

علی ابراهیمی استاد



دانشکده: علوم پایه

گروه: شیمی

شماره تماس: ۰۵۴ - ۳۱۱۳۶۳۵۰

پست الکترونیکی: ebrahimi@chem.usb.ac.ir

آدرس: زاهدان، بلوار دانشگاه، دانشگاه سیستان و بلوچستان، دانشکده علوم پایه گروه شیمی

تحصیلات

✓ کارشناسی ارشد، شیمی فیزیک، دانشگاه تربیت معلم - تهران

✓ دکترای شیمی فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی

دروس ارائه شده

۱ - شیمی کوانتوم ۳

۳ - مکانیک کوانتومی

۲ - شیمی محاسباتی

۴ - بازساخت زیست مولکولی

پایان نامه های تحصیلات تکمیلی

۱ - وابستگی میزان جذب فلوراید به ساختار در بیس (آلیزاریناتو) سیلان

رویا کریمی نژادعنبر اباد، [علی ابراهیمی، علیرضا نوروزی، نجمه مصطفوی ده رئیس]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۹-۹۰

۲ - مطالعه ی فعالیتهای شیمیایی و دارویی برخی مشتقات پیرانو پیرمیدین ها

طاهره شهرکی قدیمی، [علی ابراهیمی، علیرضا نوروزی، رویا به آذین]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۹-۹۰

۳ - پایان نامه ۲ کارشناسی ارشد عنوان جدید (طراحی دارو و مطالعه اثرات الکترونی بر واکنش ها و بر همکنشهای THIQ ها و FPSA با کمک رایانه

مونا خاکسفیدی، [علی ابراهیمی، علیرضا نوروزی، نجمه مصطفوی ده رئیس]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۸-۹۹

۴ - پایان نامه ۲ کارشناسی ارشد

سمیرا صدیقی زاده، [علی ابراهیمی، مهدی شهرکی، اسیه شهرکی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۸-۹۹

۵ - پایان نامه ۲ کارشناسی ارشد (مطالعه نظری پایداری کمپلکس های گوانابنز با آنیون های مختلف)

سمیرا ناروئی پور، [علی ابراهیمی، مهدی شهرکی، شیوا رضازاده بمبویانی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۸-۹۹

۶ - پایان نامه ۲ کارشناسی ارشد

محبوبه سادات محمدی ایوبی، [علی ابراهیمی، مهدی شهرکی، رویا به آذین]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۸-۹۹

۷ - پایان نامه ۲ کارشناسی ارشد

افسانه پیران، [علی ابراهیمی، علی اکبر میرزائی، نجمه مصطفوی ده رئیس]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۸-۹۹

۸ - پایداری صورت بندی ها و خواص داروئی بعضی کالکون ها به عنوان یک اسکلت ممتاز در شیمی داروئی

آذر ابراهیمی، [علی ابراهیمی، علیرضا نوروزی، نجمه مصطفوی ده رئیس]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۸-۹۹

۹ - مطالعه ویژگیهای ساختاری، الکترونی و صورت بندی های ایتاکونیک اسید و مشتقات آن برپتانسیل شیمیایی و درمانی آن

مونا خاکسفیدی، [علی ابراهیمی، علیرضا نوروزی، نجمه مصطفوی ده رئیس]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۸-۹۹

۱۰ - تاثیر بر هم کنش های غیر کووالانسی بر خواص آنتی اکسیدانی ترکیب اویدوماپسین و مشتقات آن

محبوبه سادات محمدی ایوبی، [علی ابراهیمی، مهدی شهرکی، رویا به آذین]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۸-۹۹

۱۱ - پایان نامه (۴)

صادقعلی باوفا، [علیرضا نوروزی، علی ابراهیمی، حمیدرضا شاطریان]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۸-۹۹

۱۲ - نقش استخلاف بر پایداری کمپلکس گوادینیوم - سولفات

امین پهلوانی شیخی، [علی ابراهیمی، نجمه مصطفوی ده رئیسی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۷-۹۸

۱۳ - پایان نامه ۲ کارشناسی ارشد

مجیب الرحمن میری، [علی ابراهیمی، عفت دهقانان، نجمه مصطفوی ده رئیسی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۶-۹۷

۱۴ - پایان نامه ۲ کارشناسی ارشد

اقبال جوبه، [عفت دهقانان، علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۶-۹۷

۱۵ - پایان نامه ۲ کارشناسی ارشد

فاطمه حیدری، [علی ابراهیمی، علیرضا نوروزی، نجمه مصطفوی ده رئیسی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۶-۹۷

۱۶ - پایان نامه ۲ کارشناسی ارشد

افسانه پیری، [علی ابراهیمی، نجمه مصطفوی ده رئیسی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۶-۹۷

۱۷ - نقش استخلاف بر پایداری کمپلکس های گوادینیوم با ترکیبات مختلف

نیلوفر میری، [علی ابراهیمی، علیرضا نوروزی، نجمه مصطفوی ده رئیسی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۶-۹۷

۱۸ - مطالعه اسیدپتیه گروههای عاملی در پیرولو کینولین کینون و مشتقات آن با استفاده از آنالیز تفکیک انرژی

افسانه پیری، [علی ابراهیمی، نجمه مصطفوی ده رئیسی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۶-۹۷

۱۹ - پایداری نسبی صورتبندی ها در ایزومرهای کلونیدین و فعالیت دارویی آن

فاطمه حیدری، [علی ابراهیمی، علیرضا نوروزی، نجمه مصطفوی ده رئیسی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۶-۹۷

۲۰ - مطالعه تاتومرهای فیتواین و تاثیر حلال بر پایداری نسبی آنها

حسام ستوده، [علی ابراهیمی، نجمه مصطفوی ده رئیسی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۶-۹۷

۲۱ - مطالعه اسیدپتیه گروههای عاملی در برخی آنالوگ های دی هیدروپترین پیروفسفات با استفاده از آنالیز تفکیک انرژی

مجیب الرحمن میری، [علی ابراهیمی، عفت دهقانان، نجمه مصطفوی ده رئیسی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۶-۹۷

۲۲ - مطالعه برهمکنش برخی بازدارنده های بتا سکر تاز در درمان بیماری آلزایمر

اقبال جوبه, [عفت دهقانان, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۶-۹۷

۲۳ - تخمین خواص فیزیکی شیمیایی رفتارهای الکتروشیمیایی و فعالیت بیولوژیکی برخی از مشتقات کوئینون با استفاده از محاسبات تابعی چگالی

ناهد حسابی, [علی ابراهیمی, علیرضا نوروزی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۵-۹۶

۲۴ - اثر تشکیل کمپلکس با یون های فلزی دو ظرفیتی بر برخی ویژگیهای شیمیایی و ساختاری متوکستاتین

بهروش اسلام پناه, [علی ابراهیمی, نجمه مصطفوی ده رئیس]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۵-۹۶

۲۵ - پیرولو کینولین کیتون ایزومرها و برخی مشتقات آن برهم کنش آنیون -? اسیدیته گروههای عاملی

هما دوستعلی وند, [علی ابراهیمی, نجمه مصطفوی ده رئیس]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۵-۹۶

۲۶ - بررسی اثرات برهم کنشهای استکی بر پایداری را دیکالهای آزاد برخی آنتی اکسیدان های تک حلقه ای

مریم شرفی نسب, [علی ابراهیمی, عفت دهقانان, فریده بدیچی آخر]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۵-۹۶

۲۷ - خواص آنتی اکسیدانی برخی ایزوتیوسیاناتهای موجود در ترب کوهی و خردل سفید

فهمیه جامی, [علی ابراهیمی, فریده بدیچی آخر]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۵-۹۶

۲۸ - مطالعه ارتباط ساختار- فعالیت داروئی برخی ترکیبات طبیعی

شیوا رضازاده بمبویانی, [علی ابراهیمی, حسن منصوری ترشیزی, علیرضا نوروزی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۵-۹۴

۲۹ - پیش بینی ساختار سه بعدی بعضی از پروتئین های خانواده Rab بر اساس مدل همولوژی

صابر محمدی چالانچی, [علی ابراهیمی, علیرضا نوروزی, عفت دهقانان]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۵-۹۴

۳۰ - مطالعه ی بر همکنشهای ترکیبات دارویی فعال مبتنی بر گیرنده های هیستامینی

ابوالفضل عزیزی, [علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۵-۹۴

۳۱ - مطالعه نظری خواص آنتی باکتریایی و آنتی اکسیدانی و پتانسیل کاهشی چند کینون طبیعی

حسن ترکان ترک آبادی, [علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۵-۹۴

۳۲ - مطالعه نظری روی خواص ضد سرطانی بعضی کینون های سنتزی و طبیعی

علی اصغر محمدی, [علی ابراهیمی, عفت دهقانان]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۵-۹۴

۳۳ - مطالعه نظری روی خواص گروههای عاملی متوکستاتین

شورانگیز هراتی تاجی, [علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۴-۹۵

۳۴ - تعیین شرایط بهینه احیا و کلسیناسیون کاتالیست آهن - کبالت - سریم بر پایه ژئولیت در تولید اولفین های سبک در واکنش فیشر تروپش

رامین کمالی, [علی اکبر میرزائی, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۴-۹۵

۳۵ - بررسی تاثیر

حمیده دیده ور, [علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۴-۹۳

۳۶ - مطالعه ی بر همکنش های ترکیبات دارویی استخراج شده از گیاهان بر روی گیرنده های پروتئینی

رویا به آذین, [علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۴-۹۳

۳۷ - کاربرد سیانوریک اسید-کربنات پتاسیم بعنوان کاتالیزور در واکنشهای چند جزئی

رامین شهرکی, [رضا حیدری, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۴-۹۳

۳۸ - بررسی تاثیر استروئوشیمی حلقه-ها و استخلافها بر خواص بعضی از دی ترپنهای حاوی واحد ۱ و ۲ بنزوکینون

زهرامتی نفر, [علی ابراهیمی, خلیل ا... طاهری]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۴-۹۳

۳۹ - نانو سیستمهای آنتی اکسیدانی عامل دار شده با گالیک اسید

ارش دولت آبادی, [علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۳-۹۲

۴۰ - مطالعه نظری پیوندهای هالوژنی در کمپلکسهای بیس پیریدین هالونیوم

حافظ رزم آزما, [علی ابراهیمی, مسعود کیخوائی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۳-۹۲

۴۱ - تبدیل ترانس اوروکانیک اسید به سیس اوروکانیک اسید: یک مطالعه نظری

حسین هراتی, [علی ابراهیمی, مسعود کیخوائی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۳-۹۲

۴۲ - بررسی سینتیک و مکانیسم تشکیل یک مشتق بنزیمیدازول در حضور کاتالیست اسید استیک: تکنیک های UV و Stopped Flow

سوده آمیغ, [سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۳-۹۲

۴۳ - تأثیر برهمکنشهای غیر کووالانسی بر ترمیم DNA و جاگیری مشتقات آنتراکینون بین جفت بازهای آن

حجت ثمره دلارامی, [علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۳-۹۲

۴۴ - بیسیلیل

الهه شیرازی, [علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۹۱-۹۲

۴۵ - خواص آنتی اکسیدانی و پرواکسیدانی گالیک اسید و مشتقات آن

الهه شیرازی, [علی ابراهیمی, علی اکبر میرزائی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۱-۹۲

۴۶ - مطالعه سنتز واکنشهای چند جزئی در حضور آب میوه ها

نعیمه خورشیدی, [ملک طاهر مقصودلو, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۱-۹۲

۴۷ - مطالعه و بررسی پیوندهای هیدروژنی ویژه در لیگاندهای ترکیبات معدنی با استفاده از روش های محاسباتی و مقایسه آن با داده های X-ray

حلیمه کردتمندانی, [سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۱-۹۲

۴۸ - پیوند هالوژنی در جفت بازهای DNA اثر اسکلت قند - فسفات و حلال

ام البنین پوراسدی کرم, [علی ابراهیمی, علی اکبر میرزائی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۱-۹۲

۴۹ - تخمین نوکلئوفیلیسیتهی هترواتمها در بازهای بیولوژیکی

فاطمه کاظمی گوکی, [علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۱-۹۲

۵۰ - تهیه و بهینه سازی کاتالیست سه فلزی آهن کبالت نیکل به روش همرسوبی جهت استفاده در سنتز FT

رضا رکن آبادی, [علی اکبر میرزائی, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۱-۹۲

۵۱ - مطالعه واکنشهای چند جزئی در آب

معصومه میرشکار, [رضا حیدری, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۱-۹۲

۵۲ - پایداری کوکریستال های کافئین و کربوکسیلیک اسیدها: برهمکنش های بین مولکولی

ابوالفضل عزیزی, [علی ابراهیمی, علی اکبر میرزائی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۰-۹۱

۵۳ - تاثیر متقابل برهمکنشهای کاتیون -? و آنیون -? بر یکدیگر

رویا به اذین, [علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۰-۹۱

۵۴ - ترمیم -O۶ متیل گوانین به گوانین توسط سیستمین : اثر حلال

شیوا رضازاده بمبویانی, [علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۰-۹۱

۵۵- تاثیر برهمکنش های بین مولکولی بر آروماتیسیت ی موضعی در باز های بیولوژیکی : یک مطالعه ی AIM

نجمه مصطفوی ده ریسی, [علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۰-۹۱

۵۶- اثر رفتار کلسیناسیون و شرایط احیا بر روی کاتالیست های دوفلزی کبالت - نیکل ساپورت شده توسط آلومینا

محمد فرحی, [علی اکبر میرزائی, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۹۰-۹۱

۵۷- تاثیر برهم کنشهای یون - پی روی پیوندهای هیدروژنی

مجتبی حسینی قلعه نو, [علی ابراهیمی, علی اکبر میرزائی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۹-۹۰

۵۸- مطالعه نظری برهم کنشهای کافئین با بازهای بیولوژیکی و داروها

فریده بدیچی اخر, [علی ابراهیمی, ملک طاهر مقصودلو]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۹-۹۰

۵۹- تاثیر متقابل برهم کنشهای استکی و پیوند هیدروژنی : پیوندهای هیدروژنی مجزا

سمیه عابدینی, [علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۹-۹۰

۶۰- مطالعه واکنشهای ترمیم دیمراستک شده ی تیمین

اسیه شهرکی, [علی ابراهیمی, ملک طاهر مقصودلو]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۹-۹۰

۶۱- محاسبات مکانیکی برای تعیین پایداری ایزومرهای E و Z ترکیبات ایلیدهای فسفر همراه باافزایش ازدحام فضائی بر روی الکیل

علی پاک نهاد, [سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۹-۹۰

۶۲- مطالعه سینتیک واکنش سنتز فیشر تروپش بر روی کاتالیست Fe-Co-Mn تهیه شده به روش سل - ژل

عطیه پوردولت, [علی اکبر میرزائی, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۹-۹۰

۶۳- ۱- مطالعه نظری سینتیک و مکانیسم واکنش بین ایزو کوئینولین و استراستیلنیک فعال در حضور ترکیبات هتروسیکلیک NH و CH اسیدها -۲- محاسبات مکانیکی برای پایداری ایزومرهای E و Z ترکیبات ایلیدهای فسفر

زهره خواجه علی, [سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۸-۸۹

۶۴- بررسی تئوری پایداری ایزومرهای E و Z ترکیبات ایلیدهای فسفر همراه با افزایش ازدحام فضایی بر روی آلکیل

زهره قهقایی, [سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۹

۶۵ - اثر ساپورت ها و پروموتورهای مختلف روی عملکرد کاتالیست بهینه دو فلزی کبالت - نیکل تهیه شده بروش تلقیح

فاطمه دهنوی، [علی اکبر میرزائی، علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۹

۶۶ - اثر رفتار کلسیناسیون و شرایط احیا بر روی کاتالیستهای دوفلزی کبالت - نیکل تهیه شده به روش تلقیح

اکبر زارع، [علی اکبر میرزائی، علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۹

۶۷ - بررسی پیوند هیدروژنی بین مولکولی در بازهای آسیب دیده

حسین حقانی، [علی ابراهیمی، علی اکبر میرزائی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۹

۶۸ - اثر استخلاف بر پروتون افینیتی در یک هتروسیکل آروماتیک

محبوبه جهانتاب، [علی ابراهیمی، حسین روحی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۹

۶۹ - اثر تغییرات کنفورماسیونی و عوامل محیطی بر شکسته شدن پیوند N- گلیکوزیدی در باز آسیب دیده DNA

صوفیا بزی، [علی ابراهیمی، محمد هاشمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۹

۷۰ - انتقال پروتون بین اوراسیل و نیتروس آمین در فاز گازی

الهام انجم شعاع، [حسین روحی، علیرضا نوروزی، علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۹

۷۱ - تاثیر استخلاف روی انتقال پروتون بین آب و آنیلین

بهناز مقدم، [حسین روحی، علیرضا نوروزی، علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۹

۷۲ - پیوندهای هیدروژنی در مایعات یونی ایمیدازولیوم

رویا صالحی شهرباک، [حسین روحی، علیرضا نوروزی، علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۹

۷۳ - مطالعه اثر استخلاف بر واکنشهای SN2 در فاز گازی

معصومه دوستی، [علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۷-۸۸

۷۴ - برهمکنش بین بعضی نوکلئو بازها و آمینو اسیدها

علیرضا قلی پور، [علی ابراهیمی، علیرضا نوروزی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۷-۸۸

۷۵ - مطالعه ترکیبات اسانس گیاه درمنه سیاه و سفید منطقه بلوچستان

امین گنجعلی، [علیرضا سردشتی، علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۷-۸۸

۷۶- تولید هیدروکربنها از روش سنتز فیشر - تروپش با استفاده از کاتالیستهای دوفلزی اصلاح شده حاوی آهن - سریم

سیدفضا ابراهیم زاده اصل، [علی اکبر میرزائی، علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۷

۷۷- تخمین قدرت پیوندهای هیدروژنی مجزا در دیمرهایی با چند پیوند هیدروژنی

حجت ثمره دلارامی، [علی ابراهیمی، علی اکبر میرزائی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۸-۸۷

۷۸- نقش ساپورتها و ارتقا دهنده ها در فعالیت کاتالیتیک کاتالیستهای دوفلزی آهن - منگنز برای هیدروژناسیون منو کسید کربن

ندا کریمپور، [علی اکبر میرزائی، علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۷-۸۶

۷۹- سنتز فیشر - تروپش بر روی کاتالیستهای ساپورت بر پایه کبالت

مریم نیک بخت، [علی اکبر میرزائی، علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۷-۸۶

۸۰- مطالعه اثر بهینه سازی گرادایانی CP - اصلاح شده بر برهمکنشهای آنیون - پای

امید رضوانی راد، [علی ابراهیمی، حسین روحی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۷-۸۶

۸۱- مطالعه نظری تاثیر حلال بر اثر آنومری در ترکیبات $(CH_4-nXnwH)$ ($X=F, Cl$, $w=O, S$, $n=1-2$)

ژیلا شهرکی، [حسین روحی، علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۷-۸۶

۸۲- مطالعه نظری برهمکنش مشتقات ایمیدازول و پیریمیدین با ید در فاز گازی

طیبه حدادی، [حسین روحی، علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۷-۸۶

۸۳- مطالعه نظری سینتیک و مکانیزم واکنش بین تری فیل فسفین و دی آلکیل استیلن دی کربوکسیلات ، در حضور NH و CH یا SH - اسیدها

محمدامین کاظمیان، [سیدمصطفی حبیبی خراسانی، علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۷-۸۶

۸۴- مقایسه پایداری ساختارهای پوشیده و نپوشیده در بعضی دیمرهای تشکیل شده با پیوند هیدروژنی

ناهید حسابی، [علی ابراهیمی، علی اکبر میرزائی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۷-۸۶

۸۵- مطالعه اثر استخلاف در یک حلقه آروماتیک بر پیوند هیدروژنی درون ملکولی

راضیه سادات نی بند، [علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۷-۸۶

۸۶- مطالعه نظری پاسخ بعضی نانو ساختارها به کشش و خمش

اعظم صنعتی کرمانی، [علی ابراهیمی، علی اکبر میرزائی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۷-۸۶

۸۷- بررسی تاثیر شرایط عملیاتی بر روی مخلوط اکسیدی کاتالیستهای کبالت - سریم مورد استفاده در سنتز فیشر - تروپش

جلال مودی, [علی اکبر میرزائی, علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۶-۸۵

۸۸- محاسبه دینامیک و سینتیک ایلیدهای پایدار فسفر با استفاده از ^1H و ^{31}P NMR

فاطمه واشقانی فراهانی, [سیدمصطفی حبیبی خراسانی, ملک طاهر مقصودلو, علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۶-۸۵

۸۹- مطالعه نظری اثر استخلاف بر هسته دوستی هترواتم در یک حلقه آروماتیک

حمیدرضا مسعودی, [علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۶-۸۵

۹۰- مطالعه پیوند هیدروژنی درون مولکولی و اثر فوق مزدوج شدن در مولکول استیلن استالدهید با استفاده از روشهای آغازین AIM, NBO

ابراهیم خلیلی نیا, [علیرضا نوروزی, علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۶-۸۵

۹۱- بررسی سینتیک واکنش بین تری فنیل فسفین دی آلکیل استیلن دی کربوکسیلات و HN اسیدهای متفاوت با استفاده از UV

پیمان محمدزاده جهانی, [سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۶-۸۵

۹۲- مطالعه نظری خواص ساختاری و الکترونی نانولوله های تک دیواره AIN, BN

ستوده باقری, [حسین روحی, علی ابراهیمی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۶-۸۵

۹۳- مطالعه نظری اثر حلال بر واکنش دو مولکولی استخلاف هسته دوست روی مرکز کربنی تاثیر یون همراه بر قدرت هسته دوستی

عظیمه امیرمیجانی, [علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۵-۸۴

۹۴- پیوند هیدروژنی نامناسب CH.....FC (یک مطالعه نظری)

صدیقه شفیع پور, [علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۵-۸۴

۹۵- تعیین هسته دوستی و الکترون دوستی حدی در فاز گازی برای B و HX با استفاده از خواص مکان شناسی چگالی بار الکترونی

مهدی حسن نژاددوین, [علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۵-۸۴

۹۶- مطالعه اثر انطباق مجموعه پایه بر بعضی از خواص کمپلکسهای نوع n بازهای لوئیس ساده

سیدمرتضی کاظمی تبار, [علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۵-۸۴

۹۷ - یک مطالعه از اساس روی بر همکنش برخی گازها با نانولوله کربنی تک دیواره خاص

اصفه هوشمندی, [علی ابراهیمی, حسین روحی]

نیمسال اول سال تحصیلی ۸۵-۸۴

۹۸ - مطالعه نظری واکنشهای SN۲ در هالومتانها در فاز گازی

راحله وزیری, [علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۴-۸۳

۹۹ - بررسی سینتیک واکنش بین تری فیل فسفین و دی آلکیل استیلن دی کربوکسیلات و ۳-متیل ایندول و ... با استفاده از UV

مژده حاجیان, [سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی]

نیمسال دوم سال تحصیلی ۸۴-۸۳

۱۰۰ - مطالعه فعالیت زوج های یونی در واکنشهای استخلاف هسته دوست روی کربن چهاروجهی و کربن وینیلی یک مطالعه از اساس و NAO

ظاهره کریمیان کاکلکی, [علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی]

۱۰۱ - مطالعه چرخش حول پیوند ساده نیتروژن-آریل در ترکیبات پر استخلاف تترایدرو-۵-اکسو-۴H-کرومن با استفاده از HNMR و محاسبات اوربیتال مولکولی نیمه تجربی

شهربانو ادینه, [علی ابراهیمی, حسین روحی]

۱۰۲ - نانو سیستمهای آنتی

, [علی ابراهیمی]

۱۰۳ - بررسی سینتیک نظری و تجربی و مکانیسم چند واکنش جدید آلی به وسیله محاسبات مکانیک کوانتومی

, [سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی]

مقالات بین المللی

۱۴۰۱

۱ – بررسی نظری تفصیلی تمایل اتصال $\text{THR}-\text{u}^{+3}\text{b}^2$ و فعالیت تعدادی از بیس فنل‌های هالوژنه

سامان زارع قشلاقی, علی ابراهیمی, Zeinab Faghih

شماره: ۴۰ از صفحه: ۱۰۸۳۵ تا صفحه: ۱۰۸۵۱

۲ – Synthesis, biological evaluation, and computational studies of some novel quinazoline derivatives as anticancer agents

Leila Emami, Soghra Khabnadideh, Zahra Faghih, Farnoosh Farahvasi, Fatemeh Zonobi, سامان زارع قشلاقی

شماره: ۱۶ از صفحه: ۱ تا صفحه: ۱۴

۱۴۰۰

۳ – Multi-stage screening to predict the specific anticancer activity of Ni(II) mixed-ligand complex on gastric cancer cells; biological activity, FTIR spectrum, DNA binding behavior and simulation studies

لیلی حیدرپور صارمی, Karim Dadashi Noshahr, علی ابراهیمی, Ali Khalegian, خاطره عبدی, میلاد لگزریان

شماره: ۲۵۱ از صفحه: ۱۱۹۳۷۷ تا صفحه: ۱۱۹۳۷۷-۱۰

۴ – The cooperativity and diminutive effects between the cation- π and aerogen bond in some complexes of heterocyclic rings

صادقعلی باوفا, علیرضا نوروزی, علی ابراهیمی

شماره: ۱۱۹ از صفحه: ۱ تا صفحه: ۱۳

۱۳۹۹

۵ – Identification of New Potential Cyclooxygenase-2 Inhibitors: Insight from High Throughput Virtual Screening of ۱۸ Million Compounds Combined with Molecular Dynamic Simulation and Quantum Mechanics

لیلی حیدرپور صارمی, علی ابراهیمی, میلاد لگزریان

شماره: ۳۹ از صفحه: ۱۷۱۷ تا صفحه: ۱۷۳۴

۶ – Pi -Stacking effects on acid capacity of p-aminobenzoic acid

ابراهیم خلیلی نیا, علی ابراهیمی

شماره: ۳۱ از صفحه: ۱۷۰۷ تا صفحه: ۱۷۱۶

The electrochemical properties and PIM1 kinase enzyme inhibition of some 2-(hydroxy - 7 phenyl amino) naphthalene-1,4-dione derivatives

ناهید حسینی, علی ابراهیمی

شماره: ۳۰۷ از صفحه: ۱۱۲۸۷۴ تا صفحه: ۱۱۲۸۷۴-۱۶

On Calculating the Bending Modulus of Lipid Bilayer Membranes from Buckling Simulations – ۸

Jad Eid, حافظ رزم ازما, Alia Jraiz, علی ابراهیمی, Luca Monticelli

شماره: ۱۲۴ از صفحه: ۶۲۹۹ تا صفحه: ۶۳۱۱

Insight into 6-aminopenicillanic acid structure and study of the quantum mechanical – ۹ calculations of the acid-base site on gamma-Fe2O3@SiO2 core-shell nanocomposites and as efficient catalysts in multicomponent reactions

فروه صابری لمراسکی, سمیه استوار, رویا به آذین, علیرضا رضوانی, علی ابراهیمی, حمیدرضا شاطریان

شماره: ۴۷ از صفحه: ۲۰۶۸۸ تا صفحه: ۲۰۶۹۶

۱۳۹۸

Ellagitannin derivatives and some conjugated metabolites: aqueous-DMSO proton – ۱۰ affinities and acidity constants

اسیه شهرکی, علی ابراهیمی

شماره: ۳۰ از صفحه: ۱۳۴۳ تا صفحه: ۱۳۵۱

Quantum chemical study of the nature of interactions between the boraphosphinine and – ۱۱ ?alumaphosphinine with some of the mono- and divalent cations: cation-? or cation-lone pair

صادقعلی باوفا, علیرضا نوروزی, علی ابراهیمی

شماره: ۳۰ از صفحه: ۱۸۸۷ تا صفحه: ۱۸۹۸

Complexes of damirone A/C, batzelline A/D, makaluvamine O and makaluvone with – ۱۲ guanidinium and magnesium cations: a theoretical study

صابر محمدی چالانچی, علی ابراهیمی, علیرضا نوروزی

شماره: ۳۰ از صفحه: ۱۶۳۵ تا صفحه: ۱۶۴۶

Ab initio study of aerogen-bonds between some heterocyclic compounds of benzene with – ۱۳ (the noble gas elements (Ne, Ar, and Kr

صادقعلی باوفا, علیرضا نوروزی, علی ابراهیمی

شماره: ۳۱ از صفحه: ۴۳۵ تا صفحه: ۴۴۵

Binding of ellagic acid and urolithin metabolites to the CK γ protein, based on the ONIOM – ۱۴ method and molecular docking calculations

اسیه شهرکی, علی ابراهیمی

شماره: ۴۳ از صفحه: ۱۵۹۸۳ تا صفحه: ۱۵۹۹۸

Tautomerism, Intramolecular H-bonding, Acidity and Complexation of ۲,۴-Dioxo-۴- – ۱۵ Phenylbutanoic Acid

ابراهیم خلیلی نیا, علی ابراهیمی

شماره: ۷ از صفحه: ۳۷۵ تا صفحه: ۳۹۴

۱۶ – بینش ساختاری برای طراحی منطقی مهارکننده های جدید ۱-PIM کیناز بر اساس مشتقات ۳,۵-disubstituted indole: یک روش محاسباتی یکپارچه

حافظ رزم ازما, علی ابراهیمی, Mohammad Hashemi

شماره: ۱۱۸ از صفحه: ۱۰۳۶۴۱-۱ تا صفحه: ۱۰۳۶۴۱-۱۰

۱۳۹۷

Substituent effects on direct and indirect tautomerism of pyrimidin-۲(۱H)-one/pyrimidin- – ۱۷ ۲-ol

لیلی حیدرپور صارمی, علی ابراهیمی, میلاد لگزian

شماره: ۴۵ از صفحه: ۵۸ تا صفحه: ۶۷

The role of chlorine substituents in lichexanthenes properties the ionic and halogen bond – ۱۸ interactions

نجمه مصطفوی ده ریسی, علی ابراهیمی

شماره: ۱۳۷ از صفحه: ۱۱۷ تا صفحه: ۱۲۸

The effects of cation and anion interactions on halogen bonds in the N...X...N complexes A – ۱۹ comprehensive theoretical study

حافظ رزم ازما, علی ابراهیمی

شماره: ۸۴ از صفحه: ۱۳۴ تا صفحه: ۱۴۴

The physicochemical properties and tyrosinase inhibitory activity of ectoine and its – ۲۰ analogues A theoretical study

رویا به آذین, علی ابراهیمی

شماره: ۱۱۳۰ از صفحه: ۶ تا صفحه: ۱۴

The estimation of H-bond and metal ion–ligand interaction energies in the G-Quadruplex – ۲۱ M n complexes

نجمه مصطفوی ده ریسی, علی ابراهیمی

شماره: ۱۱۶۱ از صفحه: ۲۴۶ تا صفحه: ۲۵۳

A Computational Study on the Hydride Transfer Mechanism between Nicotinamide and – ۲۲ Menadione

شیوا رضازاده بمبویانی, علی ابراهیمی

شماره: ۳ از صفحه: ۱۱۹۷۷ تا صفحه: ۱۱۹۸۵

The effects of anion approaching directions to the π - π^+ interaction – ۲۳

ابوالفضل عزیزی, علی ابراهیمی

شماره: ۲۷۶ از صفحه: ۱۷۰ تا صفحه: ۱۷۸

Theoretical insight to intermolecular hydrogen bond interactions between methyl N-(۲ – ۲۴ pyridyl) carbamate and acetic acid: substituent effects, cooperativity and energy decomposition analysis

صابر محمدی چالانچی, علی ابراهیمی, علیرضا نوروزی

شماره: ۵۱ از صفحه: ۲۲۴ تا صفحه: ۲۳۳

۱۳۹۶

۲۵ – تانشیون ۱ و ایزوتانشیون ۱: اثر محیط

فاطمه پاکزاد, علی ابراهیمی, ابوالفضل عزیزی

شماره: ۱۱۱۵ از صفحه: ۲۷۶ تا صفحه: ۲۸۳

۲۶ – برهمکنش بین مولکولی

ناهید حسابی, علی ابراهیمی, علیرضا نوروزی

شماره: ۷۷ از صفحه: ۸۶ تا صفحه: ۹۳

۲۷ – اثر خواص ساختاری

شیوا رضازاده بمبویانی, علی ابراهیمی, علیرضا نوروزی

شماره: ۱۱۱۸ از صفحه: ۲۶ تا صفحه: ۳۸

The effect of anion– interactions on the properties of pyrazinamide and some related – ۲۸ compounds

صفیه سرحدی نیا, علی ابراهیمی

شماره: ۱۱۲۴ از صفحه: ۵۱ تا صفحه: ۵۸

Mutual effects of the cation- π , anion- π and intramolecular hydrogen bond in the various π - π complexes of ۱,۳,۵-triamino-۲,۴,۶-trinitrobenzene with some cations (Li^+ , Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+}) and anions (F^- , Cl^- , Br^-)

علیرضا نوروزی، علی ابراهیمی، امید رضوانی راد

شماره: ۲۹ از صفحه: ۱۲۹ تا صفحه: ۱۳۷

Theoretical investigation of the π - π + π - π + stacking interactions in substituted pyridinium ion

ابوالفضل عزیزی، علی ابراهیمی

شماره: ۷۷ از صفحه: ۲۲۵ تا صفحه: ۲۳۱

The π - π stacking of tanshinone I and isotanshinone I with phenylalanine: The effects of isomerization, complexation and environment

فاطمه پاکزاد، علی ابراهیمی، ابوالفضل عزیزی

شماره: ۱۶ از صفحه: ۱۷۵۰۰۶۷ تا صفحه: ۱۷۵۰۰۶۷-۱۸

۱۳۹۵

Characterization of π -stacking interactions between aromatic amino acids and quercetagenin

فریده بدیچی آخر، علی ابراهیمی، نجمه مصطفوی ده ریسی

شماره: ۱۱۲۸ از صفحه: ۱۳ تا صفحه: ۲۰

۳۳- کمپلکسهای بنزوئیدرازید...X-: تعامل بین برهمکنش آنیون-پی و پیوند هیدروژنی

ابوالفضل عزیزی، علی ابراهیمی

شماره: ۲۸ از صفحه: ۶۸۷ تا صفحه: ۶۹۵

۳۴- نگرشی تجربی و نظری به سینتیک و مکانیسم واکنش سنتز ۲و۳-دی هیدرو-۲-فنیل کینازولین....

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، مهدی شهرکی، علی ابراهیمی، مهدیه دریجانی

شماره: ۴۹ از صفحه: ۱۵۷ تا صفحه: ۱۷۲

۳۵- کمپلکسهای بنزوئیدرازید...X-: تعامل بین برهمکنش آنیون-پی و پیوند هیدروژنی

ابوالفضل عزیزی، علی ابراهیمی

شماره: ۲۸ از صفحه: تا صفحه:

۳۶- بررسی نظری برهمکنشهای p-p در یون پیریدینیوم استخلاف شده

ابوالفضل عزیزی، علی ابراهیمی

شماره: ۷۷ از صفحه: ۲۲۵ تا صفحه: ۲۳۱

Experimental and Theoretical Insight into the Kinetics and Mechanism of the Synthesis – ۳۷ Reaction of ۲,۳-Dihydro-۲-phenylquinazolin-۴(۱H)-one Catalyzed in Formic Acid

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، مهدی شهرکی، علی ابراهیمی، مهدیه دریجانی

شماره: ۴۹ از صفحه: ۱۵۷ تا صفحه: ۱۷۲

۱۳۹۴

Kinetic Aspects of Tetrahydrobenzo[b]pyran Formation in the Presence of Fructose as a – ۳۸ Green Catalyst: a Mechanistic Investigation

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، مهدی شهرکی، علی ابراهیمی، سیده شادفر پورپناه

شماره: ۴ از صفحه: ۳۷۹ تا صفحه: ۳۹۰

A Theoretical Study of –Stacking interactions in C-Substituted Tetrazoles – ۳۹

عبدالکریم فرخزاده فرخزاده، علیرضا مدرسی عالم، فریده بدیچی آخر بدیچی آخر، علی ابراهیمی

شماره: ۶۷ از صفحه: ۸۵ تا صفحه: ۹۳

Theoretical investigation of the backbone*** and *** stacking interactions in substituted– – ۴۰ benzene|۳-methyl-۲'-deoxyadenosine: a perspective to the DNA repair

حجت ثمره دلارامی، علی ابراهیمی

شماره: ۱۱۴ از صفحه: ۷۷۴ تا صفحه: ۷۸۳

The influence of CH...p interaction on hydrogen bonding ability of –CONH۲ functional – ۴۱ group of benzamide

ذبیح الله مومنی، علی ابراهیمی

شماره: ۲۷ از صفحه: ۱۱۹۹ تا صفحه: ۱۲۰۹

H-bond and dipole–dipole interactions between water and COO functional group in methyl – ۴۲ benzoate derivatives: Substituent and heteroatom effects

صفیه سرحدی نیا، علی ابراهیمی

شماره: ۷۰ از صفحه: ۷ تا صفحه: ۱۳

– ۴۳ تحقیق سینتیک تتراهیدروبنزوپیران در حضور فروکتوز..یک مطالعه تجربی

حلیمه یعقوبیان، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، علی ابراهیمی

شماره: ۴۸ از صفحه: ۲۴۴ تا صفحه: ۲۴۹

Vibrational spectra of β -bromo and β -chloro derivatives of β – ۴۴ (tris(acetylacetonato)chromium(III)

فاطمه دولتی, سید فرامرز طیاری, محمد وکیلی, علی ابراهیمی

شماره: ۱۱۰۳ از صفحه: ۱ تا صفحه: ۸

The Nature of Halogen Bonds in $[N\cdots X\cdots N]^+$ Complexes: A Theoretical Study – ۴۵

علی ابراهیمی, حافظ رزم آزما, حجت ثمره دلارامی

شماره: ۱۴ از صفحه: ۱ تا صفحه: ۱۵

۱۳۹۳

The effect of intramolecular hydrogen bond on the N-glycosidic bond strength in ۳ – ۴۶ methyl-۲-deoxyadenosine: A quantum chemical study

حجت دلارامی, علی ابراهیمی, صوفیا بزی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی

شماره: ۴۱۱ از صفحه: ۴۱۹ تا صفحه: ۴۱۹

Synthesis, characterization, X-ray crystal structure, DFT calculation and antibacterial – ۴۷ activities of new vanadium(IV, V) complexes containing chelidamic acid and novel thiourea derivatives

جواد فرزانه فر, خالد قاسمی, علی رضا رضوانی, حجت ثمره دلارامی, علی ابراهیمی, هتا حسین پور, امیر اسکندر

شماره: ۱۱۵ از صفحه: ۱ تا صفحه: ۱۱۵

Stacking effects on the hydrogen bonding capacity of methyl۲-naphthoate – ۴۸

فریده بدیچی آخر, علی ابراهیمی

شماره: ۱۱۵ از صفحه: ۱ تا صفحه: ۱۲۲

(Vibrational spectra of tris(acetylacetonato)chromium(III – ۴۹

فاطمه دولتی, محمد وکیلی, علی ابراهیمی, فرامرز طیاری

شماره: ۳۴۰ از صفحه: ۳۴۷ تا صفحه: ۳۴۷

A novel high performance stopped-flow apparatus equipped with a special constructed – ۵۰ mixing chamber containing a plunger under inert condition with a very short dead-time to investigate very rapid reactions

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی, ملک طاهر مقصودلو, مهدی شهرکی, دنیس پرایس, علی پاکنهاد

شماره: ۸۷۳ از صفحه: ۸۸۴ تا صفحه: ۸۸۴

۵۱ – The influence of cations and anions on some structural and electronic properties of single-walled zigzag boron nitride and aluminum nitride nanotubes: a computational study

حمید رضا مسعودی، علی ابراهیمی، ستوده باقری

شماره: از صفحه: ۱۰۱۳ تا صفحه: ۱۰۲۴

۵۲ – Investigation of the effect of p-p stacking interaction on the properties of –CONH₂ functional group of benzamide

ذبیح الله مومنی، علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۵۳ – Theoretical investigation of the backbone^{***} and ^{***} stacking interactions in substitutedbenzene||۳-methyl-۲-deoxyadenosine: a perspective to the DNA repair

حجت ثمره دلارامی، علی ابراهیمی

شماره: ۱۰ از صفحه: تا صفحه:

۵۴ – Mechanistic and Full Kinetic Study of the Reaction between ۴-cholorobenzaldehyde, malononitrile, and dimedone uisng caffeine as agreen catalyst

حلیمه یعقوبیان، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، علی ابراهیمی

شماره: ۳۱ از صفحه: ۲۱۰۷ تا صفحه: ۲۱۱۳

۱۳۹۲

۵۵ – Intramolecular hydrogen bonding in chemoselective synthesized ۲-substituted pyrrole stable phosphorus ylide GIAO AIM and NBO approaches

مهدی شهرکی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، علی ابراهیمی، ملک طاهر مقصودلو

شماره: ۲۴ از صفحه: تا صفحه:

۵۶ – Mechanistic study of the formation of a phosphonate ester containing ۲ fluoroaniline

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: ۲۲۱ تا صفحه: ۲۳۹

۵۷ – ^۱H NMR kinetic investigation of the equilibrium between the Z- and E-isomers in a stable phosphorus ylide involving ۲-mercaptobenzimidazole

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: ۲۹۵ تا صفحه: ۳۰۴

^۱HNMR spectroscopic investigation of the kinetics of the equilibrium between Z and E – ۵۸ isomers

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: ۲۷۲۹ تا صفحه: ۲۷۳۶

Relationship between cation- π and anion- π interactions: individual binding energies in – ۵۹ the π -M- π -X- π system

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، رویا به آذین، شیوا رضازاده، ابوالفضل عزیزی، پویا کریمی

شماره: ۱۱۲ از صفحه: ۴۱ تا صفحه: ۴۸

Presentation of a new index for estimation of aromaticity in halo- and cyanobenzenes: The – ۶۰ role of potential energy in aromaticity

علی ابراهیمی، نجمه مصطفوی، پویا کریمی

شماره: از صفحه: ۱۵۴ تا صفحه: ۱۶۱

The effects of interactions of dicarboxylic acids on the stability of the caffeine molecule: A – ۶۱ theoretical study

ابوالفضل عزیزی، علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، شیوا رضازاده، رویا به آذین

شماره: از صفحه: ۱۱۱۶ تا صفحه: ۱۱۲۳

Theoretical study on the detailed repair of O۶-methyl guanine to guanine by cysteine – ۶۲

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، شیوا رضازاده، رویا به آذین، ابوالفضل عزیزی

شماره: ۱۲۶ از صفحه: ۱۸۰۳ تا صفحه: ۱۸۱۳

Full kinetics investigation of the formation reaction of phosphonate esters in the gas- – ۶۳ phase: a theoretical study

محمد امین کاظمیان، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: ۱ تا صفحه: ۱۹

۱۳۹۱

A joint experimental and theoretical investigation of kinetics and mechanistic study in a – ۶۴ synthesis reaction between triphenylphosphine and dialkyl acetylenedicarboxylates in the presence of benzhydrazide

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، علی ابراهیمی، ملک طاهر مقصودلو

شماره: ۱۸ از صفحه: تا صفحه:

Kinetic and Mechanistic Insights into the pathway leading to cyclic crystalline phosphorous – ۶۵ ylide formation in the presence of ۳-chloropentane-۲,۴-dione theoretical and stopped-flow approaches

علی ابراهیمی، نیلوفر اکبرزاده تربتی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، مهدی شهرکی
شماره: ۴۵ از صفحه: ۵۹۶ تا صفحه: ۶۱۲

Investigation of the – stacking interactions without direct electrostatic effects of – ۶۶ substituents: the aromaticaromatic and aromaticanti-aromatic complexes

علی ابراهیمی، پویا کریمی، فریده بدیچی آخر، رویا به آذین، نجمه مصطفوی
شماره: ۱۱۲ از صفحه: ۱۰۴۷ تا صفحه: ۱۰۵۶

Caffeine as base analogue of adenine or guanine: A theoretical study – ۶۷

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، فریده بدیچی آخر، عبدالکریم فرخزاده، پویا کریمی
شماره: ۸۱ از صفحه: ۹۱ تا صفحه: ۹۱

Kinetic and Mechanistic Q1 Insights into the Pathway Leading to Cyclic Crystalline – ۶۸ Phosphorus Ylide Formation in the Presence of ۳-Chloropentane-۲,۴-dione: Theoretical and Stopped-Flow Approaches

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، علی ابراهیمی، ملک طاهر مقصودلو، نیلوفر اکبرزاده تربتی
شماره: ۸۱ از صفحه: ۹۱ تا صفحه: ۹۱

Intramolecular hydrogen bonding in chemoselective synthesized ۲-substituted pyrrole – ۶۹ stable phosphorus ylide: GIAO, AIM, and NBO approaches

مهدی شهرکی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، علی ابراهیمی، ملک طاهر مقصودلو، یونس قلندرزی
شماره: ۲۴ از صفحه: ۶۲۳ تا صفحه: ۶۳۵

Mechanistic study of the formation of a phosphonate ester containing ۲fluoroaniline: – ۷۰ theoretical assignment of the resulting isomer

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، یونس قلندرزی، فاطمه قدسی، عثمان آشری
شماره: ۸۱ از صفحه: ۹۱ تا صفحه: ۹۱

The Radical Cationic Repair Pathway of Cyclobutane Pyrimidine Dimer: The Effect of – ۷۱ Sugar-Phosphate Backbone

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، آسیه شهرکی
شماره: ۷۴ از صفحه: ۷۴ تا صفحه: ۸۲

Mechanistic study of the formation of a phosphonate ester containing ۲ fluoroaniline: – ۷۲ theoretical assignment of the resulting isome

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، یونس قلندرزهی، فاطمه قدسی، عثمان اشری

شماره: ۳۸ از صفحه: ۲۲۱ تا صفحه: ۲۳۹

^۱h NMR kinetic investigation of the equilibrium between the Z- and E-isomers in a stable – ۷۳ phosphorus ylide involving ۲ mercaptobenzimidazole

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، محمد امین کاظمیان، سارا سام سالاری، شهین نصی

شماره: ۳۸ از صفحه: ۲۹۵ تا صفحه: ۳۰۴

۱۳۹۰

Chemoselective Synthesis of Stable Phosphorus Ylides from ۶-Azauracil and Mechanistic – ۷۴ Investigation of the Reaction by UV Spectrophotometry

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی

شماره: ۱۳۸۴ از صفحه: تا صفحه:

NMR study and AIM analysis for assignment of the two Z- and E-isomers in phosphorane – ۷۵ containing a ۲-thiazoline-۲-thiol

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، علی ابراهیمی، ملک طاهر مقصودلو

شماره: از صفحه: تا صفحه:

The impact of protonation and deprotonation of ۳-methyl-۲-deoxyadenosine on N- – ۷۶ glycosidic bond cleavage

علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: The impact تا صفحه:

Effect of protonation on individual hydrogen bonds in the ۸-oxoguanine-cytosine base – ۷۷ pair NMR NBO and AIM analyses

علی ابراهیمی

شماره: ۱۰۹ از صفحه: تا صفحه:

Establishing a new conductance stopped-flow apparatus to investigate the initial fast step – ۷۸ of reaction between ۱ ۱ ۱-trichloro-۳-methyl-۳-phospholene and methanol under a dry inert atmosphere

علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Dynamic ^1H NMR study around the carbon–carbon single bond partial carbon–carbon – V9 double bond in the two particular phosphorus ylides and in an enaminoester

علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Efficient Synthesis of Stable Phosphonate Ylides and Phosphonate Esters Reaction – A0 Between Activated Acetylenes and Triphenylphosphite in the Presence of Sulfonamide and Heterocyclic NH–Acids

علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Effects of Sugar Ring Puckering Anti–Syn Interconversion and Intramolecular Interactions – A1 on N–Glycosidic Bond Cleavage in $\text{3-Methyl-2-deoxyadenosine}$ and 2-Deoxyadenosine

علی ابراهیمی

شماره: ۸ از صفحه: تا صفحه:

Theoretical NMR study Kinetics and a mechanistic investigation of the reaction between – A2 triphenylphosphine dialkyl acetylenedicarboxylates and acetyl acetone

علی ابراهیمی

شماره: ۱۸ از صفحه: تا صفحه:

Theoretical NMR study kinetics and a mechanistic investigation of the reaction between – A3 triphenylphosphine dialkylacetylenedicarboxylates and acetyl acetone

ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی

شماره: ۱۸ از صفحه: تا صفحه:

efficient synthesis of stable phosphonate ylides and phosphonate esters – A4

ملک طاهر مقصودلو، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، رضا حیدری، علی ابراهیمی

شماره: ۱۴ از صفحه: تا صفحه:

Cooperativity of CH/ π and hydrogen bond interactions in $\text{HF}\cdots\text{Py}\backslash\text{X1benX2}$ complexes – A5

پویا کریمی، علی ابراهیمی، صوفیا بزی

شماره: از صفحه: ۹۹۱ تا صفحه: ۹۹۸

The influence of cation– π and anion– π interactions on the strength and nature of $\text{N}\cdots\text{H}$ – A6 hydrogen bond

شماره: از صفحه: ۴۸ تا صفحه: ۵۵

۱۳۸۹

شماره: از صفحه: تا صفحه:

شماره: از صفحه: تا صفحه:

شماره: از صفحه: تا صفحه:

شماره: از صفحه: تا صفحه:

شماره: از صفحه: تا صفحه:

شماره: ۳۱ از صفحه: تا صفحه:

Study of Reaction between Activated Acetylenes and N N –Diethyl– γ –thiobarbituric Acid in – γ – the Presence of Isocyanides or Triphenylphosphine

قاسم مرندی, ملک طاہر مقصودلو, نورا... حاضری, رضا حیدری, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراہیمی
شماره: از صفحه: تا صفحه:

Kinetics and Mechanism Investigation of the Reaction between Triphenylphosphine Di- – ۹۴ tert-butyl Acetylenedicarboxylate and OH-Acid

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراہیمی, ملک طاہر مقصودلو
شماره: از صفحه: تا صفحه:

Quantum mechanical calculation for determination of more stable isomer of phosphorous – ۹۵ ylide involving an indol

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراہیمی, ملک طاہر مقصودلو
شماره: ۲ از صفحه: تا صفحه:

Effect of CH₃CO functional group on the molecular and electronic properties of BN₄C₃zz – ۹۶ nanotube A computational chemistry study

حسین روحی, علیرضا نوروزی, علی ابراہیمی
شماره: از صفحه: تا صفحه:

NMR Study Theoretical Calculations for Assignment of the Z- and E-Isomers and Kinetics – ۹۷ Investigation of Stable Phosphorus Ylides Involving a ۲-Mercapto-۴,۶-dimethyl Pyrimidine

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراہیمی, ملک طاہر مقصودلو
شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۳۸۸

Development of Eclipsed and Staggered Forms in Some Hydrogen Bonded Complexes – ۹۸

علی ابراہیمی, مژگان خراسانی مطلق
شماره: از صفحه: تا صفحه:

Relationship between calculated NMR data and intermolecular hydrogen bond properties in – ۹۹ X-pyridine HF

علی ابراہیمی, مژگان خراسانی مطلق
شماره: از صفحه: تا صفحه:

The role of H... interaction on some calculated NMR data – ۱۰۰

علی ابراہیمی, مژگان خراسانی مطلق

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Interaction between uracil nucleobase and phenylalanine amino acid the role of sodium – ۱۰۱ cation in stacking

علی ابراهیمی, مژگان خراسانی مطلق

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Dynamic ^1H NMR study around the heteroaryl carbon and carbon carbon single bonds – ۱۰۲ and also around carbon carbon double bond in a particular phosphorous ylide involving a ۲-methyl indole

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, ملک طاهر مقصودلو, علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Theoretical Study An Efficient Synthesis Route to And Kinetic Investigation of Stable – ۱۰۳ Phosphorus Ylides Derived from Benzamide

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی, ملک طاهر مقصودلو, حمیده سراوانی, محمد زکریانزاد, محبوبه قهرمان

شماره: از صفحه: تا صفحه:

One-pot three-component reaction of aromatic isocyanides and dialkyl acetylene – ۱۰۴ dicarboxylates in the presence of aryl aldehydes A convenient synthesis of highly hinderanced aminofurans

نورا... حاضری, ملک طاهر مقصودلو, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Theoretical kinetics and mechanism investigation of the reaction between – ۱۰۵ triphenylphosphine di-tert-butyl acetylenedicarboxilate and OH-acid

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی, ملک طاهر مقصودلو

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۰۶ – ثبت در یک مجله دیگر

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, ملک طاهر مقصودلو, علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

AIM analysis for the ylide rotamers from the reaction between triphenylphosphine and – ۱۰۷ dialkyl acetylenedicarboxilates in the presence of ۲-pyrrolecarbaldehyde

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی, ملک طاهر مقصودلو

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Theoretical Study and Synthesis of the Reaction Between Triphenylphosphine Dialkyl – ۱۰۸
Acetylenedicarboxylates and ۲-Aminobenzimidazole ۲-Hydroxy-۳-Nitropyridine or ۱ ۲ ۳ ۴-
Tetrahydrocarbazol

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، رضا حیدری، نورا... حاضری

شماره: ۷۵ از صفحه: تا صفحه:

۱۰۹ - اثر استخلافهای CH_3 ، F و NO_2 روی انرژیهای پیوندی هیدروژنی مجزای زوج باز آدنین - تیمین و
گوآتین - سیتوزین

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، هادی اسماعیلی درمیان

شماره: ۲۴ از صفحه: ۴۰۹ تا صفحه: ۴۱۶

۱۳۸۷

Density functional calculations of response of single-walled armchair carbon nanotubes – ۱۱۰
to axial tension

علی ابراهیمی، حسین احتشامی، مرضیه محمدی دولت آباد

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Anion- interactions CP-corrected vs. standard optimization AIM and NBO analyses – ۱۱۱

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، امید رضوانی راد

شماره: ۳۴ از صفحه: تا صفحه:

Kinetic study and mechanism. investigation of the reactions between triphenylphosphine – ۱۱۲
dialkyl acetylenedicarboxilates and NH-acid such as ۲-aminobenzimidazole by UV

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، محمد زکریانزاد، پیمان محمدزاده جهانی، مهدی ش

شماره: ۶ از صفحه: تا صفحه:

A comparison of C-C rotational barrier in ۲ staffane ۲ tetrahedrane and ethane – ۱۱۳

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، نامعلوم صنعتی، محمد محمدی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Biologically Active Benzoxazolinone in Reaction with Triphenylphosphine Dialkyl – ۱۱۴
Acetylenedicarboxilates and Theoretical Study on the Kinetic and Mechanism Investigation of
the Reactions

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، علی ابراهیمی، ملک طاهر مقصودلو، محمدامین کاظمیان

مجله زیست دارو و داروشناسی شماره: ۱ از صفحه: تا صفحه:

Antiaromaticity affects on the response of single walled armchair carbon nanotube to – ۱۱۵ tension

مرضیه محمدی, علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, حسین احتشامی
شماره: از صفحه: تا صفحه:

Synthesis Dynamic ^1H NMR and Theoretical Study of Aryl–Nitrogen Single Bond – ۱۱۶ Rotational Energy Barriers in Highly Functionalized ^1H –Chromenes

رویا کبیری, نورا... حاضری, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, ملک طاهر مقصودلو, علی ابراهیمی, لطفعلی سقط فروشان
شماره: xvii از صفحه: تا صفحه:

A facile synthesis dynamic ^1H NMR and theoretical study of novel stable heterocyclic – ۱۱۷ phosphorus ylides containing a tetrazole ring

محمدامین کاظمیان, محمود نصیری, علی ابراهیمی, ملک طاهر مقصودلو, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, فاطمه واشقانی
شماره: xvii از صفحه: تا صفحه:

Substituent Effect On Intramolecular Hydrogen Bonding in ^{2} –Hydroxybenzaldehyde – ۱۱۸

علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, راضیه سادات نی بند
شماره: از صفحه: تا صفحه:

SYNTHESIS OF STABLE PHOSPHORUS YLIDES FROM ^{6} –CHLORO– ^{2} –BENZOXAZOLINONE – ۱۱۹ AND KINETIC INVESTIGATION OF THE REACTIONS BY UV SPECTROPHOTOMETRY

محمدامین کاظمیان, پویا کریمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, علی ابراهیمی, ملک طاهر مقصودلو, فروغ جلیلی میل
شماره: ۳۴ از صفحه: تا صفحه:

Interaction between some anions and deficient olefinic and aromatic centers – ۱۲۰

علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, امید صیادی
شماره: از صفحه: تا صفحه:

Kinetic study and mechanism investigation of the reactions between triphenylphosphine – ۱۲۱ dialkyl acetylene dicarboxylates and NH–acid such as Harman

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, ملک طاهر مقصودلو, علی ابراهیمی, محمد زکریانژاد, پیمان محمدزاده جهانی, - شهرک
شماره: ۱ از صفحه: تا صفحه:

The effect of carbon hybridization and halogen–acceptor type on some calculated NMR – ۱۲۲ data in C–X H–F hydrogen bonds

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی

شماره: ۴۸۳ از صفحه: تا صفحه:

Estimation of individual binding energies in some dimers involving multiple hydrogen – ۱۲۳ bonds using topological properties of electron charge density

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی

شماره: ۳۶۵ از صفحه: تا صفحه:

Cooperativity of –stacking and hydrogen bonding interactions and substituent effects on – ۱۲۴ X–ben pyr H–F complexes

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی

شماره: ۱۱ از صفحه: تا صفحه:

۱۳۸۶

The study of counterion effect on the reactivity of nucleophiles in some S_N2 reactions in – ۱۲۵ (gas phase and solvent media ISI)

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، عظیمه امیرمیجانی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Theoretical study of the influence of para– and meta–substituents on X–pyridine HF – ۱۲۶ (hydrogen bonding ISI)

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، حمیدرضا مسعودی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Comparison between standard and counterpoise–corrected optimization using some – ۱۲۷ (hydrogen and halogen bonded systems ISI)

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، حمیدرضا مسعودی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Spectrophotometric Kinetic Studies of the Reaction between Triphenylphosphine Dialkyl – ۱۲۸ (Acetylenedicarboxylates and NH–Acids ISI)

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، مجید مرادیان، محمد زکریانزاد

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Kinetic Investigation of the Reactions Between Triphenylphosphine Dialkyl – ۱۲۹
Acetylenedicarboxylates and NH–Acid such as ۵-۶-Dimethyl Benzimidazole by the UV
(Spectrophotometry Technique) (ISI)

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، مجید مرادیان، محمد زکریانژاد، محبوبه فتاحی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Kinetic investigation of the reactions between triphenylphosphine dialkyl – ۱۳۰
(acetylenedicarboxylates and NH–acid such as ۷-azaindole by the UV spectrophotometry) (ISI)

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، حسین روحی، محمد زکریانژاد

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Kinetics and Mechanism of the Reactions Between Triphenylphosphine Dialkyl – ۱۳۱
(Acetylenedicarboxylates and a NH–Acid Pyrazole by UV Spectrophotometry) (ISI)

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، محمد زکریانژاد، محبوبه فتاحی، طبالوندانی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Kinetic investigation of the reactions between triphenylphosphine dialkyl – ۱۳۲
acetylenedicarboxylates and SH–acid such as ۲-Thiazoline–۲Thiol Or ۲-Mercaptobenzoxazole
by the UV spectrophotometry

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۳۸۵

UV Spectrophotometric Study of the Kenetics and Mechanism of the Reactions between – ۱۳۳
(Triphenylphosphine Dialkl Acetylenedicarboxylates and NH–Acid) (ISI)

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، حسین روحی، محمد زکریانژاد

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Kinetic Investigation of the Reaction between Triphenylphosphine Dialkyl – ۱۳۴
(Acetylenedicarboxylate and Carbazole by the UV Spectrophotometry Technique) (ISI)

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، حسین روحی، محمد زکریانژاد، حمیدرضا داس مه، م

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Kinetic Investigation of the Reactions between Triphenylphosphine Dialkyl – ۱۳۵
(Acetylenedicarboxylates and NH–acids such as Indol Derivatives by UV spectrophotometry) (ISI)

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، مجید مرادیان، علی ابراهیمی، محمد زکریانژاد

شماره: از صفحه: تا صفحه:

(Evaluation of the origin of rotational barrier in $\text{NH}_2\text{-X}$ (X NO NS) (ISI – ۱۳۶

حسین روحی, علی ابراهیمی, بتول مکی آبادی, مرضیه حاجی علیرضایی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Topological and natural population analyses of gas-phase identity SN_2 reactions of some – ۱۳۷
(methyl halides Backside attack (ISI

علی ابراهیمی, حسین روحی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, طاهره کریمیان کاکلکی, راحله وزیری

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Characterization of conformers of non-ionized proline on the basis of topological and – ۱۳۸
(NBO analyses Can nitrogen be a donor of hydrogen bond (ISI

علی ابراهیمی, حسین روحی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, مرضیه محمدی دولت آباد, راحله وزیری

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Determination of gas-phase nucleophilicities and electrophilicities using B HX bond – ۱۳۹
(critical point properties of AIM analysis (ISI

علی ابراهیمی, حسین روحی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی, مهدی حسن نژاددوین

شماره: از صفحه: تا صفحه:

Kinetic Investigation of the Reactions Between Triphenylphosphine Dialkyl – ۱۴۰
Acetylenedicarboxilates and NH -Acid such as Benzimidazole

سیدمصطفی حبیبی خراسانی, ملک طاهر مقصودلو, علی ابراهیمی

شماره: ۱۸۱ از صفحه: تا صفحه:

NBO and AIM Analysis of the Anomeric Effect in Fluoromethanthiol – ۱۴۱

حسین روحی, علی ابراهیمی, سیدمصطفی حبیبی خراسانی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۳۸۴

Anomeric effect and rotational barrier in fluoromethanol A theoretical study – ۱۴۲

حسین روحی, علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

AIM and NBO analyses of N-N rotational barrier in monocyclic nitrosamine compounds – ۱۴۳

حسین روحی، علی ابراهیمی، نامعلوم علیرضا پورو، مرضیه حاجی علیرضایی
شماره: از صفحه: تا صفحه:

Restricted rotation in Six-membered cyclic nitrosamine compounds an ab initio and DFT – ۱۴۴ study and NBO analysis

حسین روحی، نامعلوم دیهیمی، علی ابراهیمی، نامعلوم خان محمدی
شماره: از صفحه: تا صفحه:

Kinetic Investigation of the Reaction between Triphenylphosphine Dialkyl – ۱۴۵ Acetylenedicarboxylates and sh-acid such as ۲-thiazoline –۲-thiol or ۲-mercaptobenzoxazole by uv spectrophotometry

سیدمصطفی حبیبی خراسانی، ملک طاهر مقصودلو، علی ابراهیمی، حسین روحی، محمد زکریانژاد، مجید مرادیان
شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۳۸۳

Determination of Activity Coefficients Osmotic Coefficients and Excess Gibbs Free – ۱۴۶ Energies of HC\ in N N-Dimethylformamide–Water Mixed Solvent Systems by Potentiometric Measurements

علی ابراهیمی، حسین روحی
شماره: از صفحه: تا صفحه:

The characterization of stationary points in the potential energy surface of – ۱۴۷ difluoromethane dimmer

علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی، حسین روحی
شماره: از صفحه: تا صفحه:

Quantum Mechanical Study of Tautomerism of Methimazole Methimazole-I۲ Complexes – ۱۴۸

حسین روحی، علی ابراهیمی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی
شماره: از صفحه: تا صفحه:

the dimer of trimethylene sulfide with some hydrogen and halogen bond donors a – ۱۴۹ theoretical study

علی ابراهیمی، حسین روحی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی
شماره: از صفحه: تا صفحه:

The Dimmers of Trimethylene Sulfide With Some Hydrogen and Halogen Bond Donors a – ۱۵۰ theoretical Study

علی ابراهیمی، حسین روحی، سیدمصطفی حبیبی خراسانی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۳۸۲

۱۵۱ – Natural bond orbital (NBO) population analysis of the highly strained

علی ابراهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۵۲ – Natural bond orbital (NBO) population analysis of the highly strained central bond in ۱.۱.۱ propellane and some ۱.۱.۱ heteropropellane compounds

علی ابراهیمی، نامعلوم دیهیمی، حسین روحی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۳۸۰

۱۵۳ – Alkyl migration in vinylidene acetylene rearrangement reactions investigation of structural activation thermodynamic energies and kinetics properties by density functional theory based method

علی ابراهیمی، نامعلوم دیهیمی، حسین روحی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۵۴ – Nitrogen–inversion in some aziridine type compounds structural and kinetic investigations by ab initio methods

علی ابراهیمی، نامعلوم دیهیمی، حسین روحی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۵۵ – Ab initio calculations of energetic and structural properties of the single–atom peri–bridged naphthalene compounds

حسین روحی، علی ابراهیمی، فرزاد دیهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۵۶ – Restricted rotation in five–membered cyclic nitrosamine compounds DFT investigation of structural energetic and kinetics properties

حسین روحی، علی ابراهیمی، فرزاد دیهیمی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

۱۳۷۹

Investigation of structural properties of heteropropellane compounds by ab initio – ۱۵۷ methods

علی ابراهیمی، نامعلوم دیهیمی، حسین روحی

شماره: از صفحه: تا صفحه:

فعالیت های اجرایی

طرح های پژوهشی

۱۳۸۱

۱ – مطالعه توتومری متی مازول در فاز بخار با استفاده از روش کامپیوتری Abinitio

حسین روحی، علی ابراهیمی – ۱۳۸۱ – دانشگاه سیستان و بلوچستان

۱۳۷۸

۲ – تعیین ضرایب فعالیت، اسمزی و پارامترهای پیتزر در مخلوط حلالها با استفاده از روش EMF

حسین روحی، علی ابراهیمی – ۱۳۷۸ – دانشگاه سیستان و بلوچستان