

## برنامه ارائه پوسترها در روز ۲۹ آبان ۱۴۰۳

| ردیف | نام محقق                    | کد مقاله        | شماره پنل | عنوان مقاله  |
|------|-----------------------------|-----------------|-----------|--|
| 1    | ماریه دهورای                | ipcc24-00180001 | 1         | مطالعه مهارکننده های PIM-3 کیناز به عنوان عامل ضد سرطان با استفاده از کیوسار سه بعدی   |
| 2    | مریم مقدس                   | ipcc24-00270005 | 1         | رهایش کنترل شده داروی بنامتازون با استفاده از ساختارهای مزوحفره سیلیکایی سه بعدی   |
| 3    | مهسا عدالت                  | ipcc24-00350007 | 1         | آنالیز بیوانفورماتیک داده های بیانی در بیماری مولتیپل اسکلروزیس  |
| 4    | مریم السادات حسینی بهارانچی | ipcc24-01960155 | 1         | بررسی جفت شدگی مولکول-نانوذره با ارائه مدل برهمکنشی دوقطبی-دوقطبی  |
| 5    | داود سیف زاده               | ipcc24-00480010 | 2         | پوشش الکترولس نیکل-فسفر حاوی نانو ذرات اکسیدکبالت بر روی آلیاژ منیزیم  |
|      |                             | ipcc24-00480011 | 2         | پوشش نانوکامپوزیتی اپوکسی حاوی MOF-MIL-101(Al) برای محافظت از خوردگی فولاد   |
| 6    | زهرا استادشریف معمار        | ipcc24-02000293 | 2         | مطالعه توانایی میدان های نیروی مبتنی بر OPLS در محاسبه ی خواص ساختاری مایعات یونی دوکاتیونی  |
| 7    | سمانه سلیمانی               | ipcc24-00070015 | 2         | مطالعه ترمودینامیکی نانوذرات مغناطیسی Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> /SBA-16-NH <sub>2</sub> به عنوان سیستم دارورسانی                  |
| 8    | مهلا مهرپرور                | ipcc24-00170017 | 3         | معرفی ترکیبات جدید برای مهار رشد سلول های سرطان پستان توسط محاسبات D-QSAR <sup>3</sup>   |
| 9    | مونا خاکسفیدی               | ipcc24-00330018 | 3         | بررسی نظری افزایش مایکل به عنوان واکنش کلیدی ترکیبات کالکون در حضور متان تیول  |
| 10   | فاطمه سادات بنی جمالی       | ipcc24-03080280 | 3         | برهمکنش مولکولی دایمر کیتوزان با اوره و آب با استفاده از نظریه تابعی چگالی   |
| 11   | کوثر محمدی                  | ipcc24-00220019 | 3         | بررسی اثر استخلاف های الکترون دهنده و الکترون کشنده روی خواص داروی پیرفنیدون جهت بهبود مهار بیماری فیروز ریوی                          |
| 12   | الهام گراوند تبار           | ipcc24-00580022 | 4         | امکان استفاده ازکالیکس [۴] اپیرول بعنوان اند باتری های یون لیتیومی، سدیمی ویتاسیم  |
| 13   | اکبر منصوری نسب             | ipcc24-00700023 | 4         | مطالعه تئوری روش NICS با محاسبات کوانتومی برای ترکیب سیکلوبوتادین و ترکیبات آن با استخلاف های مختلف                                    |
| 14   | رحیم رحمن آبادی             | ipcc24-00770024 | 4         | مطالعه جذب و احیای گاز CO <sub>2</sub> روی نانوقفس های Al <sub>11</sub> CuN <sub>12</sub> و Al <sub>5</sub> CuN <sub>6</sub>           |
| 15   | حنانه خان امیری             | ipcc24-02620152 | 4         | مطالعه خواص الکتروشیمیایی الکتروکاتالیزت های چهارچوب فلز-آلی Co و Ni-Co بر روی فوم نیکل و کاربرد آن به عنوان آند در پیل های سوختی اوره |
| 16   | بهنوش اسلام پناه            | ipcc24-00190027 | 5         | بررسی تاثیر کمپلکس شدن با یونهای فلزی بر اسیدیته پیرولوکینولین کینون   |
| 17   | مهسا یوسفیان                | ipcc24-00600030 | 5         | مطالعه محاسباتی آئروسول آلی ثانویه ناشی از اکسیداسیون ترانس-۲-پنتنال با رادیکال کلر  |
| 18   | مهران فیضی ده نایی          | ipcc24-00830031 | 5         | بررسی فعالیت بیولوژیکی یک مشتق پیریدو [d-۲،۳] پیریمیدین بر اساس محاسبات DFT و شبیه سازی داکینگ مولکولی                                 |
| 19   | نفیسه صالحی نجف آبادی       | ipcc24-00620029 | 5         | یک مطالعه ی شبیه سازی مولکولی برای تأثیر کلسترول بر تجمع فیبریل های آمیلوئید بتا در غشای سلولی   |
|      |                             | ipcc24-00620034 | 6         | اعمال میدان های الکتریکی برای جلوگیری از تجمع پپتیدهای آمیلوئید بتا بر روی غشاء سلولی: یک شبیه سازی دینامیک مولکولی                    |
|      |                             | ipcc24-00620050 | 6         | بررسی نقش محافظتی مولکول [AC0107] در بیماری آلزایمر با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی   |

|  |    |                 |                          |    |
|--|----|-----------------|--------------------------|----|
| فرآیندهای برخورد، پارامترهای دینامیکی، وابستگی دما و فرایند برخورد در واکنش CN+H2 بر روی سطح انرژی پتانسیل درون یابی شده | 6  | ipcc24-00870035 | فائزه یونسی              | 20 |
| بررسی نظری خواص فوتوفیزیکی و انتقال پروتون در حالت برانگیخته در ۱ و ۴-دی هیدروکسی آنتراکوئینون                           | 6  | ipcc24-01050045 | اسماء ریگی               | 21 |
| پیش بینی عدد کنوردیناسیون سطح و توده مایعات یونی   | 7  | ipcc24-01020037 | انسیه قاسمیان لمراسکی    | 22 |
| ساخت نانوذرات کربن متخلخل بعنوان یم جاذب با کارایی بالا  | 7  | ipcc24-01020038 |                          | 23 |
| بررسی مقادیر ترمودینامیکی گلیسین در فاز محلول  | 7  | ipcc24-01030039 | زهرا حسن زاده تازه قشلاق | 23 |
| تأثیر تغییر نقص روی ظرفیت کوانتومی الکترو پاید سیلیسی در عملکرد ابرخازن ها   | 7  | ipcc24-01030040 |                          | 24 |
| جذب و جداسازی اتان-اتیلن و پروپان-پروپیلن توسط چارچوب‌های فلز-آلی سری هم‌خانواده ZUL با استفاده از روش شبیه‌سازی         | 8  | ipcc24-00800048 | فاطمه ابراهیم زاده جاری  | 24 |
| مطالعه نظری جذب داروهای هیدروکسی اوره، مرکاپتوپورین و تیوگوانین توسط MOFهای مبتنی بر تیتانیوم به روش GCMC                | 8  | ipcc24-00810049 | سولماز تیمورزاده         | 25 |
| افزایش پایداری آنزیم لیزوزیم از طریق طراحی محاسباتی: یک رویکرد هم افزایی با ترکیب یادگیری عمیق و ترمودینامیک             | 8  | ipcc24-00670051 | حسن راد کفترودی          | 26 |
| بررسی قدرت مهار پروتئاز اصلی توسط برخی از مشتقات اِپسِلن: یک مطالعه ی داکینگ مولکولی                                     | 8  | ipcc24-00690053 | هانیه بلوچ               | 27 |
| بررسی تأثیر Na+ بر پایداری و احتمال تولید یوراسیل و توتومرهای آن با کمک زنجیره مارکوف                                    | 9  | ipcc24-01110057 | زینب کرکنی               | 28 |
| خواص مکانیکی و دمای انتقال شیشه‌ای شدن چارچوب فلز-آلی پرشده با رزین اپوکسی: یک مطالعه دینامیک مولکولی                    | 9  | ipcc24-01410061 | مانده ابراهیم            | 29 |
| چارچوب‌های فلز-آلی بر پایه‌ی آهن به‌عنوان الکتروکاتالیست های کارآمد برای واکنش تولید اکسیژن                              | 9  | ipcc24-01060063 | دانیال فرهمند            | 30 |
| مطالعه محاسباتی ساختار الکترونی داروی پاراستامول با استفاده از نظریه کوانتومی اتم درمولکول (QTAIM)                       | 9  | ipcc24-00920143 | سعیده پورهادی نجف آبادی  | 31 |
| مطالعه الکتروشیمیایی ماده دارویی پاراستامول بر روی الکترودهای اصلاح شده با ساختار گرافنی                                 | 10 | ipcc24-00920062 |                          | 32 |
| تهیه نانوکامپوزیت با درجه تخلخل متفاوت از زیست‌توده بر پایه مس اکسید   | 10 | ipcc24-01450067 | سودابه سیفی              | 32 |
| تصفیه فتوکاتالیستی پساب واقعی اسپنت کاستیک واحدهای الفین صنایع پتروشیمی مبتنی بر اصول نانوشیمی فیزیک                     | 10 | ipcc24-01500068 | امین احمدپور             | 33 |
| مطالعه DFT خواص جذب ترکیبات آلی فرار توسط یک نانو صفحه B2N   | 10 | ipcc24-00200069 | رضوان رحیمی              | 34 |
| بررسی نظری تمایل اتصال دسته ای از ترکیبات طبیعی پلی فنولی به پروتئاز اصلی کروناویروس                                     | 11 | ipcc24-01120072 | صفیه ریگی شایسته         | 35 |
| امکان سنجی ذخیره سازی هیدروژن بر روی ساختار B12P12 تزئین شده با کلسیم : مطالعه نظری بر پایه DFT                          | 11 | ipcc24-01090075 | ثمین محمدی قشلاق         | 36 |
| طراحی محاسباتی نیم‌رساناهای آلی جهت کاربرد در سلول‌های خورشیدی آلی   | 11 | ipcc24-00540158 | فاطمه فاضلی              | 37 |
| مطالعه محاسباتی به دام اندازی گاز CO2 بر روی ساختار C68-گرافین تزئین شده با فلز Al                                       | 11 | ipcc24-02190249 | زهرا تابنده              | 38 |
| مطالعه نظری خواص فوتوفیزیکی کمپلکس‌های Pt(II) بر اساس لیگاند بنزوکینولین (bzq) و کاربرد آن‌ها در OLED                    | 12 | ipcc24-02300203 | بتول مرادپور             | 39 |

|  |    |                 |                         |    |
|--|----|-----------------|-------------------------|----|
| تزیین بوروفن با اتم اسکاندیوم برای ارتقای ظرفیت جذب هیدروژن در آن  | 12 | ipcc24-02900200 | سیما روشن               | 40 |
| بینش نظری جدید در مورد مکانیسم آسایش غیرتابشی ساختار هسته مایکوسپورین ها: الگوی مرکزی آمینوسیکلوهگزانون            | 12 | ipcc24-02590193 | سیمین روشن              | 41 |
| مطالعه نظری سینتیک مکانیسم قطعه قطعه شدن دی‌پپتیدهای معین و ارائه نگرشی نو برای نقش نوع کاتیون فلزی در این مکانیسم | 12 | ipcc24-01250080 | نازنین لقمانی           | 42 |
| (با سطح بیس (ایمینوتیولیو)رودیم SO2 برهمکنش گاز بررسی محاسباتی)  | 13 | ipcc24-02040100 | منصوره اصفهانی          | 43 |
| شناسایی و حذف گاز NO با استفاده از سطح h-BN آلاییده شده با گوگرد   | 13 | ipcc24-00210082 | محمد رضا زمانی سیفی کار | 44 |
| بررسی ترمودینامیکی استخلاف‌دار کردن گرافن اکساید با نیتروژن پیروی با محاسبات نظریه تابعی چگالی                     | 13 | ipcc24-00820083 | فاطمه مظفری             | 45 |
| بررسی رفتار توزیع کافتین در سیستم‌های دوفازی آبی پلی‌پروپیلن گلیکول- نمک تتراآلکیل آمونیوم هالید                   | 13 | ipcc24-01860091 | نهاد نصرت پور           | 46 |
| پیشنهاد تابعی‌های هیبریدی محدوده مجزا برای توصیف فرآیند شکافت ناهمسان فسفرسانس دمای اتاق                           | 14 | ipcc24-00650094 | فاطمه وزیری علمدارلو    | 47 |
| سینتیک رفتار جذب و واجذب سطحی یک رنگدانه طبیعی روی نانوکامپوزیت بیوپلیمری حاوی MOF و نانوذرات مغناطیسی             | 14 | ipcc24-01590084 | اعظم جباری              | 48 |
| استفاده از بیونانوکامپوزیت پلیمر/چارچوب فلزی-آلی به عنوان یک جاذب جدید برای جذب انتخابی آنی اکسیدان‌های طبیعی      | 14 | ipcc24-01590081 |                         |    |
| تهیه حلال اتکتیک عمیق جدید مبتنی بر تیمول و بررسی خواص فیزیکوشیمیایی آن  | 14 | ipcc24-01340086 | سولماز رفعتی            | 49 |
| بررسی کاربرد حلال اتکتیک جدید مبتنی بر تیمول در استخراج متیلن بلو از محلول آبی                                     | 15 | ipcc24-01340087 |                         |    |
| شبیه‌سازی دینامیک مولکولی حلال اتکتیک عمیق غیر یونی مبتنی بر تیمول   | 15 | ipcc24-01340092 |                         |    |
| محاسبات نظریه تابعی چگالی بر روی هیدروژناسیون دی اکسید کربن بر پایه تیتانیوم دی اکسید                              | 15 | ipcc24-02060103 | مصطفی ترکشوند           | 50 |
| اوزونولیز تیوفن: مطالعه محاسباتی مکانیسم واکنش   | 15 | ipcc24-01710089 | مریم سیدشریفی           | 51 |
| تجزیه و تحلیل جبهه‌های اتوکاتالیستی در هندسه شعاعی برای سیستم یدات-اسید آرسنیوس (IAA)                              | 16 | ipcc24-01710102 |                         |    |
| شبیه‌سازی دینامیک مولکولی حلال‌های اتکتیک عمیق سبز بر پایه کولین و مشتق‌های آن با اوره                             | 16 | ipcc24-01930279 | فاطمه فتاحی             | 52 |
| بارگذاری داروی متوترکسات بر بستر نانولوله ی بورنیتریدی اصلاح سطحی شده: مطالعه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی            | 16 | ipcc24-01930093 | محمد حسین کوثری         | 53 |
| مطالعه ساختار ملیتین و پپتید MDP1 با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی                                      | 16 | ipcc24-01730105 | یسرا دلشاد              | 54 |
| مطالعه DFT جذب آمونیوم از محیط پساب توسط جاذب ژئولیت کلینوتیلولیت  | 17 | ipcc24-02650150 | مهناز شیخی              | 55 |
| بررسی خواص شیمی فیزیکی گوشت شتردر دماهای مختلف با کاربرد مدل توسعه یافته فلوری-رنر                                 | 17 | ipcc24-00880107 | مریم عابدی              | 56 |
| استفاده از مدل توسعه یافته UNIQUAC برای بررسی تعادل فاز و پارامترهای برهمکنش در سیستم‌های آبی حاوی غیرالکترولیت    | 17 | ipcc24-00880206 |                         |    |
| بررسی پارامترهای ترمودینامیکی محلول آبی NaCl-RbCl-LiCl با استفاده از مدل برهم‌کنش یونی پیتر                        | 17 | ipcc24-00880109 |                         |    |
| ساخت کربن پارچه ای با سطوح ابرآبگریز-ابرآبدوست برای تبخیر خورشیدی در سطح مشترک                                     | 18 | ipcc24-01680108 | حانیه تهذیبی            | 57 |
| امکان‌سنجی شناسایی برخی عناصر فلزی دانه‌برنج با استفاده از طیف‌سنجی جرمی زمان پرواز-واجذب یونش لیزری               | 18 | ipcc24-01390111 | رویا مردانیان           | 58 |



|  |    |                 |                         |    |
|--|----|-----------------|-------------------------|----|
| امکان سنجی شناسایی و جذب مولکول نیکوتین توسط نانو ساختار B12N12 با استفاده از روش های محاسباتی   | 18 | ipcc24-02240113 | سپهر برزگر              | 59 |
| بررسی نظری برهمکنش دارو ۵-فلوئورواوراسیل (5FU)، @FU <sup>o</sup> B12P12 با آدنین نوکلئو باز، AIM، TD-DFT، DFT  | 18 | ipcc24-02150112 | مینا حیدری              | 60 |
| ارزیابی محاسباتی جذب گاز سمی سیانورن برومید بر روی سطح نانوقفس های B12N12، AIB11N12 و B12N11P در حضور میدان الکترواستاتیک: مطالعه DFT، TD-DFT، AIM و ELF | 19 | ipcc24-02150114 |                         |    |
| مطالعه دینامیک مولکولی و مدل سازی برای جلوگیری از انباشتگی پروتئین تاو به کمک مهارکننده در بیماری آلزایمر  | 19 | ipcc24-02260118 | نسرین دلفان             | 61 |
| بررسی نظری ساختار مولکولی آمفتامین و مت آمفتامین، و پتانسیل گرافن برای جذب آن ها   | 19 | ipcc24-02340119 | لادن رضائیان            | 62 |
| مطالعه رفتار الکتروشیمیایی و ابرخازنی کمپلکس کاتوسن خودانباشته بر روی الکترو د فیر کربنی   | 19 | ipcc24-00060120 | زهرا سمیعی              | 63 |
| تأثیر استخلاف BN بر خواص نوری غیرخطی نانوکاسه C <sub>22</sub> H <sub>12</sub>  | 20 | ipcc24-01040121 | سلماز عبدالهی جونقانی   | 64 |
| بررسی مهارکننده بالقوه علیه آنزیم پروتئاز اصلی سارس-کوو-۲ (عامل ایجاد کووید-۱۹) با کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی   | 20 | ipcc24-02280122 | سید محمد حسین رحمتی     | 65 |
| اثرات برهم کنشی ویژه و غیر ویژه حلال روی پاسخ غیرخطی نوری مرتبه سوم متیل یلو   | 20 | ipcc24-00640124 | زینب نصرالله زاده       | 66 |
| پاسخ نوری غیرخطی نانوخوشه های تیتانیوم کاربید: یک مطالعه نظری  | 20 | ipcc24-01070126 | حدیثه سلیمانی جعفرآبادی | 67 |
| بررسی سینتیک و ترمودینامیک جذب سطحی کاربامازین بوسیله نانولوله چند جداره   | 21 | ipcc24-01080128 | مجید محمدی              | 68 |
| مطالعه جذب گاز گلخانه ای CF <sub>4</sub> در نانولوله کربنی با روش شبیه سازی مونت کارلو   | 21 | ipcc24-02330130 | وحید سخنوران            | 69 |
| مطالعه نظری گرمای جذب همپوشی (Qst) گازهای سیلان، مونوکسیدکربن و هیدروژن روی گرافیت   | 21 | ipcc24-02330131 |                         |    |
| افزایش عملکرد مواد پیزوالکتریک برای تخریب آلاینده های آلی  | 21 | ipcc24-02390132 | علیرضا محمودی هاشمی     | 70 |
| بررسی ترمودینامیکی جذب سطحی مولکول اسید فولیک بر روی نانوحامل پپتیدی دی فنیل آلانین در درمان سرطان: مطالعات تئوری  | 22 | ipcc24-01220133 | مریم بهشتی مارنانی      | 71 |
| توسعه تابعی های چگالی دوهیبریدی جدید برای پیش بینی انرژی های برانگیختگی در تابشگرهای دارای شکاف انرژی یکتایی-سه تایی وارونه                              | 22 | ipcc24-02450134 | طاهره ایزدخواست فسانی   | 72 |
| بسیار بر پایه ی بنزوکینون به عنوان آند برای باتری های یون لیتیوم/سدیم/پتاسیم: یک مطالعه نظری   | 22 | ipcc24-01240135 | نگین یزدخواستی          | 73 |
| مطالعه محاسباتی طیف رامان تقویت شده از سطح آمینوتولون در برهمکنش با سطح نقره و طلا   | 22 | ipcc24-01620136 | صهیب شاهمحمدنژاد        | 74 |
| طراحی و سنتز یک چارچوب آلی-کوالانسی مزدوج جدید بر پایه پرلین و کاربرد آن در تبدیل نور-گرمای انرژی خورشیدی و نمک زدایی از آب دریا                         | 23 | ipcc24-00780137 | مرتضی ترابی             | 75 |
| ارتباط بین نرخ پرش و حفظ همسازی در کانال های یونی  | 23 | ipcc24-00450175 | مینا سیفی               | 76 |
| بررسی مکانیک کوانتومی انتقال های الکترونی طیف های UV-Vis در برخی مشتقات دارویی پیریمیدوکینولین: مطالعه اربیتال های انتقال طبیعی                          | 23 | ipcc24-01310141 | سارا فخرایی             | 77 |
| پایداری نوری و خواص فوتوفیزیکی سامانه ی آلی بر پایه کلکون  | 23 | ipcc24-02210142 | رومینا چگینی            | 78 |
| بررسی ساختار و روش تهیه متفاوت گرافن اکساید  | 24 | ipcc24-00390145 | امیر بلوچ               | 79 |



|  |    |                 |              |    |
|--|----|-----------------|--------------|----|
| مطالعه اثر پیوندهای عرضی بر هیدروژل های بر پایه سلولز برای قابلیت جذب آب بالاتر به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی | 24 | ipcc24-01950146 | زینب اشرفی   | 80 |
| محاسبه ویژگی های توپولوژیک با تابع ونیر برای نیمه هادی نیکل-بنزن هگزاتیول  | 24 | ipcc24-02400147 | نقیسه فلسفی  | 81 |
| نقش نانوصفحه های گرافن اکسید در تشکیل هیدرات های گازی متان   | 24 | ipcc24-02170129 | پرنیان یوسفی | 82 |
| مقایسه دو مایع یونی زیستی: ساختار، دینامیک و برهم کنش  | 25 | ipcc24-02170156 |              |    |

### برنامه ارائه پوسترها در روز ۳۰ آبان ۱۴۰۳

| ردیف | نام محقق             | کد مقاله        | شماره پنل | عنوان مقاله  |
|------|----------------------|-----------------|-----------|--|
| 1    | زکيه اسمعيلي گنهرانی | ipcc24-02130157 | 1         | کاربرد فتوراکتورهای سلول سوختی در فرآیندهای اکسیداسیون پیشرفته و تولید همزمان الکتریسیته   |
| 2    | رابعه خوشنویس زاده   | ipcc24-01480076 | 1         | تهیه، ارزیابی ویژگی های بیوفیزیکی و زیستی لیپوزوم کاتیونی مترونیدازول  |
| 3    | مرتضی منتظرظهوری     | ipcc24-00860159 | 1         | سینتیک تخریب فوتوکاتالیزوری پارا دی متیل آمینو-پارا آزوبنزن سولفونیک اسید در محیط بافری با استفاده از تیتانیم دی اکسید نانو ساختار |
| 4    | مریم گودرزی          | ipcc24-02160160 | 1         | مطالعه ابتدا به ساکن خواص الکترونی و ساختاری نانوخوشه های اکسید آهن بین دو لایه گرافن  |
| 5    | مریم دهستانی         | ipcc24-02820242 | 2         | شناسایی اهداف جدید اسید آبساز با استفاده از رویکردهای محاسباتی   |
| 6    | زهرا رضاپور          | ipcc24-02750162 | 2         | بررسی نقش کاتیون عامل دار شده در برهم کنش کاراکرول با مایعات یونی آمینواسیدی به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی                      |
| 7    | ستوده باقری          | ipcc24-02760168 | 2         | تأثیر تعداد حلقه های آروماتیک بر اثر مشارکتی بین برهمکنش های $CH...π$ و $N...π$ در حلقه پیرازین                                    |
|      |                      | ipcc24-02760165 | 2         | مطالعه نظری اثرات مشارکتی و استخلاف بر خواص پیوندهای تترل و هیدروژنی در کمپلکس های سه جزئی X-Ph-CN:SiF4:HF                         |
| 9    | محمد مهدی دهشیری     | ipcc24-00940166 | 3         | مطالعه سطح انرژی پتانسیل بین مولکولی برای کربن دواتمی و گاز نئون   |
| 10   | معصومه فراهانی فروزی | ipcc24-01560167 | 3         | کاربرد تئوری تابع چگالی (DFT) برای بررسی ویژگی ریزساختاری سیستم های اتیلن گلیکول دی استات + ۱-الکل ها (C3-C8) از دیدگاه تجربی      |
| 11   | خاطره خانلرزاده      | ipcc24-02510140 | 3         | بررسی برهم کنشهای بین مولکولی هیستیدین و محلول های مائی مالتوز بر اساس خواص حجمی و آکوستیکی  |
| 12   | فاطمه پرویز          | ipcc24-01420170 | 3         | مطالعه خواص حجمی سیستم دوجزبی محلول غیر الکترولیت شامل اتیلن گلیکول مونو متیل اتر و ۱- هپتانول در دماهای مختلف                     |
| 13   | حمید رضا مسعودی      | ipcc24-02770169 | 4         | تأثیر یون های $Cu^+$ و $Cu^{2+}$ بر پایداری جفت شدگی زانتین-اوراسیل: یک مطالعه نظری  |
|      |                      | ipcc24-02770171 | 4         | مطالعه نظری تأثیر استخلاف بر پایداری یک ساختار شش ضلعی متشکل از بنزن و پیریمیدین   |



|   |    |                 |                           |    |
|---|----|-----------------|---------------------------|----|
| بررسی حذف آلاینده‌های محلول آبکاری کروم سخت با استفاده از روش الکترودیالیز  | 4  | ipcc24-01770176 | یدالله شاد                | 14 |
| توسعه رابط کاربری پایتون با هدف استخراج هامیلتونین جفت‌شدگی و ویرونیکی خطی  | 4  | ipcc24-02490180 | محمد شمس احمدسرانی        | 15 |
| معرفی پایگاه‌های اطلاعات شیمی با تمرکز بر ساختارهای متخلخل  | 5  | ipcc24-02710181 | ستاره سینی چی             | 16 |
| سنتر و مطالعه رفتار الکتروشیمیایی NMC811 به عنوان ماده فعال کاتدی در باتری‌های لیتیوم-یون   | 5  | ipcc24-01660182 | فریدین موسوی              | 17 |
| مطالعه ترمودینامیکی اثر داروی آمانتادین روی میسل شدن سورفکتانت ستیل پریدینوم کلرید براساس اندازه‌گیری‌های هدایت سنجی                          | 5  | ipcc24-02070183 | سیده فاطمه نورانی خمیرانی | 18 |
| بررسی پایداری آنزیم لیپاز تثبیت‌شده بر روی غشای بسپاری اصلاح‌شده با نانوصفحه‌های گرافن اکسید  | 5  | ipcc24-01190184 | فرانک جعفریان             | 19 |
| بررسی تئوری-عملی افزایش برداشت نفت با روش تئوری تابعیت چگالی: استفاده از استامینوفن به عنوان دمولسیفایر                                       | 6  | ipcc24-02010187 | اسدالله فرهادی            | 20 |
| ساخت توری استیل با سطح آب‌گریز با استفاده از کند و سوز لیزری با هدف جداسازی نفت از آب   | 6  | ipcc24-01760188 | فانزه امیدعلی             | 21 |
| کاربرد شبیه‌سازی مکانیک کوانتومی نظریه تابع چگالی (DFT) در تعیین خواص فوتوکاتالیست‌های فرآیند اکسیداسیون پیشرفته                              | 6  | ipcc24-02850189 | مینا صدیقی                | 22 |
| "کوانتومی مولیبدن سولفید بر تعامل یون‌های نیکل با نقاط فاز بررسی اثرات نوع"   | 6  | ipcc24-02690190 | لیلا مفتون آزاد           | 23 |
| مطالعه کوانتومی بر روی موقعیت‌های اتمی متفاوت و تغییر خواص الکترونی ملکول پنتاسن  | 7  | ipcc24-01290186 | مهدی ظریف                 | 24 |
| مقایسه عامل دار کردن کووالانسی و غیر کووالانسی نانولوله‌های بورنیتریدی در برهمکنش با داروی داکسوروبیسین توسط مطالعه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی | 7  | ipcc24-01290194 |                           |    |
| مطالعه‌ی کوانتومی روی نانو حلقه‌ها به روش نظریه‌ی تابع چگالی  | 7  | ipcc24-01290195 |                           |    |
| مطالعه محاسباتی بر روی مشتقات فلاوونوئیدها به عنوان بازدارنده خوردگی فلزات  | 7  | ipcc24-00490197 | فاطمه اکتفا               | 25 |
| تهیه نانوکامپوزیت مکسین/ فلزات واسطه برای ابرخازن‌ها: الکترودهای با کارایی بالا   | 8  | ipcc24-00530106 | مینا جانباز               | 26 |
| مطالعه ترمودینامیکی مزوساختار TiO <sub>2</sub> /SBA-16-NH <sub>2</sub> به عنوان سیستم دارورسانی   | 8  | ipcc24-00610079 | فاطمه سaki                | 27 |
| بررسی مکانیک کوانتومی در تجزیه و تحلیل داروی Givinostat   | 8  | ipcc24-02520202 | نیایش تاج‌الدینی          | 28 |
| اثر تغییر آنیون بر الکترولیت مایع یونی با کاتیون متقارن سولفونیوم در باتری‌های لیتیوم-یون   | 8  | ipcc24-02530204 | مرضیه سبزی سروستانی       | 29 |
| مطالعه ساختار کمپلکس مس (II)، ۱-۳، دی(۲-پیریدیل) پروپان-۱، ۳-دی آن با استفاده از نظریه تابعی دانسیته  | 9  | ipcc24-02890205 | آرزو مرادی                | 30 |
| مطالعه‌ی تولید هیدروژن از تفکیک اتانول بر روی سطح کاتالیزگر Ni(۱۰۰) با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلوی سینتیکی                               | 9  | ipcc24-02910207 | پروانه کبوتری             | 31 |
| سنتر و مشخصه‌یابی نانوذرات مغناطیسی فریت کبالت- روی برای کاربرد در هایپرترمیای پزشکی  | 9  | ipcc24-02560220 | حسین محمدی منش            | 32 |
| مطالعه نظریه تابعی چگالی جذب سطحی CO <sub>2</sub> روی زئولیت M-ABW تبادل شده با کاتیون  | 9  | ipcc24-02560247 |                           |    |
| عملکرد کاتالیزوری گرافاین تزئین‌شده با نیکل برای واکنش تولید هیدروژن  | 10 | ipcc24-02560212 |                           |    |
| بررسی نظری عملکرد فتوولتاییک رنگ‌های روتنیوم در سلول‌های خورشیدی حساس به رنگ  | 10 | ipcc24-02940209 | ذبی‌الله مهدیفر           | 33 |
| بررسی خواص ساختاری، الکترو-نوری مواد دوبعدهی (Se, ZnX <sub>2</sub> (X= P, S   | 10 | ipcc24-02940213 |                           |    |
| بررسی ترمودینامیکی تجمع مایع یونی ۱-هگزیل-۳-متیل ایمیدازولیوم برمید در مخلوط‌های حلالی آب و ۲-اتوکسی اتانول براساس اندازه‌گیری هدایت‌سنجی     | 10 | ipcc24-02470214 | جواد صمدی شال             | 34 |

|  |    |                 |                        |    |
|--|----|-----------------|------------------------|----|
| بررسی برهمکنش دیفن هیدرامین با آلبومین سرم خون انسانی با استفاده از مطالعات طیف‌سنجی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی   | 11 | ipcc24-02440215 | سحر پولادری            | 35 |
| بررسی برهمکنش داروی کرومتین با نانو متخلل کوکوروبیت{7} اوریل به روش محاسبات کوانتومی و نظریه تابع چگالی  | 11 | ipcc24-01740216 | اشکان باقری            | 36 |
| استفاده از خروجی‌های پیل های PV سوار بر خودرو را تحت شرایط رانندگی واقعی و با استفاده از زوایای مختلف استفاده از طرح پیشنهادی ساده و مقرون به صرفه مبتنی بر فتوولتائیک و امکان افزایش توان خروجی آرایه فتوولتائیک در مصارف خانگی | 11 | ipcc24-02950281 | محمد رضا محمدیان آسیاب | 37 |
| بررسی جذب داروی فلودارابین بر نانو لوله ی کربنی تک جداره از طریق تئوری تابعی چگالی   | 11 | ipcc24-02950217 |                        |    |
| بررسی جذب داروی های آزرولی بر گرافن و گرافن اکسید از طریق محاسبات کوانتمی  | 12 | ipcc24-02080173 | خدیجه شکوهی            | 38 |
| جذب کروم (VI) با استفاده از جاذب چارچوب فلز-آلی مبتنی بر زیرکونیوم   | 12 | ipcc24-02080218 |                        |    |
| بررسی حلالیت داروی آلپرازولام در حلال یوتکتیک عمیق طبیعی کولین کلراید/اوره در مقایسه با آب   | 12 | ipcc24-02960223 | محمد پسندیده ندامانی   | 39 |
| برهمکنش‌های مولکولی بین ترکیبات گوگرددار مطلوب با مایعات یونی جهت گوگردزدایی در صنایع پالایش نفتی: مطالعه DFT  | 12 | ipcc24-02970224 | سمانه برومند           | 40 |
| بررسی جذب گاز کربن دی اکسید بر روی هتروبیالایر GBS2 با استفاده از نظریه تابعی چگال   | 13 | ipcc24-01980226 | ژیلا فرج زاده          | 41 |
| سنتر، شناسایی و بررسی عملکرد نانوصفحه‌های RuCo-MOF تثبیت شده بر روی فوم نیکل برای الکترواکسیداسیون آلانین  | 13 | ipcc24-02290227 | شایان محمدزاده         | 42 |
| بررسی اثرات داروهای سکروپین B و داکومیتینیب بر غشا مدل سلول های سالم ریه انسانی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی  | 13 | ipcc24-01330228 | ناصر عباس زاده         | 43 |
| خصوصیات مولکولی Nirogacestat. مطالعه DFT   | 13 | ipcc24-02250229 | هانیه معصومی بالسینی   | 44 |
| مطالعه Brexanolone بر اساس نظریه تابع چگالی : خواص ساختاری و الکترونیکی  | 14 | ipcc24-02980230 | امیرحسین تیموری        | 45 |
| تجزیه و تحلیل کامل صورتبندی و مطالعه پیوند هیدروژنی درون مولکولی در ترکیبات اکرانوکسین و فنیل آلانین   | 14 | ipcc24-02980231 |                        |    |
| تأثیر میدان الکتریکی بر رفتار فازی آب بین دو صفحه بور نیتريد   | 14 | ipcc24-02660233 | پروین نوربخش           | 45 |
| ساخت لایه نازک تلورید کادمیوم به روش لایه نشانی الکتروشیمیایی  | 14 | ipcc24-03000234 | حامد رزاق نیا          | 47 |
| اکسیداسیون کاتالیزوری آنتی‌بیوتیک سیپروفلوکساسین در حضور اکسند پرسلفات بر روی اسپینل‌های فریت کپالت  | 15 | ipcc24-02990235 | فاطمه امیرسرمداری درجز | 48 |
| اثر میدان الکتریکی بر انتقال گرمای آب محدود شده بین دو صفحه نیتريد بور   | 15 | ipcc24-01790236 | مهشید محمودی           | 49 |
| مقایسه جذب لیتیوم و منیزیم بر روی اکسیدهای فلزی با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی  | 15 | ipcc24-03010238 | سارا جهان آبادی        | 50 |
| مدل سازی و مطالعه دینامیک مولکولی برای جلوگیری از انباشتگی پروتئین آمیلوئید بتا به کمک مهارکننده در بیماری آلزایمر   | 15 | ipcc24-02680239 | آمنه گنجی راد          | 51 |
| تعیین علامت ضریب ژیرومغناطیس با استفاده از تشدید مغناطیسی  | 16 | ipcc24-02270240 | مهشید نیازی            | 52 |
| بررسی محاسباتی جذب فسژن در نانو خوشه های B40 و Ca@B40  | 16 | ipcc24-02540241 | سینا مرحبائی           | 53 |
| مدل سازی معادله حالت PC-SAFT برای سیستم های تجمعی و غیر تجمعی  | 16 | ipcc24-00850245 | پروین نریمانی          | 54 |
|  | 16 | ipcc24-01900246 | سپیده دلسوز هفشجانی    | 55 |

|   |    |                 |                        |    |
|---|----|-----------------|------------------------|----|
| نانو بسترهای ساخته شده از نانوذرات Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> و Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> با فرآیند لایه نشانی الکتروفوریتیک برای SALDI-TOF-MS | 17 | ipcc24-01370077 | مصطفی پرنده            | 56 |
| مطالعه جذب گاز نیتروژن اکسید بر روی نانوصفحات خالص و تزریق شده تی گرافن   | 17 | ipcc24-02310250 | مهرشاد خورشیدی         | 57 |
| مطالعه واکنش پذیری و حساسیت HOP-گرافن نسبت به گاز کربن دی اکسید   | 17 | ipcc24-02720252 | مریم فخری              | 58 |
| مطالعه نظری ساختار الکترونی و طیف الکترونی کمپلکس کوئوردیناسیونی [Co <sup>III</sup> (Salophen)(NH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> ] <sup>+</sup>            | 17 | ipcc24-03020253 | اکبر بختیاری           | 59 |
| اصلاح الکتروود ۳ و ۴-اتیلن دی اکسی تیوفن در حضور سدیم دودسیل سولفات و بررسی انتقال الکترون به صورت تجربی و محاسباتی                                     | 18 | ipcc24-03130261 | مبینا حسینی            | 60 |
| سنتز الکتروشیمیایی نانو کامپوزیت PEDOT-SDS/Cu به عنوان حسگر زیستی برای تشخیص آسکوربیک اسید  | 18 | ipcc24-03130259 | فرحناز حمدی هولاسو     | 61 |
| مطالعه Ab Initio کوپلیمریزاسیون کرتونیک اسید و آلفامتیل استارین   | 18 | ipcc24-02580260 | سارا موحدمنش           | 62 |
| بررسی ضرایب عبور و بازگشت و اثرات اتلاfi در پراکندگی کوانتومی ناهرمیتی  | 18 | ipcc24-02740262 | جواد حسن زاده دیوکلاfi | 63 |
| جداسازی فسفات از شیرابه با استفاده از روش الکتروانققاد  | 19 | ipcc24-03220264 | نسیم محمدی             | 64 |
| بررسی ترکیبات هیدروکسی آنتروپی بالای فلزات واسطه به منظور کاربردهای تولید و ذخیره انرژی   | 19 | ipcc24-03250265 | لیلا حکم آبادی         | 65 |
| بررسی تشکیل کمپلکس درهم جای سیکلودکسترین‌های اصلاح شده با داروی ارلوتینیب به روش داکینگ و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی                                     | 19 | ipcc24-02110269 |                        |    |
| مطالعه برهم کنش سیکلودکسترین‌های طبیعی با داروی کریزوتینیب به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی   | 19 | ipcc24-02110267 |                        |    |
| مطالعه محاسباتی خواص ساختاری و الکترونی نانوساختار ۸-۱۶-۴ گرافاین خالص و تزئین شده با فلز سدیم و بررسی جذب هیدروژن روی آن‌ها                            | 20 | ipcc24-01280268 | مهتاب دهقانی           | 66 |
| استخراج خواص ترمودینامیکی تعادلی و غیر تعادلی برای حالت گازی سیستم Zn...H <sub>2</sub> از روی سطح انرژی پتانسیل بین مولکولی سه بعدی کوانتومی            | 20 | ipcc24-03270271 | عاطفه اکبرپور          | 67 |
| بررسی پایداری ساختاری و دینامیکی آلیاژ هوبسلر معکوس Li <sub>2</sub> BaAg : براساس تئوری تابع چگالی  | 20 | ipcc24-01000296 | پریا نصیرزاده          | 68 |
| بررسی نظری ویژگی‌های ساختاری و دینامیکی آلیاژ هوبسلر معکوس Li <sub>2</sub> AlAg   | 20 | ipcc24-01000272 |                        |    |
| لایه انتقال دهنده حفره کارآمد در دیود ساطع کننده نور مبتنی بر نقاط کوانتومی پروسکایت  | 21 | ipcc24-02780274 | مصطفی مسلم پور         | 69 |
| اتصال مولکولی و مطالعات طیف سنجی اتصال کمپلکسهای ضد سرطان پلاتین با البومین سرم گاوی  | 21 | ipcc24-03260270 | زهرا عرب پورشیراز      | 70 |
| تعامل کمپلکس جدید ضدسرطان Pt آمیل دیتیوکاربامات با آلبومین سرم گاوی: مطالعه طیف‌سنجی و شبیه‌سازی مولکولی  | 21 | ipcc24-03260275 |                        |    |
| بررسی انتقال حرارت و واکنش ولکانش در تغییرات دمای نقاط یک قطعه ضخیم در فرایند پخت شتابداده شده ی گوگردی   | 21 | ipcc24-03300282 | جلال عابدینی           | 71 |
| کاربرد نانو ذرات مغناطیسی آهن (IONPs) در بیوتکنولوژی و بررسی سینتیک برهم-کنش با بیومولکول‌ها و انواع روش‌های ساخت                                       | 22 | ipcc24-03310283 | هانیه برقی جهری        | 72 |
| کلشی‌سین: سفری مولکولی در ابعاد کوانتومی پرده‌برداری از   | 22 | ipcc24-02430284 | بهار ابوالقاسم         | 73 |
| مطالعه نظری تاثیر لیگاندهای دی‌ایمین بر خصوصیات ساختاری و الکترونوری کمپلکس پالادیوم(II) بیس دی‌تیولات  | 22 | ipcc24-03120290 | سپیده سمعی             | 74 |





|  |    |                 |                        |    |
|--|----|-----------------|------------------------|----|
| مطالعه نظری خصوصیات ساختاری، الکترونی و نوری کمپلکس‌های هترولیپتیک پلاتین(II) بیس دی‌تیولات  | 22 | ipcc24-03120291 |                        |    |
| بررسی خواص الکترونیکی Lanraplenib: مطالعه ای با استفاده از DFT   | 23 | ipcc24-03240288 | حلما عنایت             | 75 |
| تخریب نوری ۷۰۳-دی آمینوفنوتیازین-۵-ایوم کلرید در حضور فوتوکاتالیزور روی اکسید نانو ساختار در محیط بافری: یک مطالعه سینتیکی   | 23 | ipcc24-02930208 | شیوا جوهری             | 76 |
| بررسی دوبایایی حاصل از انتقال بار درون مولکولی کمپلکس دوهسته‌ای سیس-سیس $[(\text{bpym})(\text{NCSe})_2\text{Fe}(\text{bpym}-\text{Co}(\text{bpym})(\text{NCSe})_2)+1]$ | 23 | ipcc24-03230295 | کبری صلابت             | 77 |
| مطالعه نظری اثر لیگاند محوری هیستیدین و مشتقات آن بر اتصال CO به هم  | 23 | ipcc24-01210110 | فاطمه سادات فاطمی نسب  | 78 |
| ابرخازن های هیبریدی با کارایی بالا بر پایه نانوساختارهای پوسته-هسته دوفلزی و نانو کره های کربنی  | 24 | ipcc24-01270064 | سید امیرعلی حسینی واعظ | 79 |
| بررسی اثر اندازه حفرات کاتالیستهای میکرو و مزوپور تحت دما و زمانهای مختلف بر ایزومریزاسیون نرمال-هپتان   | 24 | ipcc24-02610185 | نسترن پارسا فرد        | 80 |
| بررسی نظری برهمکنش داروی ۲- تیواوراسیل با نانومخروط بور نیتريد   | 24 | ipcc24-02120138 | فاطمه آبگون            | 81 |
| اثر شبه یان-تلر در مولکول $\text{SeX}_2$ - یک تحقیق تئوری  | 24 | ipcc24-00440009 | علی اسماعیلی           | 82 |
| اثر شبه یان-تلر و تجزیه NBO برای شکست تقارن ساختارهای هندسی $\text{TeX}_2(\text{X}:\text{F},\text{Cl},\text{Br},\text{I})$   | 25 | ipcc24-00440013 |                        |    |
| بررسی تأثیر دمای الکترولیت بر روی سرعت انتقال الکترون تک لایه های خودسازمان یافته عامل دار شده با فروسن کربوکسالدئید   | 25 | ipcc24-00300026 | الهه دهناری            | 83 |