



شیمی و علوم نفت / شیمی معدنی

صادق

صالح زاده

شماره تماس:

رایانامه: [saleh@basu.ac.ir](mailto:saleh@basu.ac.ir)

وب سایت:

پروفایل علم سنجی:

ارتباط با صنعت

■ کجا و چگونه یک ماده آلی می تواند یون هیدرید یا هالید آزاد نماید؟ یک مطالعه تئوری

مقالات علمی چاپ شده در مجلات

■ The nature and degree of the cooperativity of (g5 -C5H5)-metal and metal-CO bonds in half-sandwich complexes of groups 5, 7, 9, and 11 transition metals

Sadegh Salehzdeh, سمانه صانعی موفق, Yasin gholiee  
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, 2024

■ Complexation of drug amifampridine with Cu(II), Zn(II) and Cd(II) ions, and its dimerization with the magic of Mn(II) salts. Potential anti-COVID-19 and anticancer activities†

Sadegh Salehzdeh, ROBERT W. GABLE, سمانه صانعی موفق, فرشید حاجی بابایی,  
DALTON TRANSACTIONS, 2024

■ A new Cu(II) complex derived from the reaction between tris(2-aminoethyl)amine and Cu(I)-activated acetonitrile with potent anticancer activity against some cell lines and high affinity for the essential proteins of SARS-CoV-2

Sadegh Salehzdeh, ROBERT W. GABLE, فرشید حاجی بابایی, Katayon Derakhshandeh  
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, 2024

■ Can we quantitatively evaluate the mutual impacts of intramolecular metal-ligand bonds the same as intermolecular noncovalent bonds?

Sadegh Salehzdeh, سمانه صانعی موفق  
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 2024

■ A Theoretical Study on the Strength and Nature of Metal-dithiolate Bond in Homoleptic Complexes [M(S2C2R2)2] 2- (M=Ni(II), Pd(II), Pt(II); R=H, Me, CN)

Sadegh Salehzdeh, Yasin gholiee  
inorganic chemistry research, 2023

■ Catalysis of the Nitroso-Diels-Alder cycloaddition reaction between CH3N=O and cis-1,3-butadiene by pnictogen bonding, a theoretical study

Sadegh Salehzdeh, Fereshteh Yaghoobi  
JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS & MODELLING, 2023

■ A tris(2-aminoethyl)amine-based zinc complex as a highly water-soluble drug carrier for the anti-COVID-19 drug favipiravir: a joint experimental and theoretical study

Sadegh Salehzdeh, ROBERT W. GABLE, سمانه صانعی موفق, فرشید حاجی بابایی,  
DALTON TRANSACTIONS, 2023

■ Synthesis, characterization, biological and theoretical studies of a new Pd(II) complex of drug carvedilol: Strong anticancer activity against several cell lines

Sadegh Salehzdeh, ROBERT W. GABLE, سمانه صانعی موفق, فرشید حاجی بابایی, Katayon Derakhshandeh  
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, 2023

■ A computational study on the nature, strength and cooperativity of bonds in  $[M(\eta^5-C_6Me_5)(CO)_n]$  and  $[M(\eta^5-Cp)(CO)_n]$  ( $n = 3, M = Mn(I), Tc(I), Re(I)$ ;  $n = 2, M = Co(I), Rh(I), Ir(I)$ ) complexes

Sadegh Salehzdeh, سمانه حکمی, Yasin gholiee  
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, 2022

■ Nickel(II) complexes of two potentially heptadentate(N7) Tripodal Schiff-base ligands; X-ray crystal structure and theoretical studies

Sadegh Salehzdeh, Reza Golbedaghi, Harry Adams  
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, 2022

■ In vitro anticancer activities, multi-spectroscopic and in silico DNA binding studies of propranolol drug and its new Zn(II) complex

Sadegh Salehzdeh, Sadegh Khazalpour, سمیرا شریفی نیا, ندا حسین پور مقدم, Farshid Hajibabaei, Katayon Derakhshandeh  
Results in Chemistry, 2022

■ Nature of C → E and M E bonds in  $[Cp(CO)_2ME \leftarrow NHC(R)]^+$  ( $E = Si, Ge, Sn, Pb$ ;  $M: Cr, Mo, W$ ;  $R = H, F, Cl, Br, CH_3, Ph, dipp, Si(CH_3)_3$ ) complexes

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, الهام سلطانی, فرزانه خدادادی  
POLYHEDRON, 2021

■ The comparison of structure, nature of bond, and electronic transitions in  $[M(\eta^5-Cp)(\eta^5-C_6Me_5)]$  ( $M = Fe^{2+}, Ru^{2+}, Os^{2+}$ ) hybrids and corresponding metallocenes; a theoretical study

Sadegh Salehzdeh, یاسین قلی نی, سمانه حکمی  
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, 2021

■ A new series of manganese(II) complexes of three fully condensed Schiff base ligands derived from some symmetrical and asymmetrical tripodal tetraamines and 2-pyridinecarboxyaldehyde

Sadegh Salehzdeh, جمشید رختشه, Reza Golbedaghi, Harry Adams  
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, 2021

■ Towards computational prediction of anti-cancer activity: Making connection between IC50 values and metal-ligand interaction energies in some NHC complexes of groups 10 and 11

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, محمدرضا رنجبران, بهاره نادری زاده,  
JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 2021

■ Synthesis and crystal structure of manganese(III), zinc(II) and cadmium(II) complexes based on a symmetrical macrocyclic Schiff base ligand containing piperazine moiety, DNA binding studies of complexes

Sadegh Salehzdeh, Hassan Keypour, عرفان عزیزی, معصومه محمودآبادی, ROBERT W. GABLE, فرشید حاجی بابایی  
TRANSITION METAL CHEMISTRY, 2020

■ Quantum mechanics and molecular dynamics studies on the C...H interaction between small fullerenes (C36 and C24) and  $[M(H_2O)_6]^{2+}$  ( $M = Ca^{2+}, Zn^{2+}$ ) cations

Sadegh Salehzdeh, Fereshteh Yaghoobi, Mina Maddah  
JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 2020

■ The solvent effect on selectivity of four well-known cryptands and crown ethers toward Na<sup>+</sup> and K<sup>+</sup> cations; A computational study

Sadegh Salehzdeh, Yasin gholiee  
JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 2020

■ Synthesis and DNA interaction studies of Ni(II), Cu(II) and Co(II) complexes with a polyamine ligand containing homopiperazine; X-ray crystal structure of Cu(II) complex

Sadegh Salehzdeh, Hassan Keypour, سعید فیضی, پریا جانی, معصومه محمودآبادی, ROBERT W. GABLE, فرشید حاجی بابایی  
CHEMICAL PAPERS, 2020

■ Multi-spectroscopic and molecular docking studies on the interaction of neotame with calf thymus DNA

Sadegh Salehzdeh, ندا حسین پور مقدم, fahimeh kheirdoosh, Mahsa Pazhavand, Mahya Sariaslani  
NUCLEOSIDES NUCLEOTIDES & NUCLEIC ACIDS, 2020

■ Probing the Strength and Mechanism of Binding Between Amifampridine and Calf Thymus DNA

Sadegh Salehzdeh, Sadegh Khazalpour, سمیرا شریفی نیا, ندا حسین پور مقدم, Farshid Hajibabaei  
DNA AND CELL BIOLOGY, 2020

■ DNA binding studies and antibacterial properties of a new Schiff base ligand containing homopiperazine and products of its reaction with Zn(II), Cu(II) and Co(II) metal ions: X-ray crystal structure of Cu(II) and Zn(II) complexes

Sadegh Salehzdeh, Roya Karamian, Hassan Keypour, فروزنده هفشجانی فاطمه, نسیم قیاسی, Farshid Hajibabaei, سعید فیضی, ROBERT W. GABLE  
POLYHEDRON, 2019

■ Binding site identification of anticancer drug gefitinib to HSA and DNA in the presence of five different probes

Sadegh Salehzdeh, ندا حسین پور مقدم, massoud saidijam, Hamid Tanzadehpanah, Hanie Mahaki, Omid Rajabi, Rezvan Najafi, Raziieh Amini  
JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS, 2019

■ Anticancer activity, calf thymus DNA and human serum albumin binding properties of Farnesiferol C from *Ferula pseudalliacea*

Sadegh Salehzdeh, ندا حسین پور مقدم, massoud saidijam, Dara Dastan, Hamid Tanzadehpanah, Jamshid Karimi, Pouria Samadi, Hanie Mahaki  
JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS, 2019

■ Preparation of a highly stable drug carrier by efficient immobilization of human serum albumin (HSA) on drug-loaded magnetic iron oxide nanoparticles

Sadegh Salehzdeh, ندا حسین پور مقدم, جمشید رختشه, massoud saidijam, Hamid Tanzadehpanah, ashkan hosseinpour Moghadam  
INTERNATIONAL JOURNAL OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES, 2019

■ Significant geometry and charge difference between the E 5 4- bare clusters of group 14 Zintl anions and their coordinated form in  $[E_5 \{M(CO)_3\}_2]^{4-}$  (E = Si, Ge, Sn, Pb; M = Cr, Mo, W) complexes

Sadegh Salehzdeh, شیوا خداویسی, Yasin gholiee  
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, 2019

■ Cytotoxicity and antioxidant activity of Kamolonol acetate from *Ferula pseudalliacea*, and studying its interactions with calf thymus DNA (ct-DNA) and human serum albumin (HSA) by spectroscopic and molecular docking techniques

Sadegh Salehzdeh, ندا حسین پور مقدم, massoud saidijam, Dara Dastan, Hamid Tanzadehpanah, Hanie Mahaki, Osama Abou-Zied, Asrin Bahmani  
PROCESS BIOCHEMISTRY, 2019

■ Synthesis of 1-( $\alpha$ -aminoalkyl)-2-naphthol and  $\alpha$ -aminonitrile derivatives with molybdenum Schiff base complex covalently bonded on silica-coated magnetic nanoparticles and DNA interaction study of one type of derivatives using computational and spectroscopic methods

Sadegh Salehzdeh, ندا حسین پور مقدم, Behrooz Shaabani, Jamshid Rakhtshah  
BIOORGANIC CHEMISTRY, 2019

■ DNA binding and molecular docking studies of a new Cu(II) complex of isoxsuprine drug

Sadegh Salehzdeh, Sadegh Khazalpour, ندا حسین پور مقدم, Reza Golbedaghi, zahra baghaifar, فرشید حاجی بابایی, سمیرا شریفی نیا,  
POLYHEDRON, 2019

■ Formation of silicon carbide by laser ablation in graphene oxide-N-methyl-2-pyrrolidone suspension on silicon surface

Babak Jaleh, Sadegh Salehzdeh, فرحناز ملکی, سمانه قاسمی, Mohammad Javad Torkamany  
APPLIED SURFACE SCIENCE, 2018

■ Extension of the atom by atom scheme of counterpoise method and presentation of its new advantages

Sadegh Salehzdeh, فرحناز ملکی,  
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 2018

■ Comment on “A convenient method for preparation of 2-amino-4,6- diphenylnicotinonitrile using HBF<sub>4</sub> as an efficient catalyst via an anomeric based oxidation: A joint experimental and theoretical study” [J. Mol. Struct. 1137 (2017) 674-680]

فرحناز ملکی, Sadegh Salehzdeh,  
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, 2018

■ In vitro cytotoxicity and DNA/HSA interaction study of triamterene using molecular modelling and multi-spectroscopic methods

ندا حسین پور مقدم, Sadegh Salehzdeh, Sadegh Khazalpour, massoud saidijam, Hamid Tanzadehpanah, Jamshid Karimi  
JOURNAL OF BIOMOLECULAR STRUCTURE & DYNAMICS, 2018

■ Improving antiproliferative effect of the nevirapine on Hela cells by loading onto chitosan coated magnetic nanoparticles as a fully biocompatible nano drug carrier

جمشید رختشه, ندا حسین پور مقدم, سمیرا شریفی نیا, Sadegh Salehzdeh, Farshid Hajibabaei, Masoud saeidijam, Hamid Tanzadehpanah, ashkan hosseinpour Moghadam, Sara Soleimani Asl  
INTERNATIONAL JOURNAL OF BIOLOGICAL MACROMOLECULES, 2018

■ Pd/Pt metallacyclopropa[60]fullerene complexes bearing versatile phosphorous ylides ligands; a comprehensive multi-spectroscopic, electrochemistry, theoretical and catalytic studies

علی هاشمی, بنفشه مختاری, فرحناز ملکی, مزده سادات هاشمی, Davood Nematollahi, Sadegh Salehzdeh, Seyyed javad seyyadzadeh sabounchei,  
SPECTROCHIMICA ACTA PART A-MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY, 2018

■ Preparation, characterization and catalytic application of molybdenum Schiff-base complex immobilized on silica-coated Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> as a reusable catalyst for the synthesis of pyranopyrazole derivatives

جمشید رختشه, سیده عقیق همراهیان, Sadegh Salehzdeh, Farshid Hajibabaei, Niloofar Karami  
APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 2018

■ Copper Schiff base complex immobilized on silica-coated Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles: a recoverable and efficient catalyst for synthesis of polysubstituted pyrroles

جمشید رختشه, سیده محدثه موسوی داویدجانی, سیده عقیق همراهیان, Sadegh Salehzdeh,  
APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 2018

■ New Pd/Pt-[60]fullerene complexes of phosphorus ylides as anticancer agents: Cytotoxic investigation and DFT calculations

علی هاشمی, بنفشه مختاری, محسن صیادی, فرحناز ملکی, Davood Nematollahi, Sadegh Salehzdeh, Seyyed javad seyyadzadeh sabounchei, Leila Hosseinzadeh  
JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 2018

■ Synthesis, characterization and theoretical and fluorescence emission microscopy studies of new Pd/Pt-cyclopropa[60] fullerene complexes: Application of Taguchi method for optimization of parameters in Suzuki-Miyaura reaction

علی هاشمی, فرحناز ملکی, خدیجه بادپای, Sadegh Salehzdeh, Seyyed javad seyyadzadeh sabounchei, Leila Hosseinzadeh  
APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 2018

■ Phase equilibrium measurements and thermodynamic modelling of {water + phenol + [Hmim][NTf<sub>2</sub>]} ionic liquid system at several temperatures

مهدیه راضی اسرمی, Javad Saien, Sadegh Salehzdeh,  
JOURNAL OF CHEMICAL THERMODYNAMICS, 2018

■ Macrocyclic mononuclear Ni(II) and macrocyclic tetranuclear Cu(II) complexes: Dimerization of binuclear Cu(II) complexes with help of perchlorate anions

Reza Golbedaghi, Rui Fausto, Sadegh Salehzdeh,  
INORGANICA CHIMICA ACTA, 2018

■ Where and How Does an Organic Molecule Having a C-X Bond Release X- Anion Like an Inorganic Compound? A Theoretical Study

فرحناز ملکی, Sadegh Salehzdeh,

- The solvent-free synthesis of polysubstituted pyrroles by a reusable copper Schiff base complex immobilized on silica coated Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, and DNA binding study of one resulting derivative as a potential anticancer drug

Sadegh Salehzdeh, جمشید رختشه, Behrooz Shaabani  
APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 2018

- Binding Studies of Isoxsuprine Hydrochloride to Calf Thymus DNA Using Multispectroscopic and Molecular Docking Techniques

Sadegh Salehzdeh, Sadegh Khazalpour, ندا حسین پور مقدم, Reza Golbedaghi, سمیرا شریفی نیا, Farshid Hajibabaei  
JOURNAL OF FLUORESCENCE, 2018

- Molybdenum Schiff base complex supported on MNPs as an efficient and easily recyclable catalyst in threecomponent Strecker reaction for synthesis of  $\alpha$ -aminonitrile derivatives

Sadegh Salehzdeh, جمشید رختشه  
RESEARCH ON CHEMICAL INTERMEDIATES, 2017

- A multi-spectroscopic and molecular docking approach to investigate the interaction of antiviral drug oseltamivir with ct-DNA

Sadegh Salehzdeh, ندا حسین پور مقدم, Reza Golbedaghi, Nahid Shahabadi  
NUCLEOSIDES NUCLEOTIDES & NUCLEIC ACIDS, 2017

- Comments on "experimental and theoretical studies of the nanostructured {Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>@SiO<sub>2</sub>[(CH<sub>2</sub>)<sub>3</sub>Im]<sub>3</sub>C(CN)<sub>3</sub>} catalyst for 2-amino-3-cyanopyridine preparation: Via an anomeric based oxidation", RSC Adv., 2016, 6, 50100-50111, and "the first computational study for the oxidative aromatization of pyrazolines and 1,4-dihydropyridines using 1,2,4-triazolinediones: An anomeric-based oxidation", RSC Adv., 2016, 6, 102280-102291

Sadegh Salehzdeh  
RSC Advances, 2017

- [60]Fullerene-Based Pd(0) Complexes of Phosphorus Ylides as Efficient Nanocatalyst for Homo- and Heterogeneous Mizoroki–Heck Coupling Reactions

seyyed javad seyyadzadeh sabounchei, Sadegh Salehzdeh, مرجان حسین زاده, علی هاشمی, فرحناز ملکی  
CATALYSIS LETTERS, 2017

- Theoretical study on steric effects, electronic properties, preorganization and solvent effect in host–guest chemistry of hexaprotonated form of an azacyclophane and halide anions

Sadegh Salehzdeh, قلی نی یاسین  
Journal of the Iranian Chemical Society, 2017

- Mn(III)–pentadentate Schiff base complex supported on multiwalled carbon nanotubes as a green, mild and heterogeneous catalyst for the synthesis of tetrahydrobenzo[b]pyrans via tandem Knoevenagel–Michael cyclocondensation reaction

ma z, Sadegh Salehzdeh, سعید باقری, جمشید رختشه  
APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 2017

- Spectroscopic and molecular docking studies on the interaction of antiviral drug nevirapine with calf thymus DNA

Sadegh Salehzdeh, ندا حسین پور مقدم, Nahid Shahabadi  
NUCLEOSIDES NUCLEOTIDES & NUCLEIC ACIDS, 2017

- Mononuclear palladium(II) and platinum(II) complexes of P,C-donor ligands: synthesis, crystal structures, cytotoxicity, and mechanistic studies of a highly stereoselective Mizoroki–Heck reaction

seyyed javad seyyadzadeh sabounchei, Sadegh Salehzdeh, Robert W. Gable, مرجان حسین زاده, فرحناز ملکی  
Inorganic Chemistry Frontiers, 2017

- Synthesis, characterization and heterogeneous catalytic application of a nickel(II) Schiff base complex immobilized on MWCNTs for the Hantzsch four-component condensation

ma z, Sadegh Salehzdeh, سعید باقری, جمشید رختشه  
JOURNAL OF COORDINATION CHEMISTRY, 2017

■ Multi-wall carbon nanotube supported Co (II) Schiff base complex: an efficient and highly reusable catalyst for synthesis of 1-amidoalkyl-2-naphthol and tetrahydrobenzo[b]pyran derivatives

جمشید رختشه, Sadegh Salehzdeh

JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 2017

■ The significant effect of electron donating and electron withdrawing substituents on nature and strength of an intermolecular Se p interaction. A theoretical study

یزدان مقصود, مهشید صابری نسب, Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh

Computational and Theoretical Chemistry, 2016

■ Some metal complexes of three new potentially heptadentate (N4O3) tripodal Schiff base ligands; synthesis, characterization and X-ray crystal structure of a novel eight coordinate Gd(III) complex

Sadegh Salehzdeh, Reza Golbedaghi, Allan Blackman, somayeh moradi

JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, 2016

■ Theoretical studies on the nature and strength of an intermolecular non-covalent Te•••π interaction

مهشید صابری نسب, Sadegh Salehzdeh

MOLECULAR PHYSICS, 2016

■ P,C-Chelation versus P,P-coordination of unsymmetrical phosphorus ylides in palladacyclopropa[60]fullerene complexes; synthetic, spectroscopic, and theoretical studies

مرجان حسین زاده, علی هاشمی, فرحناز ملکی, Seyyed javad seyyadzadeh sabounchei, Sadegh Salehzdeh

DALTON TRANSACTIONS, 2016

■ The 4s and 3d subshells: Which one fills first in progressing through the periodic table and which one fills first in any particular atom?

فرحناز ملکی, Sadegh Salehzdeh

Foundations of Chemistry, 2016

■ The effect of a strong cation p interaction on a weak selenium p interaction: A theoretical study

مهشید صابری نسب, Mohammad Solimannejad, Sadegh Salehzdeh

Computational and Theoretical Chemistry, 2016

■ Synthesis of pyrazole derivatives in the presence of a dioxomolybdenum complex supported on silica-coated magnetite nanoparticles as an efficient and easily recyclable catalyst

احسان گودینی, جمشید رختشه, سعید باقری, فرحناز ملکی, ma z, Sadegh Salehzdeh

RSC Advances, 2016

■ New Equation for Calculating Total Interaction Energy in One Noncyclic ABC Triad and New Insights into Cooperativity of Noncovalent Bonds

فرحناز ملکی, Sadegh Salehzdeh

JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, 2016

■ Synthesis, characterization and theoretical study of a new asymmetrical tripodal amine containing morpholine moiety

Hassan Keypour, Majid Rezaeivala, Seik Weng Ng, Laura Valencia, Sadegh Salehzdeh

Arabian Journal of Chemistry, 2016

■ The DFT study of hydrogen bonding and thermodynamic parameters of (CH3OH)<sub>n</sub>(H2O)<sub>m</sub> (n, m = 1–8) clusters at different temperatures

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, Mahdi Rezaei-Sameti

Arabian Journal of Chemistry, 2016

■ Theoretical studies on structure, formation and nature of bond in a Disila-, Digerma- and distannacyclobutene ring

فاطمه امرایی, Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh

JOURNAL OF THEORETICAL & COMPUTATIONAL CHEMISTRY, 2016

■ Where, how and how much the strength of interaction between a hydrated lanthanide cation and a  $\pi$ -system would be increased? A theoretical study

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, لیلا ابراهیم خانی  
JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 2016

■ Synthesis, theoretical, and antibacterial approach in the characterization of 5-Methyl-5-(3-pyridyl)hydantoin ligand and its palladium and platinum complexes

Abdolkarim Chehregani Rad, seyed javad seyadzadeh sabounchei, Sadegh Salehzdeh, پریسا شهریاری, یاسین قلی نی  
COMPTEs RENDUS CHIMIE, 2015

■ Spectroscopic, theoretical, and antibacterial approach in the characterization of 5-methyl-5-(3-pyridyl)-2, 4-imidazolidedione ligand and of its platinum and palladium complexes

Abdolkarim Chehregani Rad, seyed javad seyadzadeh sabounchei, Sadegh Salehzdeh, پریسا شهریاری, یاسین قلی نی  
COMPTEs RENDUS CHIMIE, 2015

■ Platinum and palladium complexes with 5-methyl-5-(2-pyridyl)- 2,4-imidazolidedione: Synthesis, crystal and molecular structure, theoretical study, and pharmacological investigation

Abdolkarim Chehregani Rad, seyed javad seyadzadeh sabounchei, Sadegh Salehzdeh, پریسا شهریاری, hamidreza Khavasi  
INORGANICA CHIMICA ACTA, 2015

■ The effect of fullerene and some electron donating/withdrawing substituents on the molecular orbitals, strength and the nature of C@N bond in a number of RCH@NR0 imines: A theoretical study

Sadegh Salehzdeh, فرحناز ملکی  
Computational and Theoretical Chemistry, 2015

■ A theoretical study on the encapsulation of halide anions by hexaprotonated form of aliphatic azacryptand 1,4,8,11,14,18,23,27-octaazabicyclo[9.9.9]nonacosane in both the gas phase and solution

Sadegh Salehzdeh, قلی نی یاسین  
Computational and Theoretical Chemistry, 2015

■ Probing the effect of arm length and inter- and intramolecular interactions in the formation of Cu(II) complexes of Schiff base ligands derived from some unsymmetrical tripodal amines

Sadegh Salehzdeh, Hassan Keypour, فرحناز ملکی, مریم شایسته, Sebastien Dhers, Huseyin Unver, Nefise dilek  
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, 2015

■ Silica vanadic acid [SiO<sub>2</sub>-VO(OH)<sub>2</sub>] as an efficient heterogeneous catalyst for the synthesis of 1,2-dihydro-1-aryl-3H-naphth[1,2-e][1,3]oxazin-3-one and 2,4,6-triarylpyridine derivatives via anomeric based oxidation

ma z, Sadegh Salehzdeh, فرحناز ملکی, فاطمه افشارنادری, ندا بهرامی نژادصفا, Maliheh Safaiee  
RSC Advances, 2015

■ New chlorine bridged binuclear silver(I) complexes of bidentate phosphorus ylides: Synthesis, spectroscopy, theoretical and anti-bacterial studies

Mehdi Bayat, seyed javad seyadzadeh sabounchei, Sadegh Salehzdeh, Roya Karamian, hamidreza Khavasi, Mahbubeh Pourshahbaz, Mostafa Asadbeg  
POLYHEDRON, 2015

■ Ionic liquid 1-hexyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate, an efficient solvent for extraction of acetone from aqueous solutions

Sadegh Salehzdeh, Javad Saien, مهدی نوروزی, مرجان محمدی سراب بادیه  
JOURNAL OF CHEMICAL THERMODYNAMICS, 2015

■ Catalytic applications of {[HMIM]C(NO<sub>2</sub>)<sub>3</sub>}: as a nano ionic liquid for the synthesis of pyrazole derivatives under green conditions and a mechanistic investigation with a new approach

ma z, Sadegh Salehzdeh, فاطمه افشارنادری, سعید باقری, فرحناز ملکی  
RSC Advances, 2015

■ Comparison of the selectivity of [M(12-Crown-4)]<sup>p</sup> (M=Lip, Nap, Kp) complexes for halide anions and some neutral molecules; a computational study

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, Faranak Dastineh, Yazdan Maghsoud

■ Pd(II) and Pd(IV) complexes with 5-methyl-5-(4-pyridyl)hydantoin: Synthesis, physicochemical, theoretical, and pharmacological investigation

Abdolkarim Chehregani Rad, seyed javad seyyadzadeh sabounchei, Sadegh Salehzdeh, Davood Nematollahi, Amaneh Amani, Zohreh Afsartala, قلی ئی یاسین, Parisa Shahriary  
SPECTROCHIMICA ACTA PART A-MOLECULAR AND BIOMOLECULAR SPECTROSCOPY, 2015

■ Ab initio and DFT studies on the structures, binding energies and nature of bonds in X<sub>2</sub>Y<sub>3</sub> metal clusters (X<sub>p</sub>=Li<sub>p</sub>, Na<sub>p</sub> and K<sub>p</sub>; Y<sub>2i 3</sub>=Zn<sub>2i 3</sub>, Cd<sub>2i 3</sub> and Hg<sub>2i 3</sub>)

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, Hassan Keypour, Masoud Hatami  
JOURNAL OF THEORETICAL & COMPUTATIONAL CHEMISTRY, 2015

■ MP2 and DFT studies on interaction of a halide anion with the fully protonated form of 1,4,7-triazacyclononane

Sadegh Salehzdeh, قلی ئی یاسین  
JOURNAL OF THEORETICAL & COMPUTATIONAL CHEMISTRY, 2015

■ What causes the weakest host to act as the strongest one? A theoretical study on the host-guest chemistry of five azacryptands and fluoride anions

Sadegh Salehzdeh, قلی ئی یاسین  
DALTON TRANSACTIONS, 2015

■ Regioselective Diels-Alder reaction of 2-phosphaindolizine with some 1,3-butadiene derivatives (RCHCHCHCH<sub>2</sub>, R = F, Cl, CH<sub>3</sub> and SiH<sub>3</sub>): A theoretical study

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, Fereshteh Yaghoobi, یاسین قلی ئی, سمانه حکمی  
JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 2014

■ The significant role of the solvent in high selectivity of symmetrical calix[4]tubes for potassium ion in solution: A DFT study

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, یاسین قلی ئی  
Computational and Theoretical Chemistry, 2014

■ Theoretical studies on the interaction of some endohedral fullerenes {[X@C-60](-)} (X = F-, Cl-, Br-) or [M@C-60] (M = Li, Na, K) with [Al(H<sub>2</sub>O)(6)](3+) and [Mg(H<sub>2</sub>O)(6)](2+) cations

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, Fereshteh Yaghoobi  
Computational and Theoretical Chemistry, 2014

■ Gold(III) complexes of 5-methyl-5-(pyridyl)-2,4-imidazolidinedione: Synthesis, physicochemical, theoretical, antibacterial, and cytotoxicity investigation

Abdolkarim Chehregani Rad, seyed javad seyyadzadeh sabounchei, Sadegh Salehzdeh, Davood Nematollahi, Amaneh Amani, قلی ئی یاسین, پریسا شهریاری  
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY, 2014

■ Synthesis and structure of [Hg<sub>2</sub>(L)<sub>2</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] (L = 5-(4-nitrophenyl)pyridin-2-ylmethylamine); a theoretical study on Hg-Hg bond in this and in linear Hg<sub>2</sub>X<sub>2</sub> (X = F, Cl, Br, I, Ph) complexes

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, مهدی خلیج, Saeid Dehghanpour  
Journal of the Iranian Chemical Society, 2014

■ Synthesis and structure of [Hg-2(L)(2)(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] (L = (4-nitrophenyl)pyridin-2-ylmethylamine); a theoretical study on Hg-Hg bond in this and in linear Hg<sub>2</sub>X<sub>2</sub> (X = F, Cl, Br, I, Ph) complexes

Mehdi Bayat, Sadegh Salehzdeh, مهدی خلیج, Saeid Dehghanpour  
Journal of the Iranian Chemical Society, 2014

■ Synthesis, characterization and crystal structure of some new Mn(II) and Zn(II) macrocyclic Schiff base complexes derived from two new asymmetrical (N-5) branched amines and pyridine-2-carbaldehyde or O-vaniline and their antibacterial properties

Sadegh Salehzdeh, Hassan Keypour, Majid Rezaeivala, Reza Latifi, Firoozeh chalabian, Fatemeh Katouzian  
Journal of the Iranian Chemical Society, 2014



■ Synthesis and characterisation of Hg(II) complexes including bidentate phosphorus ylides

Mehdi Bayat, seyed javad seyadzadeh sabounchei, Sadegh Salehzdeh, Roya Karamian, Davood Nematollahi, Sepideh Samiee, Mahbubeh Pourshahbaz, Mostafa Asadbeg  
JOURNAL OF CHEMICAL RESEARCH, 2014

■ Mn(II) complexes of three [2 + 2] macrocyclic Schiff base ligands. Synthesis and X-ray crystal structure of the first binuclear–di(binuclear) cocrystal

Sadegh Salehzdeh, Hamid Reza Khavasi, Reza Golbedaghi, Allan Blackman  
POLYHEDRON, 2014

■ سنتز، شناسایی و مطالعات تئوری تعدادی از کمپلکسهای بزرگ حلقه‌ی باز شیف منگنز (، روی) (و کادمیم) (حاوی ۲-هیدروکسی-۵-متیل ایزو فتالدهید)

صادق صالح زاده، حسن کی پور، محمدحسن زبرجدیان، مجید رضایی وال  
شیمی کاربردی، ۱۳۹۶

مقالات علمی ارائه شده در همایش‌ها

■ Cooperativity of chemical bonds or bonding interactions in metal complexes or inorganic triads

صادق صالح زاده

بیست و یکمین سمینار شیمی معدنی ایران ۱۳۹۸

■ Study on cooperativity of bonds in  $\text{NH}_3 \dots \text{H}_2\text{O} - \text{M}^{2+}$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Rb}^+$ ,  $\text{Cs}^+$  and  $\text{Sr}^{2+}$  triads having metal cation and hydrogen bond

صادق صالح زاده، مانده قارلقی

بیست و یکمین سمینار شیمی معدنی ایران ۱۳۹۸

■ Study on cooperativity of metal–OH<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O...H<sub>2</sub>O bonds in H<sub>2</sub>O M (M= Li<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Rb<sup>+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, Sr<sup>2+</sup>, Ba<sup>2+</sup> and La<sup>3+</sup>) systems

صادق صالح زاده، مانده قارلقی

بیست و یکمین سمینار شیمی معدنی ایران ۱۳۹۸

■ Synthesis, characterization and theoretical studies of two mononuclear Ag(I) and Pd(II) complexes of apyridiniumylide

سیدجواد سیدزاده صابونچی، صادق صالح زاده، سمانه صانعی موفق

بیست و یکمین سمینار شیمی معدنی ایران ۱۳۹۸

■ Synthesis, characterization and theoretical studies of three binuclear Hg(II) complexes of a new pyridiniumylide

سیدجواد سیدزاده صابونچی، صادق صالح زاده، سمانه صانعی موفق

بیست و یکمین سمینار شیمی معدنی ایران ۱۳۹۸

■ A computational study on interaction of antitumor agent  $[\text{Pd}\{(\text{C}_5\text{H}_4\text{N})_2\text{CH}(\nu\text{-C}_5\text{H}_4\text{NS})\}_2\text{Cl}_2]$  with guanine; EDA–NOCV and NBO analysis

صادق صالح زاده، قلی ئی یاسین

نوزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

Nature of metal–ligand bond in some derivatives of  $[(\text{NHC}(\text{R}))_4\text{Re}(\text{O})(\text{Y})]$  complexes ( $\text{Y} = \text{OMe}, \text{Cl}; \text{R} = \text{H}, \blacksquare$   
 $\text{CH}_3, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ ): A Theoretical Study

مهدی بیات، صادق صالح زاده، سمیرا شریفی نیا  
نوزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

Synthesis and characterization of chitosan coated iron oxide magnetic nanoparticles for controlled  $\blacksquare$   
delivery of nevirapine in biomedical applications

صادق صالح زاده، جمشید رختشه، ندا حسین پور مقدم  
نوزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

Interaction of cis–platin and its four analogues with guanine: a theoretical study  $\blacksquare$

صادق صالح زاده، قلی ئی یاسین  
نوزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

Nature of Metal–ligand Bond in some derivatives of  $[(\text{NHC}(\text{R}))_4\text{Re}(\text{N})(\text{Y})]$  complexes: ( $\text{Y} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}; \text{R} = \text{H}, \blacksquare$   
 $\text{CH}_3, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ ): A Theoretical Study

مهدی بیات، صادق صالح زاده، سیده عقیق همراهیان  
بیستمین سمینار شیمی فیزیک ایران

Synthesis of substituted pyrrole derivatives in solvent free media with molybdenum complex  $\blacksquare$   
supported on magnetic nanoparticles as recyclable catalyst

صادق صالح زاده، جمشید رختشه، سیده عقیق همراهیان  
بیست و چهارمین سمینار شیمی آلی ایران

Affinity, hole–size fitting, preorganization and solvent role in host–guest complexation  $\blacksquare$

صادق صالح زاده  
هفدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

Synthesis and characterization of some potentially pentadentate ligands containing azo group  $\blacksquare$

صادق صالح زاده، فاطمه ایمانی  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

Synthesis, characterization and crystal structure of a complex formed between two  $18\text{-crown-}6$   $\blacksquare$   
molecules and a fully protonated symmetric triamine

صادق صالح زاده، مسعود همایون زاده  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

Nature of Bond in Disilyla–, Digerma–, Distanna–and diplumbacyclobutenes: AIM and NBO Analysis  $\blacksquare$

مهدی بیات، صادق صالح زاده، فاطمه امرایی  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

Solvent effect on high selectivity of symmetrical calix $[\blacksquare]$ tubes for potassium ion A DFT Study  $\blacksquare$

مهدی بیات، صادق صالح زاده، یاسین قلی ئی

- Computational studies on interaction between the Tellurium atom and the  $\pi$ -systems: comparison of ■  
MP<sub>2</sub> with three DFT methods  
صادق صالح زاده، مهشید صابری نسب  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران
- Nature of Bond in Disilyla-, Digerma-, Distanna- and diplumbacyclobutenes: AIM and NBO Analysis ■  
مهدی بیات، صادق صالح زاده، فاطمه امرایی  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران
- The effect of electron donating and electron withdrawing groups on interaction of R<sub>2</sub>Te molecules and ■  
 $\pi$ -system of benzene  
صادق صالح زاده، مهشید صابری نسب  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران
- Synthesis and characterization of some potentially decadentate ligands containing azo group ■  
صادق صالح زاده، مرضیه سروری ایزد  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران
- A theoretical study on noncovalent interactions in the complexes of fullerene (C<sub>60</sub>) with ■  
calix[5]arenes: Comparison of MP<sub>2</sub> with several DFT functionals  
مهدی بیات، صادق صالح زاده، یاسین قلی ئی  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران
- Theoretical studies on the nature of interaction between the [La(H<sub>2</sub>O)<sub>9</sub>]<sup>3+</sup> with fullerene and some ■  
aromatic rings  
مهدی بیات، صادق صالح زاده، لیلا ابراهیم خانی  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران
- Synthesis, characterization and crystal structure of a 2:1 complex between 18-crown-6 and a fully ■  
protonated asymmetric triamine  
صادق صالح زاده، مسعود همایون زاده  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران
- A Comparison between the Stability and Interaction Energy of 5 and/or 6-membered-ring chelates ■  
in some of Bis (N-Heterocyclic Carbenes) Complexes. A Theoretical Study  
مهدی بیات، صادق صالح زاده، نگین احمدیان  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران
- Theoretical studies on the interaction between the [Lu(H<sub>2</sub>O)<sub>9</sub>]<sup>3+</sup> ion with some derivative of benzene ■  
مهدی بیات، صادق صالح زاده، لیلا ابراهیم خانی  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

A theoretical study on noncovalent interactions in the complexes of fullerene (C<sub>60</sub>) with ■  
calix[5]arenes: Comparison of MP<sub>2</sub> with several DFT functionals

مهدی بیات، صادق صالح زاده، قلی ئی یاسین  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

Nature of C–E (E=Si, Ge, Sn, Pb) Bond in some Bis(N–Heterocyclic Carbenes) Complexes. AIM and NBO ■  
Analysis

مهدی بیات، صادق صالح زاده، نگین احمدیان  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

Halide anion recognition by a dicopper(II) cryptate; A DFT study ■

صادق صالح زاده، جمشید رختشه، قلی ئی یاسین  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

A theoretical study on encapsulation of halide anions within the cavity of hexaprotonated aliphatic ■  
azacryptand 1,4,8,11,14,18,23,27-octaazabicyclo[9.9.9]nonacosane in the gas phase and solution

صادق صالح زاده، جمشید رختشه، قلی ئی یاسین  
شانزدهمین کنفرانس شیمی معدنی ایران

پایان نامه ها و رساله های دکتری

■ مطالعات تئوری بر روی ماهیت پیوند فلز-لیگاند در تعدادی از کمپلکس های دارویی مشتقات N-هتروسیکلیک کاربن ها و مقایسه با تعدادی  
از کمپلکس های فسفین ها

۱۴۰۰

■ یک مطالعه جامع تئوری بر روی ساختار، ماهیت پیوند و خواص طیف سنجی برخی کمپلکس های فلزی حاوی لیگاند پنتا(ارگانو)[6۰] فولرن

۱۴۰۰

■ فعال سازی پیش کاتالیزور و مطالعات مکانیسمی برخی واکنش های جفت شدن متقابل کربن-کربن کاتالیز با کمپلکس های N-هتروسیکلیک  
کاربن

۱۳۹۹

■ سنتز و شناسایی لیگاندهای بزرگ غیر حلقه ای مشتق شده از آلدئیدهای مختلف با پلی آمین های حاوی پی پیرازین یا همو پی پیرازین و نیز  
کمپلکس- های مربوطه آن ها با تعدادی از یون های فلزات واسطه

۱۳۹۸

■ سنتز و شناسایی برخی از نانو ذرات فلزی پوشیده شده با چیتوسان و آلبومین سرم انسان (HSA) برای بارگیری بعضی از داروهای شناخته  
شده و مطالعه مقایسه ای کاربردهای بیولوژیکی و/یا برهمکنش آنها و داروهای خالص مربوطه با یک DNA مشخص با استفاده از روشهای  
اسپکتروسکوپی و شبیه سازی مولکولی

۱۳۹۷

■ مطالعات تئوری بر روی اثر یک پیوند بر روی قدرت یا ماهیت پیوند دیگر در یک سیستم کمپلکس یا چند جزئی

■ عنوان: سنتز و شناسایی کمپلکس های کبالت(II)، منگنز(III)، نیکل(II) و مولیبدن(VI) با بازهای شیف دو، چهار و پنج دندانه غیر متحرک بر روی نانولوله های کربنی و نانوذرات فلزی و همچنین کاربرد کاتالیستی آنها در واکنش های آلی  
۱۳۹۵

■ مطالعه تئوری بر روی برهمکنش های بین مولکولی غیر کووالانسی کلکوژن ها  
۱۳۹۵

■ سنتز و شناسایی ایلیدهای جدید گوگرددار و فسفردار و کمپلکس های مربوطه با برخی فلزات واسطه و فولرن C<sub>60</sub> و مطالعه خواص کاتالیستی آنها  
۱۳۹۵

■ مطالعات تئوری بر روی برهمکنش برخی یون های یک- و چند اتمی و مولکول های نانو اندازه به عنوان میهمان با تعدادی از پلی آرا سیکلو آلکان ها، آرا کریپتندها و کالیکس آرن ها به عنوان میزبان  
۱۳۹۴

■ سنتز و شناسایی تعدادی از ایلیدهای دواملی فسفردار و کاربرد کمپلکس های فلزی آن ها در واکنش های کوپل شدن کربن-کربن  
۱۳۹۳

■ سنتز و شناسایی تعدادی از کمپلکس های فلزی بزرگ حلقوی و بزرگ غیر حلقوی بیس ایمین مشتق شده از پلی آمین های حاوی حلقه های بنزنی و پی پیرازینی و مشتقات مربوطه  
۱۳۹۳

■ مطالعه تئوری برهمکنش تعدادی از اتم های فلزی، یون های فلزی و یون های هیدراته فلزی با مولکول های فولرن و برخی سیستم های دیگر  
۱۳۹۲

■ سنتز و شناسایی کمپلکس های فلزی تعدادی از بازهای شیف لیگاندهای تتراآمین و مشتقات آنیلین  
۱۳۹۲

■ سنتز و شناسایی تعدادی از کمپلکس های فلزی ایلیدهای سولفور به روش های اسپکتروسکوپی و کریستالوگرافی اشعه- X و مطالعه خواص ضد باکتریال آنها  
۱۳۹۲

■ سنتز و شناسایی طیف بینی و تعیین ساختار بلور تعدادی از ایلیدهای فسفردار متقارن و نامتقارن جدید و کمپلکس های Hg(II) و Pd(II) آنها  
۱۳۹۲

پایان نامه های کارشناسی ارشد

■ سنتز و شناسایی تعدادی از کمپلکس های فلزی داروی سوتالول و مطالعه برهمکنش آنها با DNA تیموس گوساله  
۱۴۰۲

■ سنتز و شناسایی کمپلکس های فسفرسانسی جدید بر پایه ای امیدازول و کاربرد آنها در سلول های الکتروشیمیایی نورگسیل

■ مطالعه تئوری پروتونه شدن کامل و همچنین کاتیون فلزخواهی ( $+Zn^{2+}$  و  $+Na^{+}$ ,  $K^{+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ ) آذنین در فازهای گاز و

محلول

۱۴۰۲

■ بعنوان: مقایسه ساختار، ماهیت پیوند، شدت فلورسانس و خواص بیولوژیکی کمپلکس های  $Cu(I)$  و  $Ag(I)$  یک لیگاند شناخته شده بازشیف چهاردندانه مشتق از تریس(۲-آمینواتیل)آمین و شکل احیاء شده ی آن

۱۴۰۱

■ مطالعه ی نحوه و قدرت برهم کنش DNA با تیامین و تعدادی از کمپلکس های فلزی آن

۱۴۰۱

■ مطالعات تئوری بر روی پیوند مشتقی از آمینو اسید سیستئین با فلز در کمپلکس های  $\pi$ -هتروسیسکلیک کاربن

۱۴۰۱

■ مطالعه ی مکانیسم تشکیل بی فنیل های دی یددار و متا-ترفنیل های یددار از طریق واکنش های جفت شدن سوزوکی-میورا فضاگزی در حضور تتراکیس(تری فنیل فسفین)پالادیوم(۰) به عنوان کاتالیست

۱۴۰۱

■ مطالعه تئوری همیاری/ضدهمیاری پیوند فلز-کربونیل و فلز-دی هیدروژن در برخی از کمپلکس های گروه ۶ فلزات انتقالی

۱۴۰۱

■ مطالعه ی نظری بر روی پروتون خواهی و کاتیون فلزخواهی ( $+Zn^{2+}$  و  $+Na^{+}$ ,  $K^{+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ ) سه مشتق پورین: مرکاپتوپورین، تنوفیلین و زانتین

۱۴۰۰

■ مطالعه ی نظری بر روی پروتون خواهی و کاتیون فلزخواهی ( $+Zn^{2+}$  و  $+Na^{+}$ ,  $K^{+}$ ,  $Mg^{2+}$ ,  $Ca^{2+}$ ,  $Fe^{2+}$ ) ترییدین و تریامترن

۱۴۰۰

■ مطالعه تئوری اثر همیاری بین بر همکنش های  $\pi$ -Te... $\pi$  و  $\pi$ -کاتیون در سیستم های  $\{M=Li^{+}-Cs^{+}, Be^{2+}-\}$  ( $M...C_6H_6...R_2Te$ )  
Ba<sup>2+</sup>, Cu<sup>+</sup>, Ag<sup>+</sup>, Au<sup>+</sup>, Zn<sup>2+</sup>; R=H, CH<sub>3</sub>, F

۱۳۹۹

■ آیا همبستگی خطی بین داده های تجربی ( $IC_{50}$ ) با انرژی برهمکنش در تعدادی از کمپلکس های دارویی N-هتروسیسکلیک کاربن های  $Pd(II)$  و  $Pt(II)$  وجود دارد؟

۱۳۹۹

■ مطالعه ی کوپریتیویته پیوندها در چندین سیستم سه جزئی ABC و ABB دارای کاتیون فلزی و پیوند هیدروژنی

۱۳۹۸

■ مطالعات تئوری بر روی تعدادی از کمپلکس های فلزی خثی و آنیونی بیس-دی تیولن  $[M(SrC_2R_2)_2]_n$  ( $n=0, -1, -2$ ;  $M = Ni(II)$ ),  
(Pd(II), Pt(II)); R=CN, H, CH<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>, Ph

۱۳۹۸

■ مطالعه برهم کنش داروی کارودیلول و کمپلکس های Co(II)، Cu(II) و Zn(II) آن با DNA تیموس گوساله به روش های مختلف اسپکتروسکوپی و الکتروشیمیایی.

۱۳۹۸

■ برهمکنش  $[(Cp(CO)_2M \equiv E]^+$  با N-هتروسیکلیک کاربن در کمپلکس های  $[E=Si, Ge, Sn, Pb;]$   $Cp(CO)_2M \equiv E \leftarrow NHC(R)]^+$  ( $M=Cr, Mo, W; R=H, F, Cl, Br, CH_3, Ph, dipp, Si(CH_3)_3$ )

۱۳۹۸

■ برهم کنش  $[Cp(CO)_2M \equiv E]^+$  با N-هتروسیکلیک کاربن در کمپلکس های  $[E=Si, Ge, Sn, Pb;]$   $Cp(CO)_2M \equiv E \leftarrow NHC(R)]^+$ .  $M=Cr, Mo, W; R=H, F, Cl, Br, CH_3, Ph, dipp, Si(CH_3)_3$  یک مطالعه تئوری

۱۳۹۸

■ مطالعه تئوری ساختار، پایداری، و ماهیت پیوند در نانو کلاسترهای  $[M@E_{12}]^{2-}$  ( $M=Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Pd, Pt$ ;  $E=Si, Ge, Sn, Pb$ ).

۱۳۹۷

■ مطالعات مقایسه ای برهم کنش DNA با داروهای آمیقام پیریدین و پروپرانولول و کمپلکس های مربوطه با استفاده از روش های دستگاهی، اسپکتروسکوپی و شبیه سازی مولکولی

۱۳۹۶

■ سنتز و شناسایی کمپلکس های باز شیف مس (II) و مولیبدن (VI) تثبیت شده بر روی سطح نانوذرات مغناطیسی آهن و کاربرد آنها به عنوان نانوکاتالیزگرهای ناهمگن به ترتیب در واکنش های تراکم چند جزئی برای سنتز مشتقات پیرول و پیرانوپیرازول

۱۳۹۶

■ سنتز و شناسایی تعدادی از لیگاند های بالقوه چهار دندانه حاوی گروه آرو و مطالعه تجربی و تئوری واکنش آن ها با برخی از یون های فلزی

۱۳۹۵

■ N-هتروسیکلیک کاربن پایدارکننده کمپلکس  $M(di-\mu-R)Y(R)_n$  در ترکیبات  $[M=Li, Na, K; Y=]$   $NHC(R^1)(M(di-\mu-R)Y(R)_n)$  ( $Zn, Cd, Ga, In; R=H, CH_3, t-Butyl, Si(CH_3)_3, C_6H_5; R^1=H, CH_3, Di-isopropylphenyl, n=1, 2$ ; مطالعه تئوری

۱۳۹۵

■ مطالعات تئوری بر روی برهمکنش پیوندی بین تعدادی از لیگاندهای تک دندانه با دهندگی نیتروژن با کمپلکس های پالادیوم (II) و پلاتین (II) و مقایسه آن با لیگاندهای NHC (N-هتروسیکلیک کاربن)

۱۳۹۵

■ مطالعات تئوری بر روی پایداری، تشکیل کمپلکس و دایمر شدن آنالوگ های سنگین متیلن،  $GeX_2, SnX_2, PbX_2$ ،  $(X=CH_3, H, F, Cl, Br)$  در میان فضای کئوردیناسیون یک فلز انتقالی

۱۳۹۴

■ سنتز و شناسایی برخی کمپلکس های لیگاندهای حاوی گروه آرو و اتم های دهنده O، N و S

۱۳۹۴

■ مطالعات تئوری بر روی حلقه های چهارعضوی  $(E_2M_2)$  ( $E=B, Al, Ga, In, Tl; M=N, P, As, Sb, Bi$ ) با در نظر گرفتن استخلاف های مختلف

■ مطالعه تئوری بر روی حلقه های پنج عضوی اتم های سنگین تر عناصر گروه ۱۴

۱۳۹۴

■ مطالعات تئوری بر روی برهم کنش های  $1+1$  و  $1+2$  در برخی از N-هتروسیکلیک کاربن ها و متالوسن های عناصر سنگین گروه (Ba,  $Ca$ )  
Sr,

۱۳۹۴

■ پیشنویس پایان نامه ثبت شده در ۱۳۹۴/۰۳/۲۶ ۱۱:۰۱:۰۶ ق.ظ

۱۳۹۳

■ سنتز و شناسایی تعدادی از کمپلکس های ۱۸-کرون-۶ با برخی از آمین های پروتونه شده

۱۳۹۳

■ سنتز و شناسایی تعدادی از لیگاندهای بالقوه پنج دندانه و شش دندانه حاوی گروه آزو و بررسی واکنش آن ها با برخی از یون های فلزی

۱۳۹۳

■ مطالعات تئوری بر روی برهمکنش های تعدادی از یونهای هیدراته لاتتانیوم با برخی حلقه های آروماتیکی

۱۳۹۳

■ مطالعات تئوری بر روی ساختار، پایداری، ماهیت پیوند و تشکیل کمپلکس های دی سیلیلا، دی ژرما، دی استانا و دی پلمبا سیکلو بوتن

۱۳۹۳

■ مطالعات تئوری بر روی ساختار، پایداری و خصلت پیوند (C-E(E=Si, Ge, Sn, Pb) در برخی کمپلکس های بیس (N هتروسیکلیک کاربن ها)

۱۳۹۳

■ مطالعات تئوری بر روی برهمکنش ۱۸-کرون-۶ و یکی از مشتقات آن با چند آمین پروتونه شده و کاتیون فلزی در هر دو فاز گاز و مایع

۱۳۹۲

■ مطالعات تئوری بر روی کمپلکس های (La(III) و (Fe(III), Ge(III), In(III), Ti(III) تعدادی از لیگاندهای باز شیفت بالقوه هفت دندانه )

(N<sub>4</sub>O<sub>3</sub>)

۱۳۹۲