

۱: مشخصات فردی:

نام: فهیمه

نام خانوادگی: شجاعی اکبرآبادی

تاریخ تولد: ۱۳۴۴/۱۱/۷

تلفن: ۰۳۴۱-۳۲۴۵۷۶۲۳

تلفن همراه: ۰۹۱۳۱۹۷۲۰۹۶

ایمیل: f.shojaie@kgut.ac.ir

fahimehshojaie1344@gmail.com

fahimeh_shojaie@yahoo.com

۲: سوابق تحصیلی:

کارشناسی	کارشناسی ارشد	دکترای تخصصی
رشته تحصیلی و گرایش	شیمی محض	شیمی - شیمی فیزیک (کوانتوم)
مؤسسه محل اخذ مدرک	دانشگاه علوم اصفهان	دانشگاه شهید باهنر کرمان
شهر و کشور محل اخذ مدرک	اصفهان - ایران	کرمان - ایران
تاریخ اخذ مدرک	۱۳۶۸	۱۳۹۰ آبان ماه
عنوان پایان نامه یا رساله	-	مطالعه سازوکار و سینتیک واکنش های متیل کلرید با رادیکال هیدروکسیل و گرامین با کاتیون نیتروزیل
	محاسبه ثابت سرعت واکنش های دو مولکولی با استفاده از نظریه حالت گذار	

۳- سوابق علمی:

الف: تالیف کتاب

حسین - نقیعی، مریم - دهستانی، فهیمه - شجاعی، آشنایی با گوسین و شناسایی حالت گذار، انتشارات دانشگاه شهید باهنر کرمان، ۱۳۸۵.

ب: مقالات چاپ شده در ISI

- 1) M. Dehestani and F. shojaie, The $H + D \rightarrow HD + D$ and $D + H \rightarrow HD + H$ Reactions: ab initio and Rate Constants calculations, Asian Journal of Chemistry, 18 (3), 2269-2279, 2006.
- 2) M. Dehestani and F. shojaie, Ab initio Calculations and Rate Constant for the Reaction $H + H_2$ Asian Journal of Chemistry, 17 (3), 1863-1876, 2005.
- 3) F. Shojaie and M. Dehestani, The simulation of virus life cycle with quantum gates, Computers in Biology and Medicine, 40, 359-362, 2010.
- 4) M. Dehestani and F. shojaie, Multichannel RRKM study on the Mechanism and Kinetics of the CH_3Cl with OH Reaction, International journal of quantum chemistry, 112, 1307-1315, 2012.
- 5) F. Shojaie, M. Dehestani, vibrational mode analysis the multichannel reaction CH_3Cl with OH, International journal of quantum chemistry, 112, 2450-2455, 2011.
- 6) F. Shojaie, Comparison of the rate constants of a bimolecular reaction using two methods, Arabian journal of chemistry, in press, 2013.

- 7) F. Shojaie, M. Dehestani, Theoretical calculations of rates of NDMA formation from gramine, Canadian Journal of chemical, 91: 275–282 (2013).
- 8) F. Shojaie, Quantum mechanical and multichannel RRKM studies of the reaction $N_2O + O$ (3P), Arabian journal of chemistry, in press, 2013.
- 9) F. Shojaie, Theoretical studies on dimerization reactions of 4, 7-diphenyl-1, 10-phenanthroline (BPhen) and bathocuproine (BCP) in organic semiconductors, 48, 1051-62, 2014.
- 10) F. Shojaie, Quantum mechanics and the mechanism of sexual reproduction, International Journal of Advanced Biological and Biomedical Research, 1(10), 1157-1164, 2013.
- 11) M Dehestani, R Naghizadeh, F Shojaie, Theoretical investigation of the mechanism and kinetics of the $CH_3NH_2 + O$ (3P) reaction, Progress in Reaction Kinetics and Mechanism 40 (3), 249-260, 2015.
- 12) F. Shojaie, QSAR Studies of the Dioxins and Interaction of OCDD with Calix[4] Arene Using DFT, Phys. Chem. Res., Vol. 3, No. 3, 249-266, September 2015.
- 13) Fahimeh Shojaie, Nasser Mirzai-Baghini, Molecular dynamics and density functional theory study on the corrosion inhibition of austenitic stainless steel in hydrochloric acid by two pyrimidine compounds, Int J Ind Chem, in press, 2015.
- 14) Fahimeh Shojaie, Theoretical Study of 3-Amino-1, 2, 4-Triazole and its protonated analogue as Corrosion Inhibitors, Jordan Journal of Chemistry (2015), 1(3): 161-177.
- 15) Mehdi Abedi-Varaki¹, Alireza Ganjovi, Fahimeh Shojaei and Zahra Hassani, A model based on equations of kinetics to study nitrogen dioxide behavior within a plasma discharge reactor, Journal of Environmental Health Science & Engineering (2015) 13:69.

۱۶) فهیمه شجاعی، مطالعه نظری خواص ساختاری، کشسانی و پراکنش فونونی فوتوکاتالیست تنگستن تری اکسید، مجله پژوهش سیستمهای بس ذره ای، دوره ۵، شماره ۹، تابستان ۹۴.

پ: مقالات چاپ شده در همایشهای بین المللی و ملی

- 1) H. Naghibi, M. Dehestani and F. Shojaie, Calculation of Rate Constant of Reaction $H + H_2 \rightarrow H_2 + H$ Using Semiclassical Transition State Theory, 2nd Int Conf on Chemistry & its Applications, Doha, 2003.
- 2) M. Dehestani, M. Molaie and F. Shojaie, Hyperplasia and EPR gate, Proceedings of the 15th National & third International Conference of Biology, Tehran, 2008.
- 3) M. Dehestani and F. Shojaie, Ab initio Calculation and Comparison of Semiclassical with Conventional Transition State Theory for Rate Constant of reaction $H + H_2$, Proceeding of the 7th Iranian Physical Chemistry Seminar, Isfahan, 2005.
- 4) M. Dehestani and F. Shojaie, Virus replication, quantum theory and quantum gates, proceeding of the 11th Iranian Physical Chemistry Seminar, Ardabil, 2008.
- 5) M. Dehestani and F. Shojaie, Model based on a quantum algorithm to study the evolution of Streptococcus bacterium in fish, The first National Conference on Fisheries sciences & Aquatic Organisms, Lahijan, 2008.
- 6) M. Dehestani and F. Shojaie, EPR gate and zoospores formation mechanism, The first National Conference on Fisheries sciences & Aquatic Organisms, Lahijan, 2008.
- 7) V. Salari, F. Shojaie, M. Dehestani and M. Rahnema, Mechanism of cell division from the viewpoint of quantum, Proceedings of the 2th National Conference of Biology, Kerman, 2007.
- 8) M. Dehestani, F. shojaie, Quantum and formation of Spirogyra zygote, National Congress of physics, Kashan, 2008.
- 9) M. Dehestani and F. Shojaie, Presentation a quantum model to examination the disease of Cattle plague in small ruminants, proceeding of the 3th Congress on Animal Science, Mashhad, 2008.
- 10) V. Salari, F. Shojaie, M. Dehestani and M. Rahnema, Cell division, No-Cloning and Entanglement, IPM, Tehran, 2007.
- 11) M. Molaei and F. Shojaie, The examination of protoplast fusion from the viewpoint of quantum and sport, 1 st National Congress of Plant Biology, Talesh, 2008.
- 12) M. Molaei and F. Shojaie, Ab initio calculations for Abscisic acid hormone, 1 st National Congress of Plant Biology, Talesh, 2008.

- 13) M. Dehestani and F. Shojaie, Ab initio Calculation and Comparison of Semiclassical with Conventional Transition State Theory for Rate Constant of reaction $H + D \rightarrow HD + D$ and $D + H \rightarrow HD + H$, Proceeding of the 9th Iranian Physical Chemistry Seminar, Tehran, 2005.
- 14) M. Dehestani and F. Shojaie, Simulation of toxoplasmosis asexual reproduction cycle, 6th Iranian National Congress of Parasitology, Karaj, 2008.
- 15) M. Dehestani and F. Shojaie, Quantum and mycelium of dikaryotic (n+n), 6th Iranian National Congress of Parasitology, Karaj, 2008.
- 16) M. molaei and F. Shojaie, The examination cell injuries in contact sports from the viewpoint of quantum, Kerman, 2009.
- 17) M. Dehestani and F. Shojaie, Proceeding of the 13th Iranian Physical Chemistry Seminar, Kish, 2011.
- 18) H. Rasti and F. Shojaie, The first National Conference on Innovations in Thin Film Processing and Their Characterizations, Kerman, 2011.
- 19) F. shojaie and H. Rasti, The first National Conference on Electric discharges, plasma and plasma engineering, Kerman, 2011.
- 20) M. Dehestani H. Naghibi, and F. Shojaie, 14th Iranian chemistry & chemical Engineering congress, Tehran, 2008.
- 21) H. Naghibi, M. Dehestani and F. Shojaie, 2nd Int Conf on Chemistry & its Applications, Doha, 2003.

۲۲) مرجان دهقان، فهیمه شجاعی، مطالعات نظریه تابعی چگالی دارورسانی MS با نانولوله های عاملدار کربنی. یازدهمین کنگره بین المللی MS. اکتبر ۲۰۱۴، تهران.

۲۳) محمد رحیمی نژاد، فهیمه شجاعی، نقش نانولوله ها در درمان سلول های سرطانی، سمینار نانوپزشکی در تشخیص و درمان بیماریهای صعب العلاج، ۲۹ تا ۳۰ بهمن ماه ۱۳۹۳، تهران.

۲۴) مهدی عابدی ورکی، علیرضا گنجویی، فهیمه شجاعی، زهرا حسینی، حذف گاز آلاینده دی اکسید کربن با استفاده از راکتور پلاسمایی، همایش ملی الکترونیکی دستاوردهای نوین در علوم مهندسی و پایه، ۱۳۹۳.

۲۵) فروغ نصرتی، فهیمه شجاعی، محاسبات آغازین جذب O_2 بر سطح $ZnO(110)$ ، همایش یافته های نوین در محیط زیست و اکوسیستم های کشاورزی، ۳۰ آذر ۱۳۹۳، دانشگاه تهران.

۲۶) فروغ نصرتی، فهیمه شجاعی، مطالعه اثر پارامتر U بر خواص ساختاری و نوری زینک بلند روی اکسید، مقاله نامه دوازدهمین کنفرانس ماده چگال انجمن فیزیک ایران، ۹ و ۸ بهمن ۱۳۹۳، دانشگاه صنعتی اصفهان.

۲۷) مرجان دهقان، فهیمه شجاعی، کاربرد نانولوله های کربنی در جذب انرژی تجدید پذیر هیدروژن، چهارمین کنفرانس سالانه انرژی پاک، ۴ و ۵ تیر ۱۳۹۳ - کرمان، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته.

۲۸) فهیمه شجاعی، سعیده خضری پور، بررسی تئوری واکنش های فتوشیمیایی در لایه های نازک نیمه هادی های آل (BCP, BPhen)، دومین کنفرانس نوآوری در پردازش فیلم نازک و مشخصه آنها، ۱۳۹۱.

۲۹) مبارک، رسول؛ گنجویی، علیرضا؛ شجاعی، فهیمه تولید پالس اتوتانیه در فرآیند تابش رد پای همدوس، سومین کنفرانس مهندسی و فیزیک پلاسما دانشگاه تبریز، اردیبهشت ۱ - خرداد ۱۳۹۴.

۳۰) بهنام زمانی، فهیمه شجاعی، مطالعه محاسباتی جذب مولکول اکسیژن بر روی نانولوله های بور نیتریدی، شانزدهمین کنفرانس آموزش فیزیک ایران، شهریور ماه ۱۳۹۴. دانشگاه لرستان.

۳۱) بهنام زمانی، فهیمه شجاعی نانولوله های بور نیتریدی آلایش شده با پتاسیم اساس نانوسنور برای جذب اکسیژن، کنفرانس فیزیک نانو و فرامواد: از شبیه سازی تا صنعت، ۲۲ مهر ماه ۹۴، دانشگاه فسا.

۳۲) محمد رحیمی نژاد، فهیمه شجاعی، مطالعه گاف انرژی برهمکنش نانولوله های بور نیترید تک جداره و سیس پلاتین و کربوپلاتین به عنوان داروهای شیمی درمانی، کنفرانس فیزیک نانو و فرامواد: از شبیه سازی تا صنعت، ۲۲ مهر ماه ۹۴، دانشگاه فسا.

33) Farshid Ebadinejad, Fahimeh Shojaie, Hadi beitollahi ,Ebrahim Dashtrazmi, Fe₃O₄@SiO₂/MNCNT magnetic core-shell nanocomposite modified carbon paste electrode for electrochemical sensing of hydrochlorothiazide. 18th Iranian Chemistry Congress, August 30, September 1, 2015, Semnan.

34) Farshid Ebadinejad, Hadi beitollahi, Fahimeh Shojaie, Ebrahim Dashtrazmi, An electrochemical sensor for sensitive determination of amlodipine using Fe₃O₄@SiO₂/MWCNT magnetic core-shell nanocomposite modified carbon paste electrode. 18th Iranian Chemistry Congress, August 30, September 1, 2015, Semnan.

۴- طرح های تحقیقاتی:

عنوان طرح	سمت
مطالعه تئوری خواص نوری، ساختاری و الکترونی فتوکاتالیست تنگستن تری اکسید	مجری
-اصول اولیه محاسبات خواص الکترونی مس و اکسیدهای مس (بدو ورود)	مجری
ارزیابی درونی گروه شیمی	مجری
مطالعه روش های آغازین واکنش های دایمر شدن BPhen و BCP در نیمه هادی های آلی	مجری
روش DFT جذب گاز N₂ در داخل و خارج نانولوله های کربنی	مجری

۵- سوابق تدریس:

نام درس
فناوری پلاسما
محاسبات کوانتومی مواد نانو ساختار ۱
شیمی نظری ساختارهای نانو
نانوذرات و کاربردهای آن
روش های آنالیز نانو ساختارها
شیمی فیزیک پیشرفته
مبانی شیمی کوانتومی
آز بیوشیمی
شیمی عمومی
ترمودینامیک
شیمی فیزیک ۱
شیمی فیزیک ۲
فیزیک نوین

محل	نوع فعالیت
استاد راهنما، شهریور ۱۳۹۴	بررسی محاسباتی جذب اکسیژن روی نانولوله های بورنیتریدی آلاینده شده
استاد راهنما اول، شهریور ۱۳۹۴	سنتز نانو کامپوزیت مغناطیسی هسته پوسته $Fe_3O_4@SiO_2/MWCNT$ و کاربرد آن در ساخت حسگرهای الکتروشیمیایی جهت اندازه گیری آلوده‌دین
استاد راهنما دوم، شهریور ۱۳۹۴	شبیه سازی فرآیند تولید پالس آتوانیبه به روش PIC-MCC
استاد راهنما، بهمن ۱۳۹۴	بررسی نظری جذب گاز رادون بر نانولوله‌های کربنی تک جداره
استاد راهنما، دی ۱۳۹۴	بررسی برهمکنش بین نانولوله های بورنیترید تک جداره و داروهای سرطان ریه
مشاور پایان نامه، شهریور ۱۳۹۳	راحی راکتور پلاسمایی تبدیل گازهای آلاینده CO_2 و NO_2
مشاور پایان نامه، شهریور ۱۳۹۳	تهیه نانو کامپوزیت های نیکل و بررسی کاربرد آنها
مشاور پایان نامه، شهریور ۱۳۹۳	طراحی راکتور پلاسمایی جهت جداسازی هیدروژن سوافید و کربن دی اکسید از گاز ترش
مشاور پایان نامه، شهریور ۱۳۹۳	مطالعه خواص فیزیکی داروهای اسکروز چندگانه (ام‌اس) و برهم کنش آن‌ها با نانولوله‌های کربنی
مشاور پایان نامه، بهمن ۱۳۹۳	مطالعه تئوری خواص ساختاری و الکترونی فتوکاتالیست روی اکسید و جذب O_2 روی سطح Zn_xO_{1-x} (110)
استاد راهنما دوم، شهریور ۱۳۹۴	شبیه سازی فرآیند تولید پالس آتوانیبه به روش PIC-MCC
داور مقاله در مجله پژوهش سیستم های بس ذره ای	بررسی نقش کایرالیته بر خواص فیزیکی نانولوله های بورون نیترید و کربنی با قطر کوچک
داور مقاله در مجله پژوهش سیستم های بس ذره ای	مطالعه خواص الکترونی و ساختاری کوچکترین نانولوله کربنی پایدار
داور مقاله در مجله پژوهش سیستم های بس ذره ای	ویژگی‌های فیزیکی ترکیب پادپروسکایت $TaCrRu_3$ با استفاده از محاسبات فونونی و مطالعه‌ی مقایسه‌ای با دو ترکیب $VCrRu_3$ و $NbCrRu_3$
داور مقاله در مجله پژوهش سیستم های بس ذره ای	مدهای فونونی اپتیکی در بلور $BaWO_4$
دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته	داوری کتاب "الکترونیک پلاسما: کاربردها در ساخت تجهیزات میکروالکترونیک"
دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته	داوری مقالات در اولین کنفرانس ملی نوآوری در پردازش لایه های نازک و مشخصه های آنها
دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته	داوری مقالات در اولین کنفرانس ملی تخلیه های الکتریکی، پلاسما و مهندسی پلاسما
دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته	دبیر اولین کنفرانس ملی نوآوری در پردازش لایه های نازک و مشخصه های آنها
دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته	عضو کمیته برگزاری اولین کنفرانس ملی تخلیه های الکتریکی، پلاسما و مهندسی پلاسما

دبیر دومین کنفرانس ملی نوآوری در پردازش لایه های نازک و مشخصه های آنها	دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته
عضو کمیته اجرایی کنفرانس تقویت کننده های فیبر نوری	دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته
دبیر کارگاه تئوری و عملی آموزش نرم افزار گوسین	دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته
مدرس کارگاه تئوری و عملی آموزش نرم افزار گوسین	دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته
تدوین و تنظیم لوح فشرده اولین کنفرانس ملی نوآوری در پردازش لایه های نازک و مشخصه های آنها	مرکز بین المللی علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی
تدوین و تنظیم لوح فشرده اولین کنفرانس ملی تخلیه های الکتریکی، پلاسما و مهندسی پلاسما	مرکز بین المللی علوم و تکنولوژی پیشرفته و علوم محیطی