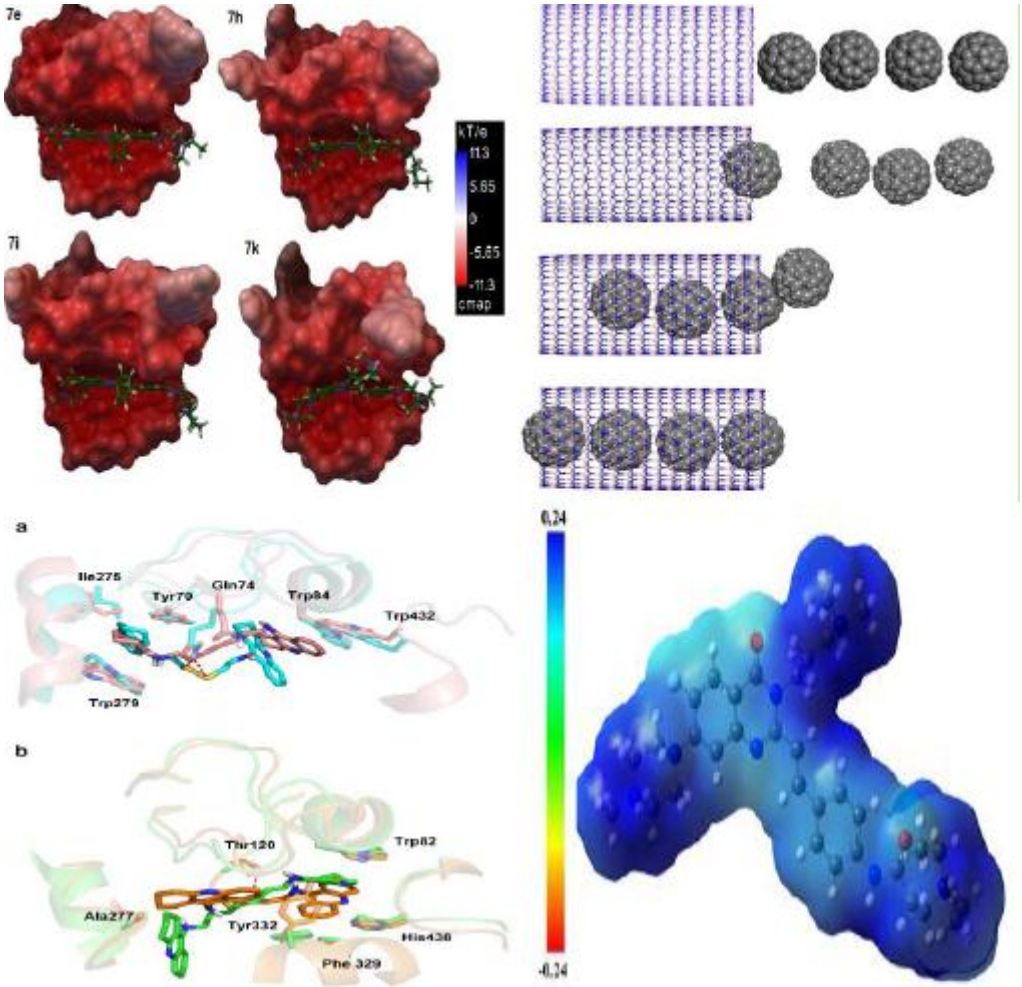
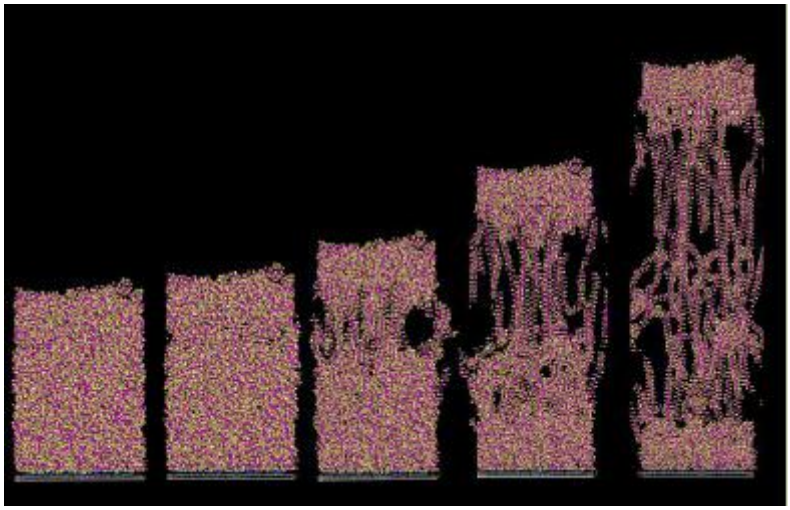
آزمایشگاه شبیه سازی مولکولی





مدیر آزمایشگاه

دکتر سید مجید هاشمیان زاده

فاکس: ۷۷۴۹۱۲۰۴

تلفن: ۷۷۲۴۰۲۸۷

Email: hashemianzadeh@iust.ac.ir

دانشجویان دکتری

سید مصطفی رحیمیان کلور، امین خرسندی، سمانه باقری،کیانا مقدم، محبوبه اسلامی، زهرا خطی، سوسا جوان، ستاره مستجابی

دانشجویان کارشناسی ارشد:

فاطمه شفیعی، نیره هاتفی، مریم شیرزاد

زمینه‌های تحقیقاتی

- **بیولوژی محاسباتی**
- **نانوکامپوزیت**
- **سلول‌های خورشیدی بر پایه رنگدانه‌های سنتزی**
- **شکافت آب**
- **نانوسیال**
- **ذخیره‌سازی و جداسازی گاز هیدروژن**
- **خواص پلیمرها و مواد فعال سطحی**

مهارت‌ها

- **شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعادلی و غیر تعادلی (NEMD&MD)**
- **دینامیک مولکولی کوانتومی(QMD)**
- **شبیه سازی مونت کارلو (MC)**
- **شبیه سازی مونت کارلو سینتیکی (K-MC)**
- **محاسبات کوانتومی وابسته به زمان و مستقل از زمان(TD-DFT & DFT)**
- **داکینگ(Docking)**
- **برنامه نویسی به زبان های مختلف اعم از فرترن، پرل، C++ و ...**

پژوهش‌های در حال انجام

- **طراحی داروهای ضد سرطان**

ساختار G-quadruplex یکی از ساختارهای شناخته شده DNA می‌باشد که در مناطقی با توالی های غنی از گوانین تشکیل می‌شود. از آنجایی‌که این توالی‌ها در مناطق مهمی از ژنوم یوکاریوت‌ها همچون تلومر و راه انداز برخی از ژن‌های مرتبط با سرطان، حضور دارند، پایداری این ساختارها در

جلوگیری از سرطان نقش موثری بر عهده دارد. در چند دهه اخیر G-quadruplex ها به عنوان هدفی مهم جهت ساخت داروهای نوین ضد سرطان شناخته شده‌اند. تاکنون تعداد زیادی از ترکیبات پایدارکننده این ساختارها مورد بررسی قرار گرفته است که تنها تعداد محدودی از آنها توانسته‌اند وارد آزمایش‌های پیش‌بالینی و بالینی شوند. از آنجایی‌که جهت طراحی داروهای ضد سرطان می‌بایست خصوصیات ساختاری G-quadruplexها، نقش‌های بیولوژیکی آنها و موقعیت‌های مناسب این ساختارها جهت پیوند با لیگاندها را به طور کامل مورد بررسی قرار داد، با استفاده از مطالعات داکینگ و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌توان برهمکنش‌های میان ساختارهای G-quadruplex و لیگاندهای مختلف را بررسی نموده و ضمن ارزیابی توانایی پایدارسازی این ساختارها درحضور این لیگاندها، تعیین سهم و ماهیت این برهمکنش‌ها بر روی پایدارسازی ساختارهای G-quadruplex نقش بسیار مهمی در طراحی لیگاندهایی با توان پایدارکنندگی بالا خواهند داشت.

- **بیماری آلزایمر**

بیماری آلزایمر بیماری اختلال نورنی بسیار پیچیده و به سرعت پیش‌رونده است که در شاخه کولینرژیک سیستم عصبی مرکزی آشکار می‌شود. نشانه‌های آلزایمر شامل شروع سریع اختلال کولینرژیک، تشکیل و تجمع سریع پپتیدهای آمیلوئیدβ، فروپاشی اسکلت نورون‌ها و تشکیل کلاف-های نوروفیبریلی پروتئین‌های tau که زیاد فسفریله شده اند، می‌باشد. با افزایش جمعیت سال-خورده، شیوع آلزایمر در میان افراد مسن در حال افزایش است، اما متاسفانه در حال حاضر هیچ درمان تأیید شده‌ای که شروع بیماری را به تاخیر بیاندازد و یا از پیشرفت آن جلوگیری کند وجود ندارد. از سوی دیگر مشکل مهم در بیماری‌های سیستم عصبی مرکزی، وجود سد خونی- مغزی است. با وجودی که این سد خونی- مغزی، برای محدود ساختن ورود مواد سمی به داخل سیستم عصبی مرکزی خدمت می‌کند، اما این سد خونی- مغزی، مانع بزرگی برای رساندن داروهای درمانی به سیستم عصبی مرکزی است. تخمین زده شده است که بیش از ۹۸ درصد از مولکول‌های کوچک داروها با اندازه بیش از ۵۰۰ دالتون نمی‌توانند از سد خونی- مغزی عبور کنند. با کمک تجویز سیستماتیک یا کاشت سیستم‌های دارو رسانی فعال نانو که توانایی آزادسازی کنترل شده و هدفمند عوامل فعال زیستی گوناگون استفاده شده در درمان اختلالات عصبی را دارا هستند، می-توان سد خونی- مغزی را دور زد. هدف این پروژه استفاده از روش‌های محاسباتی برای طراحی ترکیبات موثر در درمان آلزایمر است. علاوه بر این، دارو رسانی ترکیبات طراحی شده نهایی با کمک نانوساختارهای مناسب مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

- **نانوکامپوزیت**

خواص منحصر به فرد مکانیکی، الکتریکی و گرمایی نانولوله‌های کربنی موجب استفاده روزافزون این ترکیبات در صنعت شده است. وارد کردن نانولوله‌های کربنی به بستر پلیمری، موجب تغییر خواص و مورفولوژی ساختاری نانوکامپوزیت می‌شود. با توجه به کاربردها و قابلیت‌های ویـژه‌ای که این ترکیبات دارند، هنوز چالش‌های متعددی برای استفاده از آن‌ها وجود دارد که عمدتا در ارتبـاط بـا درک ماهیـت بـرهم‌کـنش بـین، تقویت کننده و بستر پلیمری، در نانوکامپوزیت‌ها است. نوع نانولوله‌های استفاده شده، چیدمان آن‌ها و مقدار و نوع نقص‌ها و همچنـین ترکیـب شیمیایی پلیمر، مهم‌ترین عواملی هستند که نیروهای بین سطحی برای انتقال تنش و تغییر خواص مکانیکی را کنترل مـی نماینـد. در نتیجـه می‌توان گفت که درک روشن و صحیح ماهیت و شیوه برهم‌کنش بین سطحی از عوامل مهمی است کـه بـه مـا در طراحـی و افـزایش کـارایی نانوکامپوزیت‌ها یاری می‌نماید. شناخت این برهم‌کنش‌ها کمک می‌کند تا بتوانیم خواص و رفتار غیرخطی و فراینـد جـدایش و تفکیـک را بـه درستی درک نماییم. با بررسی مطالعات انجام شده، می‌توان نشان دادکه پژوهش‌ها در این زمینه بسیار نوپا است. به همـین دلیـل بـرای درک درست ماهیت و خواص بین سطحی نانوکامپوزیت‌ها نیازمند روش‌های شبیه‌سازی توام با ابزارهای تجربی هستیم. لذا این پژوهش روی بـرهم کنش بین سطحی و رفتار نانوکامپوزیت اپوکسی- نانولوله از طریق محاسبات وشبیه‌سازی توام با آزمایش‌های تجربی متمرکـز شـده اسـت. در این راستا شاخص‌های ساختاری و همچنین نوع و مقدار نقص در نانولوله و اثر آن‌ها روی خواص نانوکامپوزیت بررسی خواهد شد.

- **خواص بین لایه‌ای**

مطالعه و درک نحوه آرایش زنجیرها و استحکام فصل مشترک پلیمر/ زیرلایه از اهمیت بالایی برخوردار است. به منظور مطالعه این پدیده در مقیاس مولکولی از ابزار شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شده‌است. با توجه به مطالعات انجام شده به منظور افزایش میزان چسبندگی می-توان سطح و زنجیر پلیمر را توسط گروه‌های عاملی اصلاح کرد. این گروه‌های عاملی باید بگونه‌ای باشند که بتوانند برهم‌کنش‌های قوی با یکدیگر برقرار کرده و در نهایت چسبندگی قوی میان پلیمر و سطح ایجاد نمایند. انجام مطالعه چسبندگی فصل مشترک برای سامانه تعریف شده، توسط شبیه-سازی دینامیک مولکولی تا به حال انجام نشده و بررسی تاثیر عامل‌دار کردن پلیمر و سطح بر رفتار چسبندگی با احتساب انرژی برگشت‌ناپذیر اتلافی با کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی ایده نویی

است که می‌تواند در صنعت چسب و پوشش های صنعتی نیز کاربرد داشته باشد. با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌توان پدیده چسبندگی را از دیدگاه مولکولی و میکروسکپی ارزیابی کرده و نحوه تاثیر متقابل عوامل مختلف (نوع و میزان گروه‌های عاملی پلیمر و سطح) را بر انرژی چسبندگی و مکانیزم شکست مورد مطالعه قرار داد. از طرف دیگر، نتایج حاصل شده نیز می-تواند برای ساخت مواد کامپوزیتی و نانوکامپوزیتی که خواص آن‌ها به مقدار زیادی به چسبندگی بین فاز پیوسته و پراکنده وابسته است، استفاده گردد. به منظور مطالعه رفتار چسبندگی و محاسبه کار چسبندگی، لازم است انرژی لازم برای جدایش پلیمر از سطح زیرلایه محاسبه گردد. از طرف دیگر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی امکان پیش‌بینی نحوه آرایش زنجیر پلیمر بر روی سطح، محاسبه انرژی برهم‌کنش‌های موجود در سطح و محاسبه انرژی اتلافی ناشی از تغییر شکل زنجیرهای پلیمر را فراهم می‌سازد. به منظور محاسبه کار چسبندگی لازم است برهم کنش‌های موجود در سطح تماس پلیمر و سطح جامد که ناشی از برهم‌کنش‌های مختلف پیوندی یا غیر پیوندی می‌باشد، و نیز انرژی اتلافی ناشی از تغییر شکل زنجیرهای پلیمر به وجود می‌آید، محاسبه گردند. مجموع این دو مقدار، کار لازم برای شکست این سامانه را بدست می‌دهد. بنابراین برای انجام شبیه‌سازی لازم است پلیمر و سطح را توسط گروه‌های عاملی مختلف و با چگالی‌های سطحی متفاوت عامل‌دار کرد و از طریق شبیه‌سازی، رفتار چسبندگی آن را مورد ارزیابی قرار داد. از بررسی نتایج بدست آمده می‌توان مناسب‌ترین نوع و مقدارگروه‌های عاملی زنجیرهای پلیمری و سطح را که به چسبندگی بهینه‌ای می انجامد، بدست آورد. این گروه‌های عاملی می‌توانند به عنوان پیشنهادی برای افزایش قدرت چسبنده‌های پلیمری در صنعت ارائه شوند. به منظور ارزیابی عملکرد فرایند شبیه‌سازی در بررسی رفتار و میزان استحکام چسبندگی فصل مشترک پلیمر عامل دار- زیرلایه، نتایج شبیه‌سازی با روند تغییرات کار چسبندگی بدست‌آمده از نتایج آزمایشگاهی مقایسه می‌گردد. به طور کلی در این تحقیق روند تغییرات انرژی چسبندگی فصل مشترک تنها با روند تغییرات انرژی چسبندگی در روش آزمایشگاهی در یک سامانه مشابه مورد بررسی قرار داده می‌شود. مطالعه و بررسی رفتار چسبندگی فصل مشترک بین پلیمر عامل‌دار و سطح زیرلایه که شامل محاسبه انرژی برهم‌کنش‌های موجود در سطح، محاسبه انرژی اتلافی، رفتار چسبندگی و نوع مکانیزم شکست می‌باشد، از اهداف این تحقیق است که در نهایت به یافتن شرایطی برای بهینه‌کردن میزان چسبندگی در فصل مشترک پلیمر/سطح زیرلایه، بیانجامد. توجه به انرژی اتلافی ناشی از حرکت زنجیرها و کشیدگی آن‌ها و پیشنهاد تابع اتلافی وابسته به سرعت و دمای فرآیند از نکات مهمی است که در شبیه‌سازی های دینامیک مولکولی کلاسیک که در ارتباط با سامانه دینامیک

چسبندگی انجام گرفته است کمتر مورد توجه قرار گرفته شده و حال آن که مطالعه آن در پروژه پیشنهادی به صورت گسترده‌تری دنبال خواهد شد.

- **ذخیره‌سازی گاز هیدروژن**

گاز هیدروژن به عنوان انرژی پاک شناخته شده است. چالش‌های متعددی برای ذخیره سازی این گاز وجود دارد. یکی از روش‌های ذخیره‌سازی، استفاده از ترکیبات و مواد جاذب سطحی است. در واقع جذب سطحی باید به گونه‌ای باشد که عمل واجذب و استفاده مجدد از این گاز به راحتی صورت پذیرد. شرایط بهینه برای حداکثر ذخیره‌سازی و همچنین بازجذب گاز هیدروژن، مکانسیم جذبی، حد واسط جذب فیزیکی و شیمیایی است. هدف از انجام این تحقیقات، طراحی ترکیبات جدید در این راستا است.

- **جداسازی گاز**

با صنعتی شدن جوامع و افزایش تولید گازهای گلخانه‌ای و با توجه به مضراتی که این گازها، در آلوده کردن محیط زیست دارند، تحقیقات برای جداسازی و تصویه اتمسفر از این گازها در حال رشد فزاینده‌ای است. مهمترین ترکیب تشکیل دهنده گازهای گلخانه‌ای، دی اکسید کربن می‌باشد. هدف از تحقیقات در این زمینه طراحی ترکیبات جدید برای جذب برگشت پذیر و جداسازی مخلوط دی اکسید کربن و ازت است.

- **سلول‌های خورشیدی بر مبنای رنگدانه‌های سنتزی**

سلول‌های خورشیدی بر مبنای رنگدانه‌های سنتزی به جهت بازدهی تبدیل انرژی بالا و هزینه‌بری بسیار پایین، در سال‌های اخیر، مورد توجه بسیاری از محققین قرار گرفته است. مطالعات تئوری و محاسبات کوانتومی، برای مشخص کردن رابطه بین بازدهی تبدیل، ساختار شیمیایی و خواص رنگدانه‌ها، در راستای طراحی و سنتز این ترکیبات با بازدهی مناسب، با اهمیت می‌باشد. بر مبنای محاسبات کوانتومی و بازدهی تبدیل انرژی، طراحی رنگدانه‌های بر پایه نانوساختارهای نیمه رسانا جدید، با حذف و اضافه کردن افزایش گروههای عاملی شیمیایی مختلف و حتی تغییر نانوساختار نیمه هادی در سلول‌های خورشیدی امکان پذیر است.

- **شکافت آب**

شکافت آب توسط نور مرئی به منظور تولید گاز هیدروژن با استفاده از الکترودهای نوری سنتزی، روش بسیار خلاقانه‌ای، برای تولید انرژی پاک است. مطالعات و تحقیقات در این زمینه با تمرکز روی مدل‌های محاسباتی شکافت آب به‌وسیله نور مرئی و رنگدانه‌های آلی، به‌عنوان فتوسنتزکننده‌ها برای تولید گاز هیدروژن در حال انجام است.

مقالات منتشر شده در مجلات علمی

- **سلول‌های خورشیدی و شکافت آب**

The effects of various anchoring groups on optical and electronic properties of new azo-based metal-free dyes for Dye-Sensitized Solar Cells: a DFT and TDDFT study (under review)
Samaneh Bagheri Novir, Seyed Majid Hashemianzadeh

Effect of doping N and F on the properties of rutile TiO2 quantum dots solar cells: A first principle study. (Under review)
Parvin Salehi, Seyed Majid Hashemianzadeh, Amin Khorsandi

Density functional theory study of new azo dyes with different π-spacers for dye-sensitized solar cells Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, **2015**, 143(15), 20-34Samaneh Bagheri Novir, Seyed Majid Hashemianzadeh

Computational investigation of low band gap dyes based on 2-styryl-5-phenylazo-pyrrole for Dye-Sensitized Solar Cells, *Current Applied Physics*, **2014**, 14(10), 1401-1410. Seyed Majid Hashemianzadeh, Samaneh Bagheri Novir.

Computational Model of Hydrogen production by Coumarin-Dye-Sensitized Water Splitting to absorb the visible Light in a Local Electric Field ,*Energy Conversion &Management* , **2012**,62, 154-164 ,M.M. Waskasi, S.M. Hashemianzadeh, O.M. Sarhangi, A. P. Harzandi.

A High-Light-Harvesting-Efficiency of NKX-2593 and NKX-2883 Coumarin Dyes in a Local Electric Field: Can a Local Electric Field Enhance Dye Sensitizer Solar Cells Efficiently?
Journal of Photochemistry & Photobiology, A: Chemistry, ***2011***, *225, 95-105*
O.M. Sarhangi, S.M. Hashemianzadeh, M.M. Waskasi, A.P. Harzandi

Significant enhancement in efficiency of NKX-2807 Coumarin dye by applying external electric field in dye sensitizer solar cell: theoretical study.
Computational and Theoretical Chemistry, ***2011***, *978, 33-40*
O.M. Sarhangi, S.M. Hashemianzadeh, M.M. Waskasi, A.P. Harzandi

- **بیولوژی محاسباتی**

Molecular dynamic simulation study of Boron-Nitride Nanotubes as drug carrier: from encapsulation to releasing (Under review), Sara Roosta, S.M. Hahsemianzadeh

Encapsulation of Cisplatin as an Anti-Cancer Drug into Boron-Nitride and Carbon Nanotubes: Monte Carlo Simulation and Free Energy Calculation (under review) Sara Roosta, Seyed Majid Hashemianzadeh, Sepideh Ketabi

Molecular perception of interactions between bis (7) tacrine and cystamine-tacrine dimer with cholinesterases as the promising proposed agents for the treatment of Alzheimer's disease, Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, **2015**, xx, 1-15, M Eslami, SM Hashemianzadeh, K Bagherzadeh, SA Seyed Sajadi.

Computational evidence to design an appropriate candidate for the treatment of Alzheimer's disease through replacement of the heptamethylene linker of bis (7) tacrine with S-allylcysteine, RSC Advances, **2015**, 5, 66840-66851, Mahboobeh Eslami, Seyed Majid Hashemianzadeh, Kiana Gholamjani Moghaddam, Amin Khorsandi-Lagol, Seyed Abolfazl Seyed Sajadi.

Investigation of thermodynamic and structural properties of drug delivery system based on carbon nanotubes as a carboplatin drug carrier by molecular dynamics simulations, Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry, **2015**, 1-10, Zahra Khatti, Seyed Majid Hashemianzadeh.

Study of DNA base-Li doped SiC Nanotubes in Aqueous Solutions: *A Computer Simulation Study Journal of Molecular Modeling*, **2013**,19,1605 S. Ketabi, S. M. Hashemianzadeh, and M. Moghimi Waskasi.

Molecular Dynamics Simulation of Single-Walled Silicon Carbide Nanotubes Immersed in Water, Journal of Molecular Graphics and Modeling, **2013**, 44, 33-43, Soheila Javadian, Fariba Taghavi, Seyed Majid Hashemianzadeh.

Phase Transition Study of Confined Water Molecules inside Carbon Nanotubes: Hierarchical Multiscale Method from Molecular Dynamics Simulation to Ab Initio Calculation, Journal of Molecular Graphics and modeling, **2012**, 38, 40-49, Soheila Javadian, Fariba Taghavi, Faramarz Yari, Seyed Majid Hashemianzadeh.

The solvation study of carbon, silicon and their combination nanotubes in water solution. *Journal of Molecular Modeling*, **2012**, 18, 3379-3388 H.H. Haeri, S. Ketabi, S.M. Hashemianzadeh.

Binding of Divalent Metal Ions to Calcium-Free Peroxidase: Thermodynamic and Kinetic Studies, Chemistry *& Biodiversity*, **2012**, 9, 1806-1822, K. Nazari, V. Kelay, A. Mahmoudi, and S. M. Hashemianzadeh.

Solvation free energies of glutamate and its metal complexes: A computer simulation study. *Journal of Molecular Modeling*, ***2011***, 17(4), *889-898*
S. Ketabi, H.H. Haeri, S.M. Hashemianzadeh

Temperature effects on the stochastic gating of the IP3R Calcium Release Channel: A Numerical Simulation Study. *Journal of Biological Systems*, ***2009,*** 17 (4), pp. 817-852
H.H. Haeri, S.M. Hashemianzadeh, M. Monajjemi

DFT-Based QSAR Study of Valproic Acid and its Derivatives
QSAR Combinatorial Science, ***2008,*** 27(4), 469 - 474
S. M. Hashemianzadeh, M.A. Safarpour, K. Gholamjani-Moghaddam, A.R. Mehdipour

Theoretical study of the interactions between isolated DNA bases and various IA and IIA ions by ab initio calculations.
Monatshefte fur Chemie, ***2008,***139, 89-100
S. M. Hashemianzadeh, S. Faraji, A.H. Amin, S. Ketabi

The theoretical investigation of one of the derivatives of 1, 2-dithienylcyclopentene as a molecular switch
Journal of Molecular Modelling, ***2008***, 14(4), 315-323
M.A. Safarpour, S.M. Hashemianzadeh, A. Kasaeian

Host-guest inclusion complexes of local anesthetic drugs (procaine hydrochloride and butacaine hydrochloride) with alpha- and beta-cyclodextrins: Semi-empirical studies.
Monatshefte fur Chemie, ***2008,*** 139(7), 764-771
S. M. Hashemianzadeh, A.A. Rafati, Z. Bolboli Nojini,

A stochastic Simulation Study of Inositol 1, 4, 5-trisphosphate receptor (IP3R) Calcium Release channel.
Computational Biology and Chemistry, Volume 31, Issue 2, 1 April ***2007****, Pages 99-109.* H.H. Haeri, S.M. Hashemianzadeh, M. Monajjemi

Theoretical study of the inclusion complexes of α and β-cyclodextrins with decyltrimethylammonium bromide (DTAB) and tetradecyltrimethylammonium bromide (TTAB)
Journal of Molecular Liquids, Volume 130, Issue 1-3, 1 January ***2007****, Pages 104-107*
A.A. Rafati, Z. Bolboli Nojini, S.M. Hashemianzadeh

Simulation of DNA Bases in Water: Comparison of the Monte Carlo Algorithm
Biochemistry Moscow, ***2006****, Volume 71, Number 1, pp. S1-S8*
M. Monajjemi, S. Ketabi, M. Hashemianzadeh, A. Amiri

A Simulation Study of Calcium Release Channel
Journal of Physical and Theoretical Chemistry, ***2005****, Volume 3, Number 2, Pages 141-147.* H.H. Haeri, S.M. Hashemianzadeh, M. Monajjemi

Hydration energy of adenine,guanine,cytosine and thymine:Monte Carlo Simulation

*Journal of Physical and Theoretical Chemistry, **2004**, Volume 1, Number 2, Pages 65-73.*S. Ketabi, S.M. Hashemianzadeh, M. Monajjemi

- **پلیمرها و مواد فعال سطحی**

Investigation of Interface between Polyethylene and Functionalized Graphene: A computer Simulation Study, Current Applied Physics, **2015**, xx, xx , S Javan Nikkhah, MR Moghbeli, SM Hashemianzadeh.

Effect of Surface Composition on Interfacial Adhesion between Polyethylene and Graphene sheet (under review)
S. Javan Nikkhah, M. R. Moghbeli, S. M. Hashemianzadeh (under review)

Interfacial adhesion between functionalized polyethylene surface and graphene via molecular dynamic simulation Journal of Molecular Modeling, **2015**, 21, 1-12, S. Javan Nikkhah, M. R. Moghbeli, S. M. Hashemianzadeh

Mixed Micellization of Gemini and Conventional Surfactant in Aqueous Solution, a Lattice Monte Carlo Simulation, *Journal of Molecular Graphics and Modeling*, **2014**, 53, 221-227, Hussein Gharibi, Zahra Khodadadi, S. Morteza Mousavi-Khoshdel, S. Majid Hashemianzadeh, Soheila Javadian.

Monte Carlo Simulation of Binary Surfactant/Contaminant/Water Systems .*Journal of* Molecular Graphics and Modeling, **2012**, 36, 20-29 , H. Gharibi, Z. Khodadadi, S.M. Mousavi-Khoshdel, S.M. Hashemianzadeh.

The Role of Interaction Energies in Behavior of Mixed Surfactant Systems: A Lattice Monte Carlo Simulation.
Langmuir, **2010**, 26 (17), pp. 13786-13796
N. Poorgholami-Bejarpasi, S.M. Hashemianzadeh, S.M. Mousavi-Khoshdel, B. Sohrabi

Investigation of the Mixing Behavior of Surfactants by the Lattice Monte Carlo Simulation.
Journal of Molecular Modeling, **2010**, 16 (9), pp. 1499-1508
N. Poorgholami-Bejarpasi, S.M. Hashemianzadeh, S.M. Mousavi-Khoshdel

Lattice Monte Carlo simulation of dilute ionic surfactants
Journal of Molecular Liquids, **2008**, 138(1-3), 147-154
S.M. Hashemianzadeh, H. Gharibi, S.M. Mousavi-Khoshdel, B. Sohrabi, M.A. Safarpoor

Complexation between a Macromolecule and an Amphiphile by Monte Carlo Technique
J. Phys. Chem. B, **2006**, 110, 13547-13553
H. Gharibi, R. Behjatmanesh-Ardakani, S.M. Hashemianzadeh, S.M. Mousavi-Khoshdel

Further Study on the Micellization of a Symmetric Amphiphile Using the Monte Carlo Technique.
Bulletin of the Chemical Society of Japan, Vol. 79, **2006**, No. 9 pp.1355-1361
H. Gharibi, R. Behjatmanesh-Ardakani, S.M. Hashemianzadeh, B. Sohrabi, S. Javadian

Study of thermodynamic parameters in amphiphilic systems by lattice Monte Carlo: effect of tails and heads
Theoretical Chemistry Accounts: Theory, Computation, and Modeling (Theoretica Chimica Acta), **2006**, Volume 115, Number 1, Pages 1-17
H. Gharibi, R. Behjatmanesh-Ardakani, S.M. Hashemianzadeh, S.M. Mousavi-Khoshdel, S. Javadian, B. Sohrabi,

Determination of Interaction Parameters In Mixed Surfactant System using a Monte Carlo Simulation Technique. Journal of Colloid and Surfaces A, 196, **2002**, 31
H. Gharibi, M. Hashemianzaheh, B.M. Razavizadeh

- **نانوکامپوزیت‌ها**

A novel combined molecular dynamics–micromechanics method for modeling of stiffness of graphene/epoxy nanocomposites with randomly distributed graphene, *Materials & Design*, **2014**, 64, 96-101, M.M. Shokrieh, Z. Shokrieh, S.M. Hashemianzadeh.

Effective parameters in modeling of graphene sheet Young's modulus Modares *Mechanical Engineering*, **2012**, 12(3), 147.

- **ذخیرسازی و جداسازی گاز (CO_2 & H_2)**

Hydrogen adsorption on SiC nanotube under transverse electric field, *Physics Letters A*,**2014**, 378 , 2549-2552, Ehsan Masumian, Seyed Majid Hashemianzadeh, Alireza Nowroozi.

A Combined Ab-Initio and Monte-Carlo Investigation of an Equimolar H2/He Mixture Adsorption in Silicon Nanotubes: Temperature, Pressure, and Pore Size Effects. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, **2012**, Volume 9, Number 5, pp. 737-744. Seyedehsaleheh Razavi, Seyed Majid Hashemianzadeh, Seyedeh fatemeh Razavi, Sahra Balilehvand, Faramarz Yari, Fatemeh Sigarchi.

Investigation of Hydrogen and Methane Adsorption/Separation on Silicon Nanotubes: A Hierarchical Multiscale Method from Quantum Mechanics to Molecular Simulations. *Adsorption*, **2012**, 18, 13, S. Balilevand, S.M. Hashemianzadeh, H. Karimi.

Density Functional Theory Study of Carbon Monoxide Adsorption on the Inside and Outside of the Armchair Single-Walled Carbon Nanotubes
*Current Applied Physics, **2011**, 11(3), 776-782*

K. Azizi, S.M. Hashemianzadeh, S. Bahramifar

Prediction of Helium and Neon Adsorption and Separation on Carbon Nanotube by Employing Monte Carlo Simulation.
Journal of Molecular Modeling, ***2011***, *17(4), 785-794*
Z. Bolboli Nojini, A.A. Rafati, S.M. Hashemianzadeh, S. Samiee

Modeling the adsorptive selectivity of carbon nanotube for effective separation of CO2/N2 mixtures.
Journal of Molecular Modeling, ***2011***, 17 (5), 1163-1172
S.S. Razavi, S.M. Hashemianzadeh, H. Karimi

Canonical Monte Carlo Simulation of Oxygen and Nitrogen Mixtures Adsorption on Single Wall Carbon Nanotube: Temperature and Pressure Effect
Journal of Computational Chemistry, ***2010***, 31 (7), pp. 1443-1449
A.A. Rafati, Z. Bolboli Nojini, S.M. Hashemianzadeh, N. Naghshineh

First-Principles Study of Hydrogen Storage on Si Atoms Decorated C_{60}
International Journal of Hydrogen Energy, ***2009***, 34, 2319
N. Naghshineh, S.M. Hashemianzadeh

Effect of the Adsorption of Oxygen on Electronic Structures and Geometrical Parameters of Armchair Single-Wall Carbon Nanotubes: A Density Functional Study
Journal of Colloids and Interface Science, ***2009***, 336 (1), pp. 1-12
A.A. Rafati, Z. Bolboli Nojini, S.M. Hashemianzadeh

Theoretical Study of the Adsorption of Nitrogen Monoxide on Single Wall Carbon Nanotubes.
J. Phys. Chem. C, ***2008***, 112(10), 3597-3604
A.A. Rafati, Z. Bolboli Nojini, S.M. Hashemianzadeh, N. Naghshineh

اطلاعات تماس

- **مدیر آزمایشگاه تحقیقاتی**

سید مجید هاشمیان زاده

طبقه سوم دانشکده شیمی- اتاق ۳۰۳

تلفن: ۷۷۲۴۰۲۸۷

فاکس:۷۷۴۹۱۲۰۴

ایمیل :

Hashemianzadeh@iust.ac.ir
molecular_simulation_lab@yahoo.com

- **کارشناس فنی و مسئول آزمایشگاه**

سید مصطفی رحیمیان کلور

تلفن: ۷۷۴۵۱۵۰۵ داخلی ۸۳۲۷

ایمیل:

Rahimian.sm@gmail.com

- **آدرس**

تهران- نارمک- دانشگاه علم و صنعت ایران-دانشکده شیمی- آزمایشگاه تحقیقاتی شبیه‌سازی مولکولی