **C.R. Chim.**, 2016, 19 (3), 313-318.
- ۵۴) A. Bayat, **M. Shakourian-Fard**, P. Noori, E. Issazadeh, M. Mahmoodi Hashemi,\* "A highly reactive and magnetic recyclable catalyst based on silver nanoparticles supported on ferrite for N-monoalkylation of amines with alcohols", **Appl. Organomet. Chem.**, 2017, 31 (10), e3720.
- ۵۵) A Bayat, **M. Shakourian-Fard**, N. Talebloo, M. Mahmoodi Hashemi,\* "Silver nanoparticles immobilized onto poly (4-vinylpyridine)-functionalized magnetic nanoparticles: A robust magnetically recyclable catalyst for oxidant-free alcohol dehydrogenation", **Appl. Organomet. Chem.**, 2017, 32 (2), e4061.
- ۵۶) A. Zeraatkar Moghaddam,\* E. Esmaeilkhani, **M. Shakourian-Fard**, "Immobilizing magnetic glutaraldehyde cross-linked chitosan on graphene oxide and nitrogen-doped graphene oxide as well dispersible adsorbents for chromate removal from aqueous solutions", **Int. J. Biol. Macromol**, 2019, 128, 61-73.
- ۵۷) حمید رضا قناعتیان,\* مونس هنرمند، زهرا زراعتکار سیدآباد، مهدی شکوریان فرد، "تخریب فوتوکاتالیستی رنگ‌های آلی با استفاده از نانوذرات اکسید قلع سنتز شده در عصاره برگ توت در حضور نور خورشید"، پذیرفته شده در نشریه علمی-پژوهشی علوم و فناوری رنگ"، ۱۵، (۳)، ۱۴۰۰، ۱۷۷-۱۸۵.
- ۵۸) A. Zeraatkar Moghaddam,\* E. Arabi, **M. Shakourian-Fard**, "SPE gallic acid and ascorbic acid in fruits using polymerized deep eutectic solvent-modified substrate", **Bioanalysis**, 2023, 15(20), 1221-1233.

## مقالاتی که به عنوان طرح روی جلد مجلات انتخاب شده اند (Cover Arts)



## سمینارها و همایشهای داخلی و بین المللی

- ۱) **M. Shakourian-Fard**, M. Seyfi, R. Jalal, Measurement of the free fatty acids in plasma by titration method, 14<sup>th</sup> National & 2<sup>nd</sup> International Conference of Biology, Tarbiyat Modarres University, Tehran, Iran, 2006.
- ۲) E. Tavasoli, **M. Shakourian-Fard**, A. Fattahi, Ab initio study on the structural analysis of gaseous histidine, potential energy surface and vibrational analysis, 235<sup>th</sup> ACS (American chemical society) National Meeting in New Orleans, 2008.
- ۳) **M. Shakourian-Fard**, A. Fattahi, Interactions of thymine and deoxythymidine with some biological anions (CN<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>, F<sup>-</sup>) in the gas phase, 237<sup>th</sup> ACS (American chemical society) National Meeting in Division of Inorganic Chemistry in Salt Lake City, 2009.

- ۴) **M. Shakourian-Fard**, A. Fattahi, DFT studies of the interaction of thymine and deoxythymidine with various mono-and divalent metal cations ( $\text{Li}^+$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ;  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ;  $\text{Cu}^+$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ), 237<sup>th</sup> ACS (American chemical society) National Meeting in Division of Physical Organic Chemistry in Salt Lake City, 2009.
- ۵) **M. Shakourian-Fard**, A. Fattahi, Study of proper hydrogen bonding between thymine tautomers and some important biological anions using NBO analysis, 17<sup>th</sup> Iranian Conference of Organic Chemistry, Mazanderan-Babolsar University, Babolsar, Iran, 2010.
- ۶) **M. Shakourian-Fard**, A. Fattahi, DFT study of cation-heteroatom interaction and its effects on enhancement of acidity of deoxythymidine nucleoside, 17<sup>th</sup> Iranian Conference of Organic Chemistry, Mazanderan-Babolsar University, Babolsar, Iran, 2010.
- ۷) **M. Shakourian-Fard**, A. Fattahi, Study of effects of some biological cations on the 1,3 intramolecular hydrogen transfer in thymine, 239<sup>th</sup> ACS (American Chemical Society) National Meeting in San Francisco, 2010.
- ۸) **M. Shakourian-Fard**, A. Fattahi, Theoretical study on radical anions of tautomeric forms of thymine nucleobase, 241<sup>th</sup> ACS (American chemical society) National Meeting in Division of Organic Chemistry in Anaheim, 2011.
- ۹) **M. Shakourian-Fard**, A. Fattahi, An ionic liquid based on  $\alpha$ -amino acid anion and N7, N9-dimethylguaninium cation ([dMG][AA]): A theoretical study on the structure and electronic properties, 18<sup>th</sup> Iranian Conference of Organic Chemistry, Sistan and Baluchestan University, Zahedan, Iran, 2012.
- ۱۰) **M. Shakourian-Fard**, A. Bayat, Design and synthesis of new class of ionic liquids based on 2-iminium-1,3-dithiolane cation for carbon dioxide absorption, National Conference on Environment, Shahid Beheshti University, Tehran, Iran, 2016.
- ۱۱) M. Honarmand, **M. Shakourian-Fard**, Efficient and Eco-Friendly Process for the Synthesis of Bis(1H-indol-3-yl)methanes Using Butylammonium Hydrogen Sulphate as an Ionic Liquid, 24<sup>th</sup> Iranian Seminar of Organic Chemistry, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz, Iran, 2016.
- ۱۲) M. Honarmand, **M. Shakourian-Fard**, Tris(hydroxymethyl)methane Ammonium Hydrogensulphate [(THA)( $\text{HSO}_4$ )]: An Eco-Friendly and Recyclable Catalyst for One-Pot, Three-Component Synthesis of 2-amino-3-cyano-4H-pyran Derivatives in Water, 24<sup>th</sup> Iranian Seminar of Organic Chemistry, Azarbaijan Shahid Madani University, Tabriz, Iran, 2016.
- ۱۳) **M. Shakourian-Fard**, M. Honarmand, Evaluating the Ion-Electrolyte Solvation Free Energy and Electronic Structure Properties of Lithium-Ion Battery Electrolytes, 19<sup>th</sup> Iranian Physical Chemistry Conference, University of Guilan, Iran, 2016.
- ۱۴) **M. Shakourian-Fard**, A. Bayat, Electronic Structure Insights into the Solvation Behavior of  $\text{Mg}^{2+}$  Ion with Cyclic/Acyclic Carbonates, 19<sup>th</sup> Iranian Physical Chemistry Conference, University of Guilan, Iran, 2016.
- ۱۵) A. Bayat, **M. Shakourian-Fard**, Design and Synthesis of Magnetic Supported Silver Nanoparticles for One-Pot N-Monoalkylation of Amines with Alcohols, 2<sup>nd</sup> Annual Conference

Green Engineering Technologies for a Sustainable Future, Amirkabir University Of Technology, Tehran, Iran, January 2017.

- ۱۶) A. Bayat, **M. Shakourian-Fard**, A Magnetic Catalyst Based on Silver Nanoparticles Supported on Silica-Coated Ferrite for Oxidant-Free Alcohol Dehydrogenation, 2<sup>nd</sup> Annual Conference Green Engineering Technologies for a Sustainable Future, Amirkabir University Of Technology, Tehran, Iran, January 2017.
- ۱۷) A. Bayat, **M. Shakourian-Fard**, M. Honarmand, Synthesis of a Molybdate-Based Catalyst for Green Oxidation of Organic Halides to Aldehydes and Ketones, 2<sup>nd</sup> Annual Conference Green Engineering Technologies for a Sustainable Future, Amirkabir University Of Technology, Tehran, Iran, January 2017.
- ۱۸) M. Honarmand, **M. Shakourian-Fard**, An eco-friendly process for the one-pot synthesis of 2-amino-3-cyano-4H-pyrans in the presence of nano ionic liquid, 2<sup>nd</sup> Annual Conference Green Engineering Technologies for a Sustainable Future, Amirkabir University Of Technology, Tehran, Iran, January 2017.
- ۱۹) **M. Shakourian-Fard**, A. Bayat, M. Honarmand, Oxidation of alcohols by iron oxide magnetic nanoparticles coated with silver nanoparticles, 8<sup>th</sup> National Conference on chemistry and Environment, Kharazmi University, Tehran, Iran, 2017.
- ۲۰) **M. Shakourian-Fard**, M. Honarmand, A. Bayat, Adsorption of organic molecules on the graphene surfaces containing double-vacancy (5-8-5) and stone-wales (55-77) defects: Application in graphene based gas sensors, 8<sup>th</sup> National Conference on chemistry and Environment, Kharazmi University, Tehran, Iran, 2017.
- ۲۱) **M. Shakourian-Fard**, M. Honarmand, A. Bayat, DFT Study of Adsorption of Ionic Liquids on the Defective Graphene Nanoflakes, 25<sup>th</sup> Iranian Seminar of Organic Chemistry, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran, September 2-4, 2017.
- ۲۲) **M. Shakourian-Fard**, M. Honarmand, A. Bayat, Trends in Physisorption of DNA Nucleobases on the Defective Hexagonal Boron Nitride Nanoflakes: A DFT Study, 25<sup>th</sup> Iranian Seminar of Organic Chemistry, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran, September 2-4, 2017.
- ۲۳) M. Honarmand, **M. Shakourian-Fard**, A. Bayat, Synthesis of bis (indolyl) methanes catalyzed by the first nano aliphatic ammonium-based ionic liquid, 25<sup>th</sup> Iranian Seminar of Organic Chemistry, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran, September 2-4, 2017.
- ۲۴) M. Honarmand, **M. Shakourian-Fard**, A. Bayat, Design, synthesis and catalytic property evaluation of a nano ammonium salt, 25<sup>th</sup> Iranian Seminar of Organic Chemistry, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran, September 2017.
- ۲۵) M. Honarmand, **M. Shakourian-Fard**, 1,3-Propanediaminium methanesulfonate [(PDA)(MS)]: A new nano molten salt catalyst for the efficient synthesis of bis(indolyl)methanes, 2<sup>nd</sup> Iranian Seminar of Applied Chemistry, Zanjan University, Zanjan, Iran, 2017.

- ۲۶) M. Honarmand, **M. Shakourian-Fard**, A simple and green procedure for Knoevenagel condensation reaction using a new ammonium-based ionic liquid, 2nd Iranian Seminar of Applied Chemistry, Zanjan University, Zanjan, Iran, 2017.
- ۲۷) H. Heydari, **M. Shakourian-Fard**, DFT study of ionic liquid adsorption on the fluorographene surface, The 16<sup>th</sup> Iranian National Congress of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology, Department of Chemical Engineering, Tehran, Jan 22-24, 2019.
- ۲۸) H. Heydari, **M. Shakourian-Fard**, Interaction of ionic liquids with defective hexagonal boron-nitride nanoflakes, The 16<sup>th</sup> Iranian National Congress of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology, Department of Chemical Engineering, Tehran, Jan 22-24, 2019.
- ۲۹) **Oral:** H. R. Ghenaatian, **M. Shakourian-Fard**, High performance hybrid supercapacitor based an efficient redox-mediated organic electrolyte, 17<sup>th</sup> Annual Electrochemistry Seminar of Iran, Iran University of Science and Technology, March 1-2, 2023.
- ۳۰) **Oral:** **M. Shakourian-Fard**, H. R. Ghenaatian, Sodium-ion batteries: Investigating the solvation behavior of sodium ion in nonaqueous organic electrolytes, 17<sup>th</sup> Annual Electrochemistry Seminar of Iran, Iran University of Science and Technology, March 1-2, 2023.
- ۳۱) **Oral:** **M. Shakourian-Fard**, H. R. Ghenaatian, Identifying the best carbonate electrolyte solvents for Calcium-ion batteries using computational approaches, 17<sup>th</sup> Annual Electrochemistry Seminar of Iran, Iran University of Science and Technology, March 1-2, 2023.
- ۳۲) **M. Shakourian-Fard**, H.R. Ghenaatian, V. Alizadeh, The Interaction of Imidazolium and Ammonium-Based Ionic Liquids (ILs) with Fluorographene (FG) Surface: A DFT Study, 29<sup>th</sup> Iranian Organic Chemistry Conference, University of Qom, 1-3 November, 2023.
- ۳۳) H.R., Ghenaatian, **M. Shakourian-Fard**, V. Alizadeh, Adsorption of Cadmium (Cd), Mercury (Hg), and Lead (Pb) Metal Atoms on the Graphene and Heteroatom Doped Graphene Surfaces: A DFT Study, 29<sup>th</sup> Iranian Organic Chemistry Conference, University of Qom, 1-3 November, 2023.
- ۳۴) حمید رضا قناعتیان و مهدی شکوریان فرد جهرمی، مطالعه نظریه تابع چگالی (DFT) برهمکنش یونهای فلزات قلیایی آبیوشی شده با اسید آمینه تریپتوفان، ششمین همایش ملی و کارگاههای تخصصی علوم و فناوری نانو، دانشگاه خلیج فارس، ۲-۳ اسفند ۱۴۰۲
- ۳۵) حمید رضا قناعتیان و مهدی شکوریان فرد جهرمی، خواص ساختاری و الکترونی اوراسیل استخلاف شده با بور-مطالعه نظریه تابع چگالی، ششمین همایش ملی و کارگاههای تخصصی علوم و فناوری نانو، دانشگاه خلیج فارس، ۲-۳ اسفند ۱۴۰۲

## زمینه های تحقیقاتی و فعالیت های پژوهشی

- آنالیز ماهیت و قدرت برهمکنش های غیرکووالانسی درون مولکولی و بین مولکولی.
- بررسی نحوه برهمکنش فلزات، یونهای فلزی و نانوذرات فلزی با بیومولکولها.
- بررسی مکانیسم واکنشهای آلی و بیولوژیکی به روش محاسباتی.
- بررسی توانایی نانو موادها (گرافن، بور-نیتريد، مولیبدن سولفید، کربن نانوتیوبها، بور-نیتريد نانوتیوبها و غیره) در جذب بیومولکولها (نوکلتوبازها و اسیدهای آمینه)، داروها، گازها، مایعات یونی و حلالهای با نقطه یوتکتیک با استفاده از روشهای محاسباتی به منظور کاربرد آنها در ابزارهای الکترونیکی در مقیاس نانو، باتریها، ابرخازنها، سیستمهای نوری، زیست پزشکی و طراحی بیوسنسورها.
- بررسی توانایی مایعات یونی و حلالهای با نقطه یوتکتیک در جذب گازهای گلخانه ای (CO<sub>2</sub>، SO<sub>2</sub>، N<sub>2</sub>O و غیره) با استفاده از روشهای محاسباتی و تجربی.

- بررسی کارآیی الکترولیت‌های غیرآبی، مایعات یونی و حلال‌های با نقطه یوتکتیک در طراحی باتری‌های لیتیومی و باتری‌های نسل بعدی مانند باتری‌های سدیمی، منیزیمی، کلسیمی و آلومینیومی با استفاده از روش‌های محاسباتی و تجربی.
- طراحی و سنتز مایعات یونی و حلال‌های با نقطه یوتکتیک جدید به عنوان حلال و کاتالیزور برای واکنش‌های آلی: تلفیقی از شیمی محاسباتی و تجربی.
- سنتز نانو ذرات مغناطیسی اکسید آهن ( $Fe_3O_4$ ) و کاربرد آنها در سنتز مواد آلی.
- شبیه سازی دینامیک مولکولی.

## سوابق آموزشی

- تدریس دروس شیمی عمومی، شیمی تجزیه، شیمی آلی، شیمی فیزیک، ترمودینامیک مهندسی شیمی، مقدمه ای بر مهندسی شیمی، مبانی مهندسی پلیمر و اصول مهندسی پلیمر در دانشگاه صنعتی بیرجند.
- تدریس آزمایشگاه شیمی عمومی، شیمی تجزیه، شیمی آلی و شیمی فیزیک در دانشگاه صنعتی بیرجند.
- دستیار آموزشی دروس شیمی عمومی، شیمی آلی، آزمایشگاه جداسازی و شناسایی ترکیبات آلی در دانشگاه صنعتی شریف.
- تدریس دروس شیمی عمومی و شیمی آلی در دانشگاه دولتی جهرم از تاریخ ۱۳۹۳/۷/۱ تا ۱۳۹۴/۳/۳۰.
- تدریس درس شیمی آلی ۳ و شیمی آلی پیشرفته (دوره کارشناسی ارشد) در دانشگاه پیام نور جهرم از تاریخ ۱۳۹۳/۷/۱ تا ۱۳۹۳/۱۰/۲۵.
- استاد مشاور پایان نامه خانم الهه عربی آیسک دانشجوی ارشد شیمی تجزیه دانشگاه بیرجند با عنوان "استخراج و تعیین گالیک اسید و آسکوربیک اسید در میوه جات با استفاده از روش استخراج فاز جامد بر پایه ی نانوذرات فریت کبالت سیلیکای اصلاح شده با یک ترکیب پلیمر" تحت راهنمایی آقای دکتر علی زراعتکار مقدم و دکتر ابراهیم قیامتی یزدی.
- استاد مشاور پایان نامه آقای احسان اسمعیل خانیان دانشجوی ارشد شیمی تجزیه دانشگاه بیرجند با عنوان "حذف دی کرومات از پساب های صنعتی با استفاده از نانوکمپوزیت مغناطیسی چیتوسان/گرافن اکساید غنی شده با نیتروژن به عنوان جاذب" تحت راهنمایی آقای دکتر علی زراعتکار مقدم.
- استاد مشاور پایان نامه خانم مینا بیت عفری دانشجوی کارشناسی ارشد شیمی دریا دانشگاه علوم و فنون دریایی خرمشهر با عنوان "بررسی تئوری برهمکنش حلال‌های یوتکتیک عمیق سبز با یون‌های فلزات سنگین سمی سرب، جیوه و کادمیم در محیط‌های آبی"، تحت راهنمایی آقای دکتر لرکی.
- استاد مشاور پایان نامه آقای سید محمد طهری دانشجوی کارشناسی ارشد شیمی دریا دانشگاه علوم و فنون دریایی خرمشهر با عنوان "سنجش آفت کش کلروپریفوس به روش رنگ سنجی دیجیتال پس از پیش تغلیظ به روش استخراج فاز مایع"، تحت راهنمایی جناب آقای دکتر لرکی.

## طرح های پژوهشی

- طرح سربازی (بنیاد نخبگان): بررسی برهمکنش آنیون‌های نیترات، پرکلرات و سیانید با کاتیون پیرانرزی تری آزولیوم و مشتقات آن، دانشگاه مالک اشتر تهران، با همکاری دکتر رضا فارغی علمداری، از تاریخ ۹۰/۱۲/۹ تا تاریخ ۹۱/۱۰/۱۷.
- طرح سربازی (بنیاد نخبگان): بررسی انواع غشاهای پلیمری و کربنی به عنوان پوشش‌های محافظ، دانشگاه امام حسین (ع)، زیر نظر دکتر بزرگمهر مداح، از تاریخ ۱۳۹۳/۶/۵.
- استفاده از الکترولیت های غیر آبی و مایعات یونی در طراحی نسل جدیدی از باتریها مانند باتری‌های سدیمی، منیزیمی و کلسیمی از طریق همکاری با دکتر Subramanian K. R. S. Sankaranarayanan (از آزمایشگاه ملی آمریکا، Argon National Lab) و دکتر Ganesh Kamath از دانشگاه میسوری-کلمبیا.

- همکار طرح پژوهشی به شماره ۹۴۸۰۲۳۰۱ و عنوان "بررسی نظری جذب فیزیکی مولکولهای الکترون دهنده و الکترون گیرنده بر روی سطح صفحات گرافنی حاوی نقصهای ساختاری به منظور طراحی نیمه رساناهای نوع n و p" در معاونت علمی و فناوری ریاست جمهوری، صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور در سال ۱۳۹۶.
- مجری طرح پژوهشی "بررسی نظری برهمکنش صفحات گرافنی حاوی نقصهای ساختاری با مایعات یونی" در دانشگاه صنعتی بیرجند در تاریخ ۱۳۹۵/۲/۲۵.
- مجری طرح پژوهشی به شماره ۹۵۸۳۰۲۵۴ و عنوان "اولویت بندی الکترولیت های کربناتی غیرآبی برای کاربرد در باتریهای یون کلسیم" در معاونت علمی و فناوری ریاست جمهوری، صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور در سال ۱۳۹۸.
- مجری طرح پژوهشی "سنتز خاک رنگبر و بررسی عملکرد آن در تصفیه روغن" در دانشگاه صنعتی بیرجند، در قالب تهیه نمونه آزمایشگاهی، در تاریخ ۱۴۰۲/۴/۴.
- مجری طرح پژوهشی به شماره ۴۰۲۰۶۷۵ و عنوان "بررسی نقش حلال های یوتکتیک عمیق به عنوان الکترولیت در باتریهای یون-لیتیوم و یون-سدیم" در معاونت علمی و فناوری ریاست جمهوری، صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور در سال ۱۴۰۲.
- شرکت در جشنواره رشد تولید و توسعه اقتصاد دانش بنیان در زنجیره ارزش بنتونیت (رویداد ایده شوی بنتونیت) در دانشگاه صنعتی بیرجند در دی ماه سال ۱۴۰۲، کسب عنوان سومین ایده برتر در جشنواره با عنوان "فرآوری بنتونیت و استفاده از آن به عنوان عامل غلظت دهنده گل حفاری".
- همکار طرح پژوهشی فناورانه با عنوان "بهبود کیفیت بنتونیت" در معاونت علمی و فناوری ریاست جمهوری، صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور در سال ۱۴۰۳.

### کارگاه های آموزشی

- شرکت در اولین کارگاه آموزشی شیمی محاسباتی (۱۳۹۰) در مرکز پژوهش های شیمی و مهندسی شیمی ایران با عنوان آنالیز تابع موج (Wave Function Analysis).
- شرکت در سومین کارگاه آموزشی شیمی نظری و محاسباتی (۱۳۹۲) در مرکز پژوهش های شیمی و مهندسی شیمی ایران با عنوان همبستگی الکترونی (Electron Correlation).
- شرکت در سومین همایش ملی ایمنی و مدیریت پسماندهای شیمیایی ، برگزار شده در دانشگاه صنعتی شریف در تاریخ ۱۳۹۱/۷/۱۲.
- شرکت در کارگاه عملی سنتز نانو ذرات به روش سل ژل و کارگاه تئوری سنتز گرافن در دانشگاه پیام نور جهرم در تاریخ ۱۳۹۴/۲/۲۴.
- شرکت در کارگاه عملی روشهای تهیه نانو مواد و نانوذرات مغناطیسی اکسید آهن در دانشگاه پیام نور جهرم در تاریخ ۱۳۹۴/۲/۲۵.
- شرکت در کارگاه آموزشی نرم افزار توسعه یافته شبکه آزمایشگاههای علمی ایران (شاعا) در محل وزارت علوم، تحقیقات و فناوری در تاریخ ۹۶/۸/۷.
- برگزاری کارگاه آموزشی تحت عنوان "آموزش نرم افزار محاسباتی گوسین" در دانشگاه صنعتی بیرجند به مناسبت هفته ملی پژوهش و فناوری در تاریخ ۱۳۹۵/۱۰/۱.
- برگزاری کارگاه آموزشی تحت عنوان "آموزش نرم افزار گوس ویو" در دانشگاه صنعتی بیرجند به مناسبت هفته ملی پژوهش و فناوری در تاریخ ۱۳۹۵/۹/۲۳.

### داوری طرحها و مقالات علمی

- داوری ۲ طرح داخلی در دانشگاه صنعتی بیرجند
- داوری ۱ طرح از صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور، معاونت علمی و فناوری ریاست جمهوری
- داوری طرحهای ثبت اختراع در مرکز پارک علم و فناوری خراسان جنوبی

- داوری بیش از ۳۰۰ مقاله علمی از ژورنالهای معتبر علمی داخلی و خارجی

## افتخارات و جوایز

- عضو استعدادهای درخشان در سال ۱۳۸۵ طبق اعلام سازمان سنجش کشور
- عضو بنیاد ملی نخبگان
- کسب رتبه کل ۲۵ در آزمون کارشناسی ارشد سال ۱۳۸۵ شیمی در مجموع هفت گرایش در میان بیش از ۱۰۰۰۰ نفر شرکت کننده:

✓ رتبه ۱۳ در شیمی آلی و فیتوشیمی

✓ رتبه ۱۶ در شیمی فیزیک

✓ رتبه ۲۰ در شیمی تجزیه

✓ رتبه ۲۳ در شیمی معدنی

✓ رتبه ۲۵ در علوم و تکنولوژی پلیمر

- نفر اول آزمون جامع دکتری در گرایش شیمی آلی در دانشگاه صنعتی شریف
- کسب بورسیه تحصیلی از طرف پروفسور Donald, L. Thompson و پروفسور Thomas D. Sewell برای گذراندن دوره ۱۰ ماهه فرصت مطالعاتی در دانشگاه میسوری-کلمبیا در کشور آمریکا در سال ۹۱-۹۲
- استاد برتر آموزشی دانشکده مهندسی معدن، عمران و شیمی در سال ۱۳۹۹
- انتخاب به عنوان پژوهشگر برتر گروه مهندسی شیمی دانشگاه صنعتی بیرجند در سال ۱۴۰۰
- انتخاب به عنوان پژوهشگر برتر دانشکده مهندسی معدن، عمران و شیمی و همچنین رتبه دوم در دانشگاه صنعتی بیرجند در سال ۱۴۰۰

## کتاب

- تألیف کتاب با عنوان "ذخیره کننده های پیشرفته انرژی الکتریکی"، دکتر حمیدرضا قناعتیان و دکتر مهدی شکوریان فرد جهرمی، چاپ توسط انتشارات دانشگاه جهرم، سال ۱۴۰۰

## مهارتها

- Quantum programs: Gaussian, GAMESS, ORCA, Spartan08, GaussView, AIM2000, AIMALL, AOMix, Amsterdam Density Functional (ADF)2009, Multiwfn, NCI Plot, Gabedit
- Molecular dynamics (MD) simulation programs: LAMMPS Package (beginner), Packmol, VMD, Xmgrace
- Operating Systems: Linux, Windows
- Other softwares: ChemDraw, ChemOffice, Hyperchem, Chemcraft
- Characterization technique: NMR, FT-IR, SEM, TEM, EDX, TGA, XRD, etc.

## همکاریهای بین المللی

- آزمایشگاه ملی آمریکا (Argonne National Laboratory)
- دانشگاه میسوری (University of Missouri) در آمریکا
- دانشگاه ویندزور (University of Windsor) در کانادا
- دانشگاه سلطان قابوس (Sultan Qaboos University) در عمان
- کالج آتلانتیک شمالی قطر (College of the North Atlantic)