باسمه تعالی

تاریخ: ۱۴۰۳/۷/۱۲

خلاصه فعالیت‌های علمی (رزومه) آقای محمد حسین کوثری

عضو هیأت علمی (دانشیار) رسمی قطعی گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی
و پژوهشکده تغییر اقلیم و گرمایش زمین
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

۱- مشخصات فردی و معرفی مختصر

نام خانوادگی: **کوثری** نام: **محمد حسین** تاریخ تولد: **۱۶ / ۳ /۱۳۵۷** نام پدر: **ذبیح اله**

محل تولد: **استان فارس - شهرستان اقلید** وضعیت تاهل: **متاهل - دارای یک فرزند**

محل کار: **دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، دانشکده شیمی**

تلفن همراه: **۰۹۱۳۱۲۹۵۵۹۸** تلفن محل کار: **۰۲۴۳۳۱۵۲۲۵۸**

آدرس پست الکترونیکی: **mohammad.kowsari@gmail.com & mhkowsari@iasbs.ac.ir**

M. H. Kowsari Google Scholar: Citations: 806, h-index: 14, i10-index: 17 (3 October 2024)

Research group homepage: https://iasbs.ac.ir/~mhkowsari/index.html.

اینجانب محمد حسین کوثری در سال ۱۳۵۷ در خانواده‌ای فرهنگی در شهرستان اقلید (استان فارس) متولد شدم. پس از گذراندن تحصیلات در مقطع دبیرستان، همزمان با اخذ دیپلم تجربی در سال ۱۳۷۵، در رشته شیمی محض دانشگاه اصفهان پذیرفته شدم. در تیر ماه سال ۱۳۷۹ موفق به اخذ مدرک کارشناسی شیمی محض از دانشگاه اصفهان شدم و در همان سال در دوره کارشناسی ارشد شیمی فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان پذیرفته شدم. در سال ۱۳۸۰ به عضویت دفتر استعدادهای درخشان دانشگاه صنعتی درآمدم و به خاطر کسب رتبه ممتاز در دوره کارشناسی ارشد، از سوی مرکز تحصیلات تکمیلی دانشگاه صنعتی اصفهان تشویق و موفق به کسب بورس تحصیلی شدم. در تیر ماه ۱۳۸۱ مدرک کارشناسی ارشد را اخذ نمودم و پس از آن به مدت دو سال در سمت دبیر شیمی به تدریس شیمی در دبیرستان‌های شهرستان خرمبید استان فارس مشغول شدم. در این دو سال (۸۳-۸۱)، در دانشگاه پیام نور مرکز آباده نیز به عنوان مدرس مدعو به تدریس دروس شیمی عمومی یک و دو پرداختم. در مهر ماه ۱۳۸۳ در مقطع دکترای شیمی فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان پذیرفته شدم و در تاریخ ۱۳۸۸/۷/۲۹ از رساله دکترای خود در زمینه شبیه سازی دینامیک مولکولی مایعات یونی با کسب درجه عالی دفاع نمودم. سپس تا مهر ماه ۱۳۸۹ به مدت یکسال در مرکز خدمات محاسبات پیشرفته دانشگاه صنعتی اصفهان به انجام فعالیت‌های تحقیقاتی تحت عنوان محقق پسا دکترا مشغول شدم. در مهر ۱۳۸۹ جهت تصدی شغل هیأت علمی به زنجان منتقل و تا اسفند ۱۳۸۹ با عنوان محقق پسا دکترا و از اسفند ماه ۱۳۸۹ تا بهمن ۱۳۹۶ با عنوان استادیار و پس از آن تا به حال با عنوان دانشیار، فعالیت خود را در کادر هیأت علمی دانشکده شیمی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان ادامه داده‌ام. از سال ۱۳۹۱ تاکنون همچنین به عنوان عضو پیوسته انجمن شیمی ایران و عضو هیأت علمی در پژوهشکده تغییر اقلیم و گرمایش زمین دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان به فعالیت پژوهشی پرداخته‌ام. برای ۱۱ سال به عنوان نماینده و مدیر گروه شیمی فیزیک دانشگاه فعالیت علمی-اجرایی داشته‌ام. در فاصله آذر ۱۳۹۲ تا آذر ۱۳۹۴ نیز به مدت ۲ سال در سمت مدیر امور آموزشی و تحصیلات تکمیلی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان به انجام فعالیت اجرایی مشغول بودم. از دیگر فعالیت‌های دانشگاهی می‌توان به عضویت در کمسیون موارد خاص استانی از ابتدای آذر ۱۳۹۲ به مدت ۲ سال، عضویت در کارگروه نظارت بر دانشگاه آزاد و موسسات غیر انتفاعی دفتر نظارت و ارزیابی استان زنجان از مهر ۱۳۹۴ به مدت ۲ سال و عضویت در شورای کامپیوتر دانشگاه از دی ۱۳۹۵ تاکنون اشاره نمود.

- خلاصه‌ای از فعالیت‌ها و افتخارات تحصیلی و شغلی

۱- عضو **دفتر استعدادهای درخشان** دانشگاه صنعتی اصفهان و اعطای بورس (کمک هزینه) تحصیلی در سال تحصیلی ۸۰-۸۱ به خاطر کسب **رتبه ممتاز** در دوره کارشناسی ارشد و دفاع از رساله دکترا در سال ۱۳۸۸ با درجه **عالی**

۲- چاپ مقالات با موضوع شبیه سازی دینامیک مولکولی مایعات یونی، شبیه سازی گازهای میهمان در نانوحفره‌های زئولیت و سیال محدود شده در فضای نانومتری در مجلات معتبر (بیش از ۸۰ درصد مقالات با ضریب کیفیت Q1) نظیر:

The Journal of Chemical Physics	The Journal of Physical Chemistry B
Physical Chemistry Chemical Physics	The Journal of Physical Chemistry C
Microporous and Mesoporous Materials	Journal of Chemical & Engineering Data

۳- انجام دوره پژوهشی یکساله **پسا دکترا** در مرکز محاسبات پیشرفته دانشگاه صنعتی اصفهان به همراه کسب تجربیات مفید در زمینه کار با نرم افزارهای متنوع شیمی محاسباتی و **ایجاد بانک اطلاعاتی** اینترنتی برای تسهیل استفاده کاربران از هر نرم افزار

۴- مهارت در کار با سیستم عامل **لینوکس**، آشنایی با **کلاسترهای** رایانه‌ای، عضو گروه پژوهشی شیمی محاسباتی مرکز محاسبات پیشرفته دانشگاه صنعتی اصفهان و عضو انجمن شیمی ایران

۵- چاپ **۲۳** مقاله ISI، ۲ مقاله علمی-پژوهشی به فارسی، ۵۵ مقاله و خلاصه مقاله در سمینارها و کنفرانس‌های ملی- بین-المللی با موضوع شیمی محاسباتی و شبیه سازی دینامیک مولکولی (ارائه **۱۶** سخنرانی و **۳۹** پوستر) و شرکت کننده در کارگاه‌های آموزشی تخصصی متعدد

۶- راهنمایی ۲۰ پایان نامه کارشناسی ارشد و ۲ رساله دکتری، استاد مشاور ۲ رساله دکتری و هم اکنون، استاد راهنمای ۳ رساله دکتری در حال انجام؛ همزمان با دوران دانشجویی دکتری نیز: کمک و مشاوره چندین پایان نامه ک. ارشد و دکتری

۷- سابقه آموزشی **تدریس در مقاطع مختلف**: ۸ سال دبیر دبیرستان، ۲ سال مدرس شیمی عمومی دوره کارشناسی، ۱۳ سال استاد بیش از ۱۰ عنوان درس در مقطع تحصیلات تکمیلی رشته‌ی شیمی فیزیک، نانوشیمی و بیوتکنولوژی و نانوفناوری پزشکی

۸- سابقه حضور در دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان از مهرماه ۱۳۸۹ در سمت محقق **پسا دکترا** و از ابتدای سال ۹۰ تا بهمن ۹۶ به عنوان **استادیار** و از بهمن ۹۶ تاکنون به عنوان **دانشیار** دانشکده شیمی که با کسب تجربیات آموزشی- پژوهشی- اجرایی همراه بوده است. از سال ۹۱ تاکنون عضو پژوهشکده تغییر اقلیم و گرمایش زمین دانشگاه (زیرشاخه اتمسفر و گازهای گلخانه‌ای) و از اواخر آبان ۹۲ به مدت ۲ سال همکاری به عنوان مدیر امور آموزشی و تحصیلات تکمیلی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، ۱۱ سال نیز نماینده گروه شیمی فیزیک در دانشکده

۹- همکاری علمی-پژوهشی با گروه‌های تحقیقاتی در **داخل** کشور (سابقه مشاوره رساله دکتری و راهنمایی دانشجوی کارشناسی ارشد مشترک در دانشگاه صنعتی اصفهان، مشاوره یک رساله دکتری مهندسی شیمی در دانشگاه شهید باهنر کرمان و تدریس درس مدل‌سازی در مقیاس نانو در دانشگاه علوم پزشکی زنجان) و همکاری با محققان **خارج** از کشور (دکتر سامان علوی ارزیاب ارشد مواد نفتی در بهداشت کانادا، استاد همبسته شیمی دانشگاه برتیش کلمبیا و دانشگاه آتاوا، کانادا؛ پروفسور ایلیا، روسیه، NNSTU)

۲- سوابق تحصیلی

مقطع تحصیلی	رشته تحصیلی	گرایش	محل اخذ مدرک تحصیلی	سال اخذ مدرک
دیپلم	علوم تجربی	--	دبیرستان امام خمینی- اقلید	۱۳۷۵
لیسانس	شیمی	محض	دانشگاه اصفهان	۱۳۷۹
فوق لیسانس[۱]	شیمی	شیمی فیزیک	دانشگاه صنعتی اصفهان	۱۳۸۱
دکترا[۲]	شیمی	شیمی فیزیک	دانشگاه صنعتی اصفهان	۱۳۸۸
پسا دکترا[۳]	-	شیمی محاسباتی	دانشگاه صنعتی اصفهان	مهر ۱۳۸۹

[۱] عنوان پایان نامه کارشناسی ارشد:

"محاسبه هدایت گرمایی مخلوط های گازی در چگالی پایین و ارایه یک نرم افزار جدید جهت محاسبه هدایت گرمایی" ؛

نمره دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد: ۱۸/۴

استاد راهنما: دکتر بیژن نجفی *استاد مشاور*: دکتر غلامعباس پارسافر

** عضو **استعداد درخشان** دانشگاه صنعتی اصفهان، تشویق از سوی مرکز تحصیلات تکمیلی و اعطای بورس (کمک هزینه) تحصیلی در سال تحصیلی ۸۱-۸۰ به خاطر کسب **رتبه ممتاز** در دوره کارشناسی ارشد؛ رتبه اول گرایش شیمی فیزیک

[۲] عنوان رساله دکترا:

"شبیه سازی دینامیک مولکولی مایعات یونی بر پایه کاتیون ایمیدازولیم: مطالعه خواص دینامیکی و انتقالی، ساختار و نقطه ذوب" ؛

درجه دفاع از رساله دکترا: **عالی**

اساتید راهنما: دکتر بیژن نجفی (دانشگاه صنعتی اصفهان)؛ دکتر سامان علوی (دانشگاه آتاوا-کانادا)

اساتید مشاور: دکتر محمود اشرفی زاده (دانشکده مکانیک و مسئول مرکز خدمات محاسبات پیشرفته دانشگاه صنعتی اصفهان) و دکتر سید جواد هاشمی فر (دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان)

[۳] عنوان طرح تحقیقاتی پسا دکترا (**PostDoc.**):

"نصب و راه اندازی موازی نرم افزارهای شیمی محاسباتی بر روی کلاستر رایانه ای و ایجاد بانک اطلاعاتی برای استفاده آسان از هر نرم افزار"

این دوره پسا دکترا در مرکز محاسبات پیشرفته (مرکز ابر رایانه) دانشگاه صنعتی اصفهان از مهرماه ۱۳۸۸ تا مهر ماه ۱۳۸۹ همزمان با آغاز شکل گیری مرکز ملی ابررایانش شیخ بهایی و زیر نظر دکتر محمود اشرفی زاده صورت گرفت.

۳- سوابق شغلی

۳-۱- دبیر رسمی آموزش و پرورش (۸ سال تدریس)، استعفاء در سال ۱۳۸۸ برای ورود به دانشگاه و آموزش عالی

۳-۲- قرارداد تحقیقاتی یکساله طرح پسا دکترا از مهر ۱۳۸۸ تا مهر ۱۳۸۹ در مرکز خدمات محاسبات پیشرفته دانشگاه صنعتی اصفهان

۳-۳- در دانشکده شیمی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان: محقق پسا دکترا (مهر ۸۹ تا اسفند ۸۹)، استادیار قراردادی (اسفند ۸۹ تا آذر ۹۰) و استادیار پیمانی (آذر ۹۰ تا بهمن ۹۶) و پس از آن تاکنون با مرتبه دانشیار و از ۱۴۰۱/۳/۵ با وضعیت رسمی قطعی، همچنین ۱۱ سال نماینده گروه شیمی فیزیک در دانشکده شیمی، مدیر امور آموزشی و تحصیلات تکمیلی دانشگاه از آذر ۹۲ تا آذر ۹۴ و عضو هیأت علمی پژوهشکده تغییر اقلیم و گرمایش زمین و عضو پیوسته انجمن شیمی ایران از سال ۹۱ تاکنون

۴- سوابق تدریس

سابقه آموزشی **تدریس در مقاطع مختلف**: ۸ سال دبیر دبیرستان، ۲ سال مدرس شیمی عمومی دوره کارشناسی، و در ۱۳ سال گذشته:

الف- استاد درس‌های شیمی فیزیک پیشرفته، ترمودینامیک آماری، طیف سنجی مولکولی، سینتیک شیمیایی، شیمی نظری ساختارهای نانو، اصول نانوتکنولوژی، مباحث نوین در شیمی فیزیک و سمینار در مقطع کارشناسی ارشد رشته‌های شیمی، شیمی فیزیک و نانوشیمی

ب- استاد درس مباحث نوین در شیمی فیزیک (شبیه سازی مولکولی) و ترمودینامیک آماری در مقطع دکتری تخصصی

ج- استاد مدعو دانشگاه علوم پزشکی زنجان، گروه بیوتکنولوژی و نانوفناوری پزشکی، تدریس درس مدل‌سازی در مقیاس نانو برای مقطع کارشناسی ارشد

۵- سوابق پژوهشی

- علایق پژوهشی

پژوهش‌های بنیادی و کاربردی در زمینه‌ی شبیه سازی دینامیک مولکولی سامانه‌های متنوع شیمیایی و زیستی:

- Simulations of thermodynamics, dynamics and transport properties, structure and solubility, in room temperature ionic liquids (RTILs) and their applications to green chemistry
- Simulations of complex materials e.g., metal organic frameworks (MOFs), zeolites, confined fluids, crude-oil, natural gas sweetening, pharmaceutical and biological systems
- MD simulations of melting process of ionic liquids (ILs) and inclusion compounds
- Simulations of dynamics, structure, and thermodynamics of binary mixtures of ILs with CO_2 or other gaseous species, ILs/Water, ILs/Carbon Nanotubes and ILs/Organic compounds
- *Ab initio* quantum calculations of the properties of RTILs and other complex compounds
- Simulations of guest molecules in porous materials for gas separation and purification
- Development and refinement of force fields for different families of materials
- MD simulation of biomolecules in the aqueous ILs
- MD simulation study of systems including deep eutectic solvents (DESs)

More recently, we have been working on problems in the area of simulation of binary mixtures of ILs with CO_2, Water, and CH_3CN. We also focus on the MD simulations of H_2 storage, effective air separation process, and O_2 production from air by Li-LSX zeolite as one of the most industrially important frameworks.

خلاصه سوابق پژوهشی در **شش** بند (**پ۱** تا **پ۶**) در ادامه آورده شده است:

پ۱) مقالات چاپ شده در مجلات معتبر بین المللی:

(بیش از ۸۰ درصد مقالات ISI با ضریب کیفیت Q1، بیش از ۵۵ درصد نویسنده مسئول و در بیش از ۶۰ درصد نویسنده اول)

1- M. H. Kowsari, S. Alavi, M. Ashrafizaadeh, and B. Najafi, *J. Chem. Phys.*, 129, 224508 (**2008**). Q1
Title: "Molecular Dynamics Simulation of Imidazolium-Based Ionic Liquids: I. Dynamics and Diffusion Coefficient"

2- M. H. Kowsari, S. Alavi, M. Ashrafizaadeh, and B. Najafi, *J. Chem. Phys.*, 130, 014703 (**2009**). Q1
Title: "Molecular Dynamics Simulation of Imidazolium-Based Ionic Liquids: II. Transport Coefficients"

3- M. H. Kowsari, S. Alavi, M. Ashrafizaadeh, and B. Najafi, *J. Chem. Phys.*, 132, 044507 (**2010**). Q1
Title: "Molecular Dynamics Study of Congruent Melting of the Equimolar Ionic Liquid–Benzene Inclusion Crystal [emim][NTf_2]•C_6H_6"

4- M. H. Kowsari, S. Alavi, B. Najafi, K. Gholizadeh, E. Dehghanpisheh, F. Ranjbar, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 13, 8826-8837 (**2011**). Q1
Title: "Molecular Dynamics Simulations of Structure and Transport Properties of Tetrabutylphosphonium Amino Acid Ionic Liquids"

5- I. Saberikia, E. Safaei, M. H. Kowsari, Y-I. Lee, P. Cotic, G. Bruno, H. A. Rudbari, *J. Mol. Struct.*, 1029, 60-67 (**2012**). Q3
Title: "A New Iron(III) Complex of Glycine Derivative of Amine-Chloro Substituted Phenol Ligand: Synthesis, Characterization and Catechol Dioxygenase Activity"

6- S. E. Balaghi, E. Safaei, M. Rafiee, M. H. Kowsari, *Polyhedron*, 47, 94-103 (**2012**). Q2
Title: "A Chloro Bridged Cu(II)-Cu(II) Complex of a New Aminophenol Ligand: Magnetostructural, Radical Decay Kinetic Studies, Highly Efficient and Aerial Alcohol Oxidation"

7- H. Mosaddeghi, S. Alavi, M. H. Kowsari, B. Najafi, *J. Chem. Phys.*, 137, 184703 (**2012**). Q1
Title: "Simulations of Structural and Dynamic Anisotropy in Nano-Confined Water between Parallel Graphite Plates"

8- M. H. Kowsari, M. Fakhraee, S. Alavi, B. Najafi, *J. Chem. Eng. Data*, 59, 2834-2849 (**2014**). Q1
Title: "Molecular Dynamics and *ab Initio* Studies of the Effects of Alkyl / Functional Substituent Groups on the Thermodynamic Properties and Structure of Four Selected Imidazolium-Based [Tf_2N^-] Ionic Liquids"

9- M. H. Kowsari, M. Fakhraee, *J. Chem. Eng. Data*, 60, 551-560 (**2015**). Q1
Title: "Influence of Butyl Side Chain Elimination, Tail Amine Functional Addition, and C2 Methylation on the Dynamics and Transport Properties of the Imidazolium-Based [Tf_2N^-] Ionic Liquids from Molecular Dynamics Simulations"

10- M. H. Kowsari, Leila Tohidifar, *J. Phys. Chem. B*, 120, 10824-10838 (**2016**). Q1
Title: "Tracing Dynamics, Self-Diffusion, and Nanoscale Structural Heterogeneity of Pure and Binary Mixtures of Ionic Liquid 1-Hexyl-2,3-dimethylimidazolium Bis(fluorosulfonyl)imide with Acetonitrile: Insights from Molecular Dynamics Simulations"

11- M. H. Kowsari, Shabnam Naderlou, *Microporous Mesoporous Mater.*, 140, 39-49 (**2017**). Q1
Title: "Understanding the Dynamics, Self-Diffusion, and Microscopic Structure of Hydrogen Inside the Nanoporous Li-LSX Zeolite"

12- M. H. Kowsari, *J. Phys. Chem. C*, 121, 1770-1780 (**2017**). Q1

Title: "Tracing Experimentally Compatible Dynamical and Structural Behavior of Atmospheric N_2/O_2 Binary Mixtures within Nanoporous Li–LSX Zeolite: New Insights to Influence of Extra-Framework Cations by MD Simulations"

13- Z. Pouramini, A. Mohebbi, M. H. Kowsari, *J. Mol. Liq*., 246, 39-47 (**2017**). Q2
Title: "Atomistic Insights into the Thermodynamics, Structure, and Dynamics of Ionic Liquid 1-Hexyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate via Molecular Dynamics Study"

14- M. H. Kowsari, *Microporous Mesoporous Mater.*, 264, 181-189 (**2018**). Q1
Title: "Single-Component Structural Correlation and Self-Diffusion of N_2 and O_2 Through Nanopores of Li-LSX Zeolite: The Role of Temperature, Loading, and Li-III Cations"

15- M. H. Kowsari, Soraya Ebrahimi, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20, 13379-13393 (**2018**). Q1
Title: "Capturing the Effect of $[PF_3(C_2F_5)_3]^-$ *vs.* $[PF_6]^-$, Flexible Anion *vs.* Rigid, and Scaled Charge *vs.* Unit on the Transport Properties of $[bmim]^+$-Based Ionic Liquids: A Comparative MD Study"

16- M. H. Kowsari, Leila Tohidifar, *J. Comput. Chem.*, 39, 1843-1853 (**2018**). Q1
Title: "Systematic Evaluation and Refinement of Existing All-atom Force Fields for the Simulation of Liquid Acetonitrile"
The **Cover Image** related to this paper published on 24 September 2018, issue 23, vol. 39, *J. Comput. Chem.*

17- Soraya Ebrahimi, M. H. Kowsari, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 21, 3195-3210 (**2019**). Q1
Title: "Fine Probing the Effect of Replacing $[PF_6]^-$ with $[PF_3(C_2F_5)_3]^-$ on the Local Structure and Nanoscale Organization of $[bmim]^+$-Based Ionic Liquids Using MD Simulation"

18- Hamid Mosaddeghi, S. Alavi, M. H. Kowsari, B. Najafi, S. Az'hari, Y. Afshar, *J. Chem. Phys.*, 150, 144510 (**2019**). Q1
Title: "Molecular Dynamics Simulations of Nano-Confined Methanol and Methanol-Water Mixtures Between Infinite Graphite Plates: Structure and Dynamics"

19- Z. Pouramini, A. Mohebbi, M. H. Kowsari, *Theor. Chem. Acc.*, 138: 99 (**2019**). Q2/3
Title: "The Possibility of Cadmium Extraction to the Ionic Liquid 1-Hexyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphate in the Presence of Hydrochloric Acid: a Molecular Dynamics Study of the Water–IL Interface"

20- Farzad Khorrami and M. H. Kowsari, *J. Phys. Chem. B*, 124, 3770-3783 (**2020**). Q1
Title: "Tracing Local Nanostructure of the Aqueous Solutions of the Biocompatible [Cho][Gly] Ionic Liquid: Importance of Hydrogen Bond Attraction between Like-Charged Ions"

21- M. H. Kowsari and S. Mohammad Torabi, *J. Phys. Chem. B*, 124, 6972-6985 (**2020**). Q1
Title: "Molecular Dynamics Insights into the Nanoscale Structural Organization and Local Interaction of Aqueous Solutions of Ionic Liquid 1-Butyl-3-Methylimidazolium Nitrate"

22- Farzad Khorrami and M. H. Kowsari, *J. Chem. Phys.*, 156, 214706 (**2022**). Q1

Title: "Tracing the Origin of Heterogeneities in the Local Structure and Very Sluggish Dynamics of [Cho][Gly] Ionic Liquid Confined Between Rutile and Graphite Slit Nanopores: A MD Study"

23- M. H. Kowsari and Farzaneh Jalali, *J. Phys. Chem. B*, 127, 194-204 (**2023**). Q1
Title: "Tracing the Effect of Replacing $[Gly]^-$ with $[Ala]^-$ and Hydroxylation of $[emim]^+$ on the Fine-Tuning of the Transport Properties of the Corresponding Amino Acid-Based Ionic Liquids Using MD Simulation"

24- Mahnaz Hassanpour, Seyed Mohammad Torabi, Davoud Afshar, M. H. Kowsari, Ali Akbar Meratan, Nasser Nikfarjam, *ACS Appl. Bio Mater.*, 7, 3, 1558–1568 (**2024**). Q1
Title: "Tracing the Antibacterial Performance of Bis-Imidazolium-based Ionic Liquid Derivatives"

پ۱-۱) مقالات علمی-پژوهشی به زبان فارسی:

1- M. H. Kowsari, Azam Ganjkhanloo, "Structure and Thermodynamic Properties of Imidazolium-Based Ionic Liquids with Dicyanamide Anion: A Molecular Dynamics Study" Nashrieh Shimi va Mohandesi Shimi Iran (NSMSI), in Persian language, Article 9, Vol. 37, Issue 2 - Serial Number 88, Page 95-102, Spring **2018**.

ساختار و ویژگی های ترمودینامیکی مایع های یونی بر پایه ایمیدازولیوم با آنیون دی سیانامید: مطالعه ی دینامیک مولکولی، مقاله ۹، دوره ۳۷، شماره ۲ - شماره پیاپی ۸۸، صفحه ۹۵-۱۰۲، تابستان ۱۳۹۷.

2- M. H. Kowsari, Seyed Mohammad Torabi, "Molecular Dynamics Simulation of the 1-Butyl-3-methylimidazolium Nitrate Ionic Liquid and the Dynamical Behavior of the Ionic Liquid-Water Binary Mixtures", Nashrieh Shimi va Mohandesi Shimi Iran (NSMSI), in Persian language, Article 10, Vol. 37, Issue 2 - Serial Number 88, Page 103-112, Spring **2018**.

شبیه سازی دینامیک مولکولی مایع یونی ۱ـ بوتیل ـ۳ـ متیل‌ایمیدازولیوم نیترات و رفتار دینامیکی مخلوط‌های دوتایی مایع یونی ـآب، مقاله ۱۰، دوره ۳۷، شماره ۲ - شماره پیاپی ۸۸، صفحه ۱۰۳-۱۱۲، تابستان ۱۳۹۷.

پ۲) مقالات یا خلاصه مقالات چاپ و ارایه شده در سمینارها و کنفرانس‌های ملی یا بین‌المللی:

پ۲-۱) مقاله یا خلاصه مقاله‌های چاپ شده در سمینارها (ارایه به صورت سخنرانی):

1- M. H. Kowsari, S. Alavi, and B. Najafi "Molecular Dynamics Simulation of the Dynamic Properties of Imidazolium-Based Ionic Liquids" **Oral** in *10th Iranian Physical Chemistry seminar*, Isfahan University, Iran, April 23-26 **2007**.

2- M. H. Kowsari, Saman Alavi, Mahmud Ashrafizaadeh, and Bijan Najafi "Study of Ionic Diffusion Coefficients in1-Alkyl-3-Methylimidazolium-Based Ionic Liquids via Molecular Dynamics Simulation " **Oral** in *12th Iranian Physical Chemistry seminar*, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran, July 20-23 **2009**.

3- M. H. Kowsari, Saman Alavi, Mahmud Ashrafizaadeh, and Bijan Najafi "Molecular Dynamics Studies of the Electrical Conductivity Imidazolium-Based Ionic Liquids" **Oral** in *12th Iranian Physical Chemistry seminar*, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran, July 20-23 **2009**.

4- M. H. Kowsari, S. Alavi, M. Ashrafizaadeh, and B. Najafi "Determination of the melting point of the equimolar ionic liquid–benzene inclusion crystal by molecular simulation" **Oral**

in *13th Iranian Physical Chemistry Seminar*, Shiraz University, Shiraz, Iran, April 12-15 **2010**.

5- M. H. Kowsari, Saman Alavi "Room Temperature Ionic Liquids as Green Solvents: A Molecular Dynamics Study" **Oral** in *The 5th National Seminar of Chemistry & Environment*, p. *O-132*, Shahid Chamran Ahvaz University, Ahvaz, Iran, December 21-23, **2011**.

6- M. H. Kowsari, M. Bamdad, M. Ashrafizaadeh "Dynamics and Diffusion of N_2 and O_2 in Zeolite Li-LSX Studied by Molecular Dynamics Simulations" **Oral** in *The 15th Iranian Physical Chemistry Seminar*, p. 10-12, Tehran University, Tehran, Iran, September 3-6, **2012**.
این کار به عنوان اولین سخنرانی در سالن شیمی محاسباتی در پانزدهمین کنفرانس شیمی فیزیک ایران با موضوع شبیه سازی گازها در زئولیت توسط دکتر کوثری در دانشگاه تهران ارائه شد. موارد ۷ و ۸ نیز جزء اولین سخنرانی‌ها در همان روز اول کنفرانس بودند که توسط دانشجویان کارشناسی ارشد گروه شبیه سازی ارائه شدند.

7- M. H. Kowsari, M. Fakhraee, B. Najafi "Study of the Imidazolium-Based [Tf_2N^-] Ionic Liquids by Molecular Dynamics Simulations" **Oral** in *The 15th Iranian Physical Chemistry Seminar*, p. 22-24, Tehran University, Tehran, Iran, September 3-6, **2012**.

8- M. H. Kowsari, M. Aziznezhad "Molecular Dynamics Simulation of an Amine-Functionalized Imidazolium-Based Ionic Liquid" **Oral** in *The 15th Iranian Physical Chemistry Seminar*, p. 16-18, Tehran University, Tehran, Iran, September 3-6, **2012**.

9- M. H. Kowsari "Molecular Dynamics Simulation Studies of Physical and Chemical Capturing of CO_2 within Room Temperature Ionic Liquids as Green Absorbing Solvents" **Oral** in *The Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, p. 14, IASBS, Zanjan, Iran, October 24-25, **2012**.

10- M. H. Kowsari, S. Naderloo, "Understanding Microscopic Details of Hydrogen Diffusion and Storage within the Nanopores of Li-LSX Zeolite by Molecular Simulation" **Oral** presentation in *The 2nd Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, p31, 1-7, IASBS, Zanjan, Iran, November 12-13 **2014**.

11- M. H. Kowsari, "Tracing the Dynamics, Self-Diffusion, and Structure of Simple Guest Molecules Inside the Nanoporous Li-LSX Zeolite by MD Simulation" **Oral** presentation (Invited Speaker) in *The 8th Theoretical and Computational Chemistry Workshop*, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran, February 27-28 **2019**.

12- M. H. Kowsari, Farzad Khorrami, "Local Microscopic Structure of the Biocompatible Cholinium Glycinate Ionic Liquid", **Oral** presentation in *22nd Iranian Physical Chemistry Conference*, University of Zanjan, Zanjan, Iran, Computational Chemistry, p. 118-119, August 20-22 **2019**.

13- M. H. Kowsari, Leila Khoeini, "Study of the Physical CO_2 Capture in the Tetrabutylphosphonium Lysinate Ionic Liquid Using Molecular Dynamics Simulation", **Oral** presentation, Virtual, in *The* 6th *Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, p. 42-46, IASBS, Zanjan, Iran, March 4-5 **2021**.

14- M. H. Kowsari , "An Introduction to the MD Simulation of the Ionic Liquid-Containing Systems: Impact of the Aqueous Ionic Liquid Solutions on the Phospholipid Bilayer", **Oral**

presentation in *The* 1st *Research Gathering of Chemistry & Biological Sciences Departments at* Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, IASBS, Zanjan, Iran, January 4 **2023**.

15- M. H. Kowsari, Fatemeh Fattahi, "Molecular Dynamics Simulation of CO_2 Capture in Deep Eutectic Solvents", **Oral** presentation in *The 9th Regional Conference on Climate Change and Global Warming*, IASBS, Zanjan, Iran, May 15-16 **2024**.

و ارائه دو سخنرانی در اولین و سومین مدرسه آموزش شیمی در دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه با عناوبن زیر:

16- M. H. Kowsari, "Molecular Dynamics Simulation of Room Temperature Ionic Liquids" **Oral** in *The 1st Educational Chemistry School in IASBS*, July 12-14 **2011**.

17- M. H. Kowsari, "Molecular Dynamics (MD) Simulation as an Efficient Tool to Determine Different Properties of Materials" **Oral** in *The 3rd Educational Chemistry School in IASBS*, 23-24 August **2023**.

پ۲-۲) مقاله یا خلاصه مقاله‌های چاپ شده در سمینارها و کنفرانس‌ها (ارایه به صورت پوستر):

1- Mohammad Hossein Kowsari and Bijan Najafi "A new software for the prediction of the thermal conductivity of gaseous mixtures of monatomic and polyatomic gases" *6th Iranian Physical Chemistry seminar*, Urima University, Iran, September **2002**.

۲- علی فرضی و محمد حسین کوثری، "نرم افزار محاسبه ضریب هدایت گرمایی مخلوط گازهای تک اتمی و چند اتمی"، *هشتمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران*، دانشگاه فردوسی مشهد، ۲۹ مهر- ۱ آبان ۱۳۸۲.

3- M. H. Kowsari, Saman Alavi, Bijan Najafi, and S. J. Hashemifar "A Systematic Structural Study of 1-Alkyl-3-Methylimidazolium-Based Ionic Liquids via Molecular Dynamics Simulation" *11th Iranian Physical Chemistry seminar*, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran, July 21-24 **2008**.

4- M. H. Kowsari, Saman Alavi, and Bijan Najafi "Dynamics in Room-Temperature Ionic Liquids: A Computer Simulation Study" *11th Iranian Physical Chemistry seminar*, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran, July 21-24 **2008**.

5- Hamid Peyman, Saman Alavi, M. H. Kowsari, and Bijan Najafi "Investigation of Structural, Thermodynamics and Dynamics of Alkali-metal Disilicate Glasses via Molecular Dynamics Simulation " *11th Iranian Physical Chemistry seminar*, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran, July 21-24 **2008**.

6- Hamid Peyman, Saman Alavi, M. H. Kowsari, and Bijan Najafi "Molecular Dynamics Simulations of Sodium and Potassium Disilicate Glasses: A Universal Equation of State" *11th Iranian Physical Chemistry seminar*, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran, July 21-24 **2008**.

7- Fatemeh Ranjbar, Saman Alavi, Bijan Najafi, and M. H. Kowsari "A Structural Study of the Amino Acid Ionic Liquids via Molecular Dynamics Simulation" *12th Iranian Physical Chemistry seminar*, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran, July 20-23 **2009**.

8- Elham Dehghanpisheh, Saman Alavi, Bijan Najafi, and M. H. Kowsari "Atomistic Simulation of the Structure of the Tetrabutylphosphonium Amino Acid Ionic Liquids" *12th*

Iranian Physical Chemistry seminar, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran, July 20-23 **2009**.

9- K. Gholizadeh, Saman Alavi, Bijan Najafi, and M. H. Kowsari "Molecular Dynamics Simulation of the Amino Acid Ionic Liquids with the Alanine and Glycine Anions" *12th Iranian Physical Chemistry seminar*, University of Kurdistan, Sanandaj, Iran, July 20-23 **2009**.

10- M. H. Kowsari, S. Alavi, B. Najafi, E. Dehghanpisheh, F. Ranjbar, and K. Gholizadeh "Molecular Dynamics Simulations of Dynamics and Diffusion Coefficients of Tetrabutylphosphonium Amino Acid Based Room Temperature Ionic Liquid" *The 6th International Chemical Engineering Congress and Exhibition (IChEC)*, Kish Island, Iran, November 16-20 **2009**.

11- M. H. Kowsari, S. Alavi, M. Ashrafizaadeh, and B. Najafi "MD Simulation of the Dynamics of Molecular Motion in the Equimolar Mixture of [emim][NTf_2]•C_6H_6" *13th Iranian Physical Chemistry Seminar*, Shiraz University, Shiraz, Iran, April 12-15 **2010**.

12- M. H. Kowsari, Saman Alavi "Simulation Study of the Melting Process of 1-ethyl-3-methyl Imidazolium Bis(trifluoromethanesulfonyl)amide Ionic Liquid" in Persian, *Proceeding of the 17th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics*, 303-306, IASBS, Zanjan, Iran, May 26-27 **2011**.

13- Hamid Mosaddeghi, Saman Alavi, Bijan Najafi, and M. H. Kowsari "Molecular Dynamics Simulation of Fluids Confined between Graphite Layers" *Proceeding of the 14th Iranian Physical Chemistry Conference,* p. 2079-2081, Kish Island, Iran, February 25-28 **2011**.

14- Hamid Mosaddeghi, Saman Alavi, Bijan Najafi, and M. H. Kowsari "Hydrogen-Bonding in Water Confined between Graphite Layers" *15th Iranian Chemistry Congress*, *Chemistry, our life, our future*; p. 977, Bu Ali Sina University, Hamedan, Iran, September **2011**.

15- M. H. Kowsari, Alireza Keshavarz "Study of the Ionic Liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium Tris(pentafluoroethyl)trifluorophosphate ([emim][FEP]) by Molecular Dynamics Simulation" *Proceeding of the 20th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics*, 178-181, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, May 28-30 **2014**.

16- M. H. Kowsari, Neda Kalantari "Study of 1-alkyl-3-methylimidazolium Halides Ionic Liquids by Molecular Dynamics Simulation" *Proceeding of the 20th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics*, 174-177, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, May 28-30 **2014**.

17- M. H. Kowsari, L. Tohidifar "Effect of Adding Acetonitrile on the Dynamic Properties of 1-Hexyl-2,3-dimethylimidazolium bis(flourosulfonyl)imide ([hmmim][FSI]) Ionic Liquid" *Proceeding of the 17th Iranian Physical Chemistry Conference*, p390, 1091-1093, K. N. Toosi University, Tehran, Iran, October 21-23 **2014**.

18- M. H. Kowsari, B. Nemati "Molecular Dynamics Simulation Study of the Nano-scale Segregated Structure of Ionic Liquids 1-ethyl-3-methylimidazolium Tetrafluoroborate ([C_2mim][BF_4]), 1-hexyl-3-methylimidazolium Tetrafluoroborate ([C_6mim][BF_4]), and Their Binary Mixture" *The 2nd Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, p16, 1-6, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, November 12-13 **2014**.

19- M. H. Kowsari, L. Tohidifar "A Thermodynamic Study of the Ionic Liquid 1-Hexyl-2,3-dimethyl-imidazolium bis(fluorosulfonyl)imide and Its Mixture with Acetonitrile Using Molecular Dynamics Simulation" *The 2nd Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, p18, 1-6, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, November 12-13 **2014**.

20- M. H. Kowsari, N. Kalantari "Influence of the Halide Anion Type on the Thermodynamic Properties and Structure of Imidazolium Based Ionic Liquids: Molecular Dynamics Studies" *The 2nd Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, p32, 1-6, November 12-13 **2014**.

21- M. H. Kowsari, M. Aziznezhad "Study of the Dynamics of Chemical CO_2 Capture Process in the Ionic Liquid 1-(3-Aminopropyl-3-methylimidazolium Tris(pentafluoroethyl)trifluorophosphate Using Molecular Dynamics Simulation", *Proceeding of the 21th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics & School on Complex Fluids*, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, 118-121, May 27-29 **2015**.

22- M. H. Kowsari, B. Nemati "Molecular Dynamics Simulation Study of the Dynamical and Transport Properties of Pure State and Binary Mixture of Ionic Liquids 1-Alkyl-3-methylimidazolium Tetrafluoroborate with the Ethyl and Hexyl Alkyl Group", *Proceeding of the 21th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics & School on Complex Fluids*,in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, 122-125, May 27-29 **2015**.

23- M. H. Kowsari, L. Tohidifar "Molecular Dynamic Simulation Study of the Nano-scale Segregated Structure of Ionic Liquid 1-Hexyl-2,3-dimethylimidazolium bis(fluorosulfonyl)imide and Its Mixture with Acetonitrile", *The 2nd National Congress and Workshops on Nanoscience & Nanotechnology (NCWNN)*, in Persian, Kharazmi University, Iran, 1-4, May 20-21 **2015**.

24- M. H. Kowsari, F. Rezaei "Molecular Dynamics Simulation of Two Geminal Imidazolium Based Dicationic Ionic Liquids with Different Spacer Chain Length", *The 3rd Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, in Persian, Keylagh Cultural Village, Farashband County, Fars Province, Iran, p37, 1-6, March 8-9 **2016**.

25- M. H. Kowsari, A. R. Keshavarz, "Investigation of the Physical CO_2 Capture in the Ionic Liquid 1-Ethyl-3-methylimidazoliumTris(pentafluoroethyl)trifluorophosphate: A Molecular Dynamics Simulation Study", *The 3rd Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, in Persian, Keylagh Cultural Village, Farashband County, Fars Province, Iran, p31, 1-5, March 8-9 **2016**.

26- M. H. Kowsari, A. Ganjkhanloo, "Molecular Dynamics Simulation of Two Imidazolium Based Ionic Liquids with Dicyanamide Anion", *The 3rd Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, in Persian, Keylagh Cultural Village, Farashband County, Fars Province, Iran, p27, 1-5, March 8-9 **2016**.

27- M. H. Kowsari, B. Noori, "The influence of the anion type and reduced partial charge models on the dynamics and structure of ionic liquids", *Proceeding of the 22nd Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics*, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, p28,1-4, May 26-27 **2016**.

28- V. Alizadeh, M. H. Kowsari, S. Alavi, "Understanding Microscopic Electronic Structure and Local Interactions in the Ionic Liquid 1-Methylimidazolium Hydrogen Sulfate [C1Him][HSO4]", *Seventh Theoretical and Computational Chemistry Workshop (TCCW)*,

Chemistry & Chemical Engineering Research Center of Iran (CCERCI), Tehran, Iran, February 6-8 **2018**.

29- M. H. Kowsari, Lida Zolghadr, "Molecular Dynamics Simulation of the Transport Properties of Two Imidazolium-Based Ionic Liquids with Methanesulfonate and Trifluoromethanesulfonate Anions" *The 5th Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, p, 1-5, February 27-28 **2019**.

30- M. H. Kowsari, Leyla Khoeini, "Molecular Dynamics Simulation of the Self-Diffusion Coefficients of the Tetrabutylphosphonium Lysinate Ionic Liquid" *The 5th Regional Conference on Climate Change & Global Warming*, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, p, 1-5, February 27-28 **2019**.

31- M. H. Kowsari, S. Mohammad Torabi, "Molecular Dynamics Simulation of Aqueous Solutions of a Hydrophilic Room Temperature Ionic Liquid", The *22nd Iranian Physical Chemistry Conference*, University of Zanjan, Zanjan, Iran, Computational Chemistry, p. 134-135, August 20-22 **2019**.

32- S. Mohammad Torabi, M. H. Kowsari, "Stability of Protein Structure in the Ionic Liquid-Water Mixture: A Molecular Dynamics Simulation Study", The *26th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics*, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, p34,1-2, July 7-9 **2021**.

33- Farzad Khorrami, M. H. Kowsari, "Molecular Dynamics Simulation of the Effect of Water on the Dynamics of Cholinium Glycinate Ionic Liquid", The *26th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics*, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, p35,1-2, July 7-9 **2021**.

34- S. Mohammad Torabi, M. H. Kowsari, "Impact of an Aqueous Ionic Liquid Solution on the Phospholipid Bilayer using MD Simulation", The *5th Iranian Applied Chemistry Seminar*, in Persian, Azarbijan Shahid Madani University, Tabriz, Iran, p1095, 533-536, August 31-September 2 **2021**.

35- Frough Rezaie, M. H. Kowsari, S. Mohammad Torabi, "Structural Study of Aqueous Solution of Imidazolium-Based Di-Cationic Ionic Liquids with Molecular Dynamics Simulation", The *5th Iranian Applied Chemistry Seminar*, in Persian, Azarbijan Shahid Madani University, Tabriz, Iran, p1096, 537-542, August 31- September 2 **2021**.

36- Farzad Khorrami, M. H. Kowsari, "Molecular Dynamics Simulation of a Confined Ionic Liquid Between Two Parallel Rutile Walls", The *5th Iranian Applied Chemistry Seminar*, in Persian, Azarbijan Shahid Madani University, Tabriz, Iran, p1199,1190-1194, August 31-September 2 **2021**.

37- Leila Tohidifar, Farzaneh Rahimi, M. H. Kowsari, "Molecular Dynamics Study on Loading of Methotrexate Anticancer Drug on the Chitosan Surface Modified Carbon Nanotube", *The 3rd International Conference on Researches in Nanotechnology & Nanoscience*, University of Tehran, Aras International Campus, April 26 **2023**.

38- Leila Tohidifar, Kobra Hashemifar, M. H. Kowsari, "Peptide Modified Carbon Nanotube for Doxorubicin Anticancer Drug delivery: A Molecular Dynamics Simulation Study", The *28th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics*, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, p8,1-4, May 25-26, **2023**.

39- Leila Tohidifar, Farzaneh Rahimi, M. H. Kowsari, "Molecular Dynamics Study of Methotrexate Anticancer Drug Encapsulation into the Carbon Nanotube", The *28th Annual IASBS Meeting on Condensed Matter Physics*, in Persian, IASBS, Zanjan, Iran, p37,1-4, May 25-26, **2023**.

40- Seyed Mohammad Torabi, M. H. Kowsari, "Microscopic Interactions of Lysozyme with Aqueous Choline Based Ionic Liquids Using Molecular Dynamics Simulations", *The 6th International and 8th National IASBS Symposium in Biological Sciences: Ligand Binding*, IASBS, Zanjan, Iran, Feb.15-16, **2024**.

41- Leila Tohidifar, Kobra Hashemifar, M. H. Kowsari, A Molecular Dynamics Study on the Peptide-Drug Interactions in the Modified Carbon Nanotube-Based Drug Delivery System. *The 6th International and 8th National IASBS Symposium in Biological Sciences: Ligand Binding*, IASBS, Feb. 15-16 **2024**.

42- Leila Tohidifar, M. H. Kowsari, "Co-Delivery System of Triple Anticancer Drugs Using Chitosan Modified Single-Walled Carbon Nanotube: Molecular Dynamics Simulation Study", *The 22nd Iranian Chemistry Congress*, the Iranian Research Organization for Science and Technology (IROST), Tehran, Iran, p. 166-167, May 13-15, **2024**.

پ۳) انجام طرح پژوهشی دوره پسا دکترا:

فعالیت پژوهشی در زمینه نصب و راه اندازی نرم افزارهای شیمی محاسباتی به صورت موازی بر روی کلاستر و اقدام به ایجاد **بانک اطلاعاتی** نرم افزارهای متداول شیمی محاسباتی۲ اکه در مرکز خدمات محاسبات پیشرفته دانشگاه صنعتی اصفهان (مهر۸۸ تا مهر ۸۹) زیر نظر دکتر محمود اشرفی زاده صورت گرفت.

پ۴) راهنمایی و مشاوره پایان نامه‌های کارشناسی ارشد و دکتری:

پ۴-۱) استاد راهنمای پایان نامه‌های کارشناسی ارشد زیر در دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان:

1- Mohammad Aziznezhad; Feb. 2011-April 2013.
(He graduated from Ph.D. at Ferdowsi University of Mashhad, 2020)
2- Alireza Keshavarz; Sept. 2012-Sept. 2013.
(He graduated from Ph.D. at Arak University, 2019)
3- Shabnam Naderloo; Sept. 2012-June 2014.
(She is the Ph.D. student at Zanjan University)
4- Neda Kalantari; Sept. 2012-June 2014.
5- Leila Tohidifar; Sept. 2013-Sept. 2014.
(She graduated from Ph.D. at Tarbiat Modares University, 2020)
(She is my PostDoc. at IASBS Now)
6- Batool Nemati; Sept. 2013-March 2015.
7- Behnaz Noori; Oct. 2014-Sept. 2016.
8- Fatemeh Rezaei; Oct. 2014-Sept. 2016.
9- Azam Ganjkhanlou; May 2015-Sept. 2016.
10- Seyed Mohammad Torabi; Jan. 2016-Sept. 2017.
(He is my Ph.D. student at IASBS from 2018)
11- Farzaneh Jalali; May 2016- Nov. 2017.
12- Leila Khoeini; Dec. 2017-July 2019.
13- Lida Zolghadr; Dec. 2017-July 2019.
14- Fatemeh Barani: 2019-Feb. 2023.
15- Nasrin Shokri: 2021-March 2023.
16- Marziyeh Qaseminafard: 2021-Sept. 2023.
17- Farzaneh Rahimi: 2022-Sept. 2023.
(She is the Ph.D. student at Ferdowsi University of Mashhad)

18- Kobra Hashemifar: 2022-Sept. 2023.
(She is the Ph.D. student at Shiraz University)
19- Saba Rezaei: 2022-Sept. 2024

۲۰- استاد راهنمای مشترک یک پایان نامه کارشناسی ارشد (مصطفی فخرایی) در دانشگاه صنعتی اصفهان (دفاع: ۱۳۹۰)
(Mostafa Fakhraee graduated from Ph.D. at Sharif University of Technology, 2017)

پ۴-۲) استاد راهنما و مشاور پایان نامه‌های دکتری

- استاد راهنمای ۲ رساله دکتری، خانم ثریا ابراهیمی (تاریخ دفاع: تیر ۱۳۹۸)، آقای فرزاد خرمی (تاریخ دفاع: مهر ۱۴۰۱) و استاد مشاور ۲ رساله دکتری در دانشگاه صنعتی اصفهان (دفاع: ۱۳۹۲) و دانشگاه شهید باهنر کرمان (دفاع: ۱۳۹۸).
- دانشجویان دکتری در حال فعالیت: ۱- سید محمد ترابی ۲- فاطمه فتاحی ۳- فاطمه السادات بلادی ۴- هادی زارع پور
- راهنمایی یک دانشجوی دکتری دانشگاه شهید چمران اهواز در قالب **فرصت مطالعاتی ۶ ماهه داخل**، آبان ۹۹.

پ۴-۳) همکاری با گروه تحقیقاتی دکتر نجفی- دکتر علوی در دانشگاه صنعتی اصفهان:

استاد راهنمای مشترک یک پایان نامه کارشناسی ارشد و مشاور یک رساله دکترا؛ این دو پروژه در زمینه شبیه سازی دینامیک مولکولی از فروردین ۱۳۸۹ در دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان آغاز گردید. دانشجوی کارشناسی ارشد در اسفند ۱۳۹۰ و دانشجوی دکترا در آذر ۱۳۹۲ از پایان نامه خود دفاع نمودند:

1- Mostafa Fakhraee, M.Sc. Student in IUT, joint with Prof. Bijan Najafi; June 2010-March 2012.
2- Hamid Mosaddeghi, Ph.D. Student in IUT, joint with Prof. Bijan Najafi & Prof. Saman Alavi as supervisors; Dr. Kowsari as advisor January 2010-December 2013.

حاصل این همکاری‌ها چاپ چهار مقاله در انتشارات ACS و AIP بوده است.

پ۴-۴) همکاری با گروه تحقیقاتی دکتر صفایی در دانشکده شیمی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان:

همکاری با گروه تحقیقاتی دکتر صفایی در جهت مطالعه ساختار کمپلکس‌های سنتزی در گروه ایشان با انجام محاسبات کوانتومی که نتیجه این همکاری چاپ دو مقاله در مجله‌های *Polyhedron* و *Journal of Molecular Structure* متعلق به انتشارات *Elsevier* در سال ۲۰۱۲ بوده است.

پ۴-۵) همکاری با گروه تحقیقاتی دکتر محبی در دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه شهید باهنر کرمان:

مشاور یک رساله دکتری مهندسی شیمی در دانشگاه شهید باهنر کرمان با موضوع شبیه سازی مایعات یونی و بررسی امکان کاربرد مایعات یونی در استخراج فلزات سنگین که نتیجه آن چاپ دو مقاله در مجله *Journal of Molecular Liquid* و *Theoretical Chemistry Accounts* در سال ۲۰۱۷ و ۲۰۱۹ بوده است.

پ۴-۶) همکاری با گروه تحقیقاتی دکتر نیک فرجام در دانشکده شیمی:

آغاز همکاری با گروه تحقیقاتی دکتر نیک فرجام از اواخر تابستان ۹۹ و در جهت **شبیه سازی و تعیین برهمکنش مایعات یونی در شکل مونومری یا پلیمری به عنوان عوامل ضد باکتری در تماس با غشای سلولی** است که تکمیل کننده‌ی بخش تجربی در گروه ایشان خواهد بود. مشاوره‌ی یک پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی پلیمر نیز در حال انجام است.

پ۴-۷) شروع همکاری با گروه تحقیقاتی **پروفسور ایلیا و دکتر پتکو** از **روسیه** (Nizhny Novgorod State (Technical University

پ۵) داوری پایان نامه‌های کارشناسی ارشد و دکتری

در طول ۱۳ سال گذشته (از مهر ۸۹ تاکنون) داوری بیش از ۳۰ پایان نامه کارشناسی ارشد و ۱۰ رساله دکتری انجام شد.

پ۶) مجری طرح‌های پژوهشی، گرنت، داوری و نظارت بر طرح های پژوهشی و داوری مقالات مجلات بین المللی

۱- مجری طرح‌های پژوهشی سالانه متعدد از سال ۱۳۹۱ تاکنون زیر نظر شورای پژوهشی دانشگاه با موضوع شبیه سازی فرایند ذوب مایعات یونی، شبیه سازی فرایند گیراندازی کربن دی‌اکسید در مایعات یونی، شبیه سازی مخلوطهای دوتایی مایعات یونی و ... .

۲- شش مورد داوری طرح پژوهشی و دو مورد نظارت بر طرح‌های پژوهشی (با شماره های ۹۱۰۵۸۱۰۲ و ۹۵۸۴۹۰۲۰) به درخواست صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور

۳-مجری طرح پژوهشی مصوب صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور در زمینه گیراندازی گاز کربن دی‌اکسید در مایعات یونی دارای گروه عامل آمینی، شماره طرح ۹۱۰۰۰۲۵۵، درصد پیشرفت ۱۰۰٪. مبلغ حمایت ۷ میلیون تومان.

۴- داوری مقالات متعدد به درخواست مجلات معتبر بین‌المللی از انتشاراتی نظیر ACS، RSC، Elsevier و ... :

Physical Chemistry Chemical Physics	Microporous and Mesoporous Materials
Industrial & Engineering Chemistry Research	Langmuir
International Journal of Hydrogen Energy	Journal of Molecular Liquids
Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers	Zeitschrift für Naturforschung A
Science Bulletin	Adsorption
Journal of Physical Chemistry B	Physical Chemistry Research

همچنین ۷ مورد داوری مقالات علمی-پژوهشی به درخواست نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران صورت پذیرفته است.

۵- داوری کتاب "بصری سازی و آنالیز نتایج شبیه سازی های دینامیک مواکولی" به درخواست معاونت پژوهش و فناوری و انتشارات دانشگاه اصفهان در آذر ۹۹.

۶- مسئول و مجری طرح پیشنهادی در قالب **طرح بین المللی مشترک ایران-روسیه** صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور، داوری تابستان ۹۹ با موضوع **شیرین سازی گاز طبیعی با استفاده از مایعات یونی** که متاسفانه علی رغم نظر مثبت داوری، در اولویت قرار نگرفت.

۷- مسئول طرح مصوب **پسادکتری** شماره ۹۹۰۲۶۷۷۷ به درخواست سرکار خانم دکتر لیلا توحیدی فر در قالب تفاهم نامه دانشگاه با صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور که در شهریور ۱۴۰۰ قرارداد آن با صندوق منعقد گردید؛ موضوع طرح: **مطالعات دینامیک مولکولی سامانه رسانشی کنترل شده با pH ترکیب دوکسوروبیسین، پاکلی‌تاکسل و متوترکسات بر پایه نانولوله کربنی تک دیواره در درمان سرطان**.

مبلغ حمایت از طرح پسادکتری ۹۰ میلیون تومان بوده است که ۸۰ میلیون آن حق الزحمه پژوهشگر پسادکتری است و از کل مبلغ طرح، تامین ۶۰ میلیون تومان آن با صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران است. انجام طرح مذکور تمام شده و در مرحله نوشتن دو مقاله ISI بر مبنای یافته‌های طرح هستیم.

۸- مسئول طرح خاتمه یافته گرنت جوانه (کد پارسا: ۱۵۰۰۰۲۰۰۰۸۸۳) بر مبنای موضوع یک رساله دکتری در زمینه شبیه سازی فرآیند شیرین‌سازی گاز طبیعی با استفاده از ترکیبات بر پایه کولین-کلرید و ... که با حمایت پارک علم و فناوری دانشگاه و معاونت پژوهشی وزارت علوم، در سال ۱۴۰۰-۱۴۰۱ انجام شد. مبلغ حمایت ۶۰ میلیون تومان.

۶- سایر فعالیت های شغلی، علمی-اجرایی

۱- حضور تمام وقت و حتی خارج از وقت اداری در دانشکده و شرکت فعال در جلسه‌های دانشکده و گروه شیمی‌فیزیک و مسئول هماهنگی و نماینده گروه شیمی فیزیک از بدو ورود به مدت دو سال و در ادامه از آذر ۹۴ تاکنون.

۲- مشارکت فعال در تدوین سرفصل دروس دوره دکتری تخصصی گرایش شیمی فیزیک مطابق با سیستم فصلی و کمک به طراحی و راه اندازی این دوره در دانشکده شیمی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان
۳- طراح سئوالات آزمون سراسری کارشناسی ارشد سال ۹۱ از سوی سازمان سنجش
۴- مسئول برگزاری امتحان جامع دکتری ورودی سال ۹۰ در دانشکده شیمی در آبان ۹۱
۵- نماینده (روابط عمومی) دانشکده شیمی جهت معرفی دانشکده به بازدیدکنندگان در سال ۹۱
۶- شرکت در جلسات متعدد دفاع از پایان‌نامه های ارشد و دکترا به عنوان نماینده دانشگاه از بدو حضور در دانشگاه
۷- کمک به طراحی و ارائه سرفصل فصلی برای دروس رشته تازه تاسیس کارشناسی ارشد نانو شیمی و همکاری در ارائه دو درس شیمی نظری ساختارهای نانو و اصول نانوتکنولوژی
۸- عضو کمسیون موارد خاص استانی از ابتدای آذر ۹۲ به مدت دو سال و شرکت در جلسات این کمسیون در دانشگاه زنجان، عضو کارگروه نظارت بر دانشگاه آزاد و موسسات غیر انتفاعی دفتر نظارت و ارزیابی استان از مهر ۹۴ به مدت دو سال
۹- راه اندازی مستقل و نصب موازی نرم افزارهای شبیه سازی دینامیک مولکولی بر روی سه رایانه‌ی چند هسته‌ای خریداری شده برای محاسبات شبیه سازی در سال‌های ۹۰، ۹۱ و ۹۴ تحت سیستم عامل لینوکس، عضو شورای کامپیوتر دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان از دی ۹۵ تاکنون

۷- شرکت در دوره ها و کارگاه های آموزشی

۱- شرکت کننده در اولین کارگاه آموزشی علوم و فنآوری نانو، ۲و۳ خرداد ۱۳۸۱ در دانشگاه کاشان
۲- شرکت کننده در کارگاه آموزشی کوانتوم شیمی، ۲۶-۱۷ مرداد ۱۳۸۱ در دانشگاه شیراز
۳- شرکت کننده در کارگاه آموزشی شبیه سازی دینامیک مولکولی، ۲۴-۲۱ اسفند ۱۳۸۳ در دانشگاه صنعتی اصفهان
۴- شرکت کننده در کارگاه آموزشی شبیه سازی دینامیک مولکولی، ۲۵-۲۲ آذر ۱۳۸۴ در دانشگاه صنعتی اصفهان و کمک در بخش عملی آن
۵- شرکت کننده در کارگاه آموزش بسته محاسباتی Wien2k ، بهمن ۱۳۸۴ در دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان
۶- شرکت کننده در کارگاه آموزشی آشنایی با سیستم عامل لینوکس و کاربرد آن در آموزش عالی، ۱۱ اسفند ۱۳۸۴ در دانشگاه صنعتی اصفهان
۷- شرکت کننده در کارگاه آموزش پیشرفته بسته محاسباتی PWSCF , ۲۵-۲۳ بهمن ۱۳۸۶ در دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی اصفهان
۸- شرکت در همایش یک روزه بیوفیزیک و بیوانفورماتیک بیماری دیابت با رویکرد آمیلوییدی در دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان در ۲۷ دی ماه ۱۳۸۹
۹- شرکت‌کننده در دومین کارگاه شیمی نظری و محاسباتی در پژوهشگاه شیمی و مهندسی شیمی ایران در دی ۱۳۹۱
۱۰- شرکت کننده در دوره آموزشی شبیه سازی دینامیک مولکولی با استفاده از بسته محاسباتی Lammps در پارک علم و فناوری امام خمینی قزوین در اردیبهشت ۱۳۹۲
۱۱- شرکت در پانزدهمین کنفرانس شیمی فیزیک ایران در دانشگاه تهران در شهریور ۱۳۹۱ به همراه ارائه سخنرانی و همکاری در برگزاری به عنوان رئیس یکی از جلسات
۱۲- عضو کمیته علمی و اجرایی برگزاری پنجمین کارگاه شیمی نظری و محاسباتی در دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان در بهمن ۱۳۹۴
۱۳- شرکت در هشتمین کارگاه شیمی نظری و محاسباتی در دانشگاه صنعتی اصفهان در اسفند ۱۳۹۷ به عنوان سخنران مدعو

۱۴- شرکت در بیست و دومین کنفرانس شیمی فیزیک ایران در دانشگاه زنجان در مرداد ۹۸ به همراه ارائه سخنرانی و همکاری در برگزاری به عنوان رئیس یکی از جلسات؛ میهمان ویژه در میزگرد تخصصی "چالش های آموزشی و پژوهشی شیمی فیزیک" در کنفرانس مذکور

۱۵- شرکت برخط در کارگاه آموزشی ICTP-SISSA-CECAM 2020 با موضوع دینامیک مولکولی و کاربردهای آن در سامانه های بیولوژیکی در ۳۱ شهریور-۴ مهر ۹۹، برگزارکننده اصلی: ایتالیا، ICTP

۱۶- شرکت برخط در کارگاه‌های هفته آموزش (CCPBioSim Training Week 2020) با موضوع شبیه سازی‌های مولکول‌های زیستی زیر نظر Science & Technology Facilities Council (STFC) انگلیس در ۱۱-۱۸ مهر ۹۹

۱۷- شرکت در همایش‌ها و کنفرانس‌های ملی متعدد برگزار شده در دانشگاه نظیر گردهمایی‌های فیزیک ماده چگال و همایش منطقه‌ای تغییر اقلیم و گرمایش جهانی زمین به همراه ارایه سخنرانی و پوستر.

علاوه بر دوره های مذکور دوره فشرده فنون و مهارت های تدریس را نیز در آموزش و پرورش گذرانده ام.

۸- مهارت‌های محاسباتی و رایانه‌ای

- Working with the Linux operating system environments and multiprocessor clusters, familiar with installation of programs in Linux machines.
- Classical molecular dynamics simulations of various systems with the available simulation packages such as DL_POLY in the serial and parallel conditions. Skills on constructed simulation input files for the solid and liquid state simulations. Start working with AMBER, GROMACS and NAMD simulation package for simulation of biological systems.
- Writing or modifying simple Fortran programs for the analysis of MD simulations.
- Work ability with Mercury, Molden, Molekel, RasMol, Packmol, Aten, Travis, and VMD molecular graphical and trajectory analysis codes in Windows and Linux; Working with Xmgrace and other software for preparing high quality numerical graphs.
- Work ability with Mathematical programs such as Maple, Matlab, and Mathematica.
- Some experience in use of Gaussian 03/09 suite of programs and AMBER code for optimization of structures and extracted the atomic partial charges (force field parameters) necessary for MD simulations.

۹- معرفان علمی

۱- دکتر سامان علوی، ارزیاب ارشد مواد نفتی در بهداشت کانادا، استاد همبسته شیمی دانشگاه برتیش کلمبیا و دانشگاه آتاوا، کانادا: saman.alavi@nrc.ca تلفن: ۰۰۱۶۱۳۲۶۵۵۳۳۵

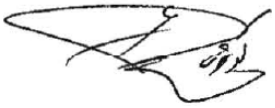
۲- دکتر بیژن نجفی، استاد بازنشسته شیمی دانشگاه صنعتی اصفهان:
najafi@cc.iut.ac.ir تلفن: ۰۹۱۳۲۱۳۱۱۵۹

۳- دکتر غلامعباس پارسافر، استاد بازنشسته شیمی دانشگاه صنعتی شریف:
parsafar@sharif.edu و g.parsafar@gmail.com

۴- دکتر محمود اشرفی زاده، استاد مکانیک و مدیر مرکز ابر رایانش ملی در دانشگاه صنعتی اصفهان:
mahmud@cc.iut.ac.ir تلفن: ۰۳۱۳۳۹۱۳۹۱۹

۵- دکتر علی محبی، استاد دانشکده مهندسی شیمی دانشگاه شهید باهنر کرمان
amohebbi@uk.ac.ir تلفن: ۰۹۱۳۳۴۱۷۴۹۹

آدرس : زنجان- گاوازنگ- دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان - دانشکده شیمی و پژوهشکده تغییر اقلیم و گرمایش زمین- تلفن: ۰۲۴۳۳۱۵۲۲۵۸ شماره همراه: ۰۹۱۳۱۲۹۵۵۹۸ رایانامه: mhkowsari@iasbs.ac.ir



محمد حسین کوثری ۱۴۰۳/۷/۱۲