به روز شده در ۱۳۹۷/۱۲/۱

بسمه تعالی

مشخصات فردی، سوابق اجرائی و پژوهشی مسعود درویش گنجی

دانشیار گروه نانوشیمی دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم پزشکی آزاد تهران

۱. مشخصات فردی:

نام و نام خانوادگی: مسعود درویش گنجی، متاهل (دو فرزند)، کدملی: ۲۰۶۱۱۰۰۵۲۱

محل کار: دانشگاه آزاد اسلامی واحد پزشکی آزاد تهران ، خیابان شریعتی روبه روی ایستگاه متروی قلهک، ابتدای خیابان یخچال، دانشکده شیمی دارویی

E-mail :

ganji_md@yahoo.com
ganji.masoud@gmail.com

Profile: http://chemistry.iautmu.ac.ir/fa

۲. سوابق تحصیلی:

دکتری تخصصی: شیمی فیزیک - دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم تحقیقات تهران ۱۳۸۷

کارشناسی ارشد: شیمی فیزیک - دانشگاه مازندران ۱۳۸۲

کارشناسی: شیمی - دانشگاه فردوسی مشهد ۱۳۷۸

۳. سوابق آموزشی و پژوهشی:

* عضو هیات علمی تمام وقت دانشگاه آزاد اسلامی واحد قائم شهر (استادیار پایه ۱۰)
* **تدریس دروس** شیمی در مقاطع کارشناسی و کارشناسی ارشد و دکتری (از سال ۱۳۸۳ تا کنون)،

شیمی عمومی ۱ و ۲ - شیمی فیزیک ۱ و ۲ - شیمی کوانتم ۱ و ۲ – کامپیوتر در شیمی- شیمی فیزیک پیشرفته- نانوتکنولوژی - مباحث نوین در شیمی فیزیک – شیمی نظری ساختارهای نانو – شیمی کوانتم ۳

۴. افتخارات:

* **دانشجوی ممتاز**: دوره کارشناسی
* **دانشجوی ممتاز**: دوره کارشناسی ارشد
* **کسب عنوان شانزدهم پژوهشگر برتر فناوری نانوی کشور در سال ۸۸**
* کسب عنوان مقاله-داغ (Top-Hottest Article) سال ۲۰۰۸ - نشریه Elsevier
* کسب عنوان مولف پراستناد (Top-Cited Author) سال ۲۰۱۱ - نشریه Elsevier
* **پژوهشگر برگزیده دانشگاه آزاد اسلامی واحد قائم شهر - سالهای ۱۳۸۸ تا** ۱۳۹۳
* **عضو کمیته ستاد فناوری نانوی دانشگاه آزاد اسلامی - از سال ۱۳۹۴**

۵. زمینه تخصصی:

i) شبیه سازی دینامیک مولکولی و محاسبات کوانتمی خواص، فرایندهای فیزیکی و شیمیایی نانو سامانه ها
ii) نانو الکترونیک مولکولی
iii) نانو غشاها - نمک زدایی آب، تصفیه آب، جداسازی گازها
iv) نانو ماشینها
v) انرژی های نوین - سلول خورشیدی، پیل سوختی، هیدروژنی، باتری لیتیمی
vi) نانو کامپوزیت ها
vii) نانو حسگرها
viii) رسانش دارو
ix) نانوکاتالیست

*** روش های محاسبات کوانتمی و شبیه سازی کلاسیکی:**

* Quantum Chemistry (MP2, B3LYP and Semi-empirical)
* Quantum Physics (Periodic Density Functional Theory (DFT))
* Time-Dependent Density Functional Theory (TDDFT),
* Molecular Dynamics Simulation (EMD & NEMD),
* *ab initio* Molecular Dynamics Simulation (*ab initio* MD).
* Monte Carlo (GCMC)

*** نرم افزارهای تخصصی محاسبات کوانتمی و شبیه سازی:**

1- **SMEAGOL** (Spin and Molecular Electronics in an Atomically-Generated Orbital Landscape, DFT-NEGF Method, www.smeagol.tcd.ie)
2- **SIESTA** (DFT Code, Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms –Linear Combination of Atomic Orbitals & (O)N methods)
3- **DFTB+** (Density Functional based Tight Binding method)
4- **GULP** (General Utility Lattice Program, MD and GCMC Simulation)
5- **Octopus** (Time-Dependent Density Functional Theory program (TDDFT), www.tddft.org)
6- **OpenMX**, Linear Combination of Atomic Orbitals; LCAO)
7- **Gaussian** (Quantum Chemistry Software)
8- **ORCA** (Quantum Chemistry Software)
9- **FireFly** (Quantum Chemistry Software)
10- **LAMMPS** (EMD & NEMD Simulation)
11- **Hyperchem** (Modeling and Quantum Chemistry Software)

*** زبان برنامه نویسی :**

Programming Language: Fortran.

۶. افتخارات و جوایز:

1- Top-Cited Author (2008 – Elsevier publisher: Phys. Lett. A)
2- Distinguished researcher of Islamic Azad University – Qaemshahr Branch (2009).
3- Distinguished researcher of 3nd Nanotechnology Festival - Islamic Azad University (2016).
4- Top paper in Nano-calculations of 3nd Nanotechnology Festival - Islamic Azad University (2016).

~~~
~~~

۸. شرکت در کنفرانسهای بین المللی :

بیش از ۱۰۰ دعوتنامه برای سخنرانی در کنفرانسهای بین المللی معتبر از کشورهای آمریکا ، انگلستان ، آلمان ، فرانسه ، چین ، پرتغال ، سوئد ، هلند و ... .

~~~
~~~

Materials Chemistry and Physics 199 (2017) 597-608

M. Darvish Ganji * and Razieh Dodangeh,
"Hydrogen purification performance of nanopores hexagonal boron nitride membrane: Molecular dynamics and firstprinciple simulations"
Phys.Chem.Chem.Phys., 19 (2017) 12032.

F. Moradi, **M. Darvish Ganji*** and Y. Sarrafi,
"Tunable phenol remediation from wastewater using SWCNT-based, sub-nanometer porous membranes: reactive molecular dynamics simulations and DFT calculations"
Phys Chem Chem Phys, 19 (2017) 8388.

H. Tavassoli Larijani, M. Jahanshahi, **M. Darvish Ganji *,** and M. H. Kiani,
"Computational studies on the interactions of glycine amino acid with graphene, h-BN and h-SiC monolayers"
Phys Chem Chem Phys, 19 (2017) 1896.

S. Seyfi, R. Alizadeh, **M. Darvish Ganji***, V. Amani
"Molecular, electronic structure and spectroscopic properties of 6, 60-dimethyl-2,20-bipyridine and HgI2 complex: Experimental and DFT investigations"
Vacuum 139 (2017) 9e22

Z. Izakmehri, **M. Darvish Ganji** and M. Ardjmand
"Adsorption of 2, 3, 7, 8-tetrachlorodibenzo-p-dioxin (TCDD) on pristine, defected and Al-doped carbon nanotube: A dispersion corrected DFT study"
Vacuum 136 (2017) 51-59.

Heshmatollah Alinezhad, Masoud Darvish Ganji, Elham Soleymani, Mahmood Tajbakhsh
" A comprehensive theoretical investigation about the bio-functionalization capability of single walled CNT, BNNT and SiCNT using DNA/RNA nucleobases"
Applied Surface Science 422 (2017) 56–72

Masoud Darvish Ganji, Fahimeh Bonyasi, Sepideh Tanreh, Mahyar Rezvani, Malak Hekmati,
"Encapsulation of Methane Molecules into C60 Fullerene Nanocage: DFT and DTFB-MD Simulations"
J. Nanoanalysis., 4(2): 159-168 Summer 2017

2016

M. Darvish Ganji*, Z.Dalirandeh, M.Khorasani
"Lithium absorption on single-walled boron nitride, aluminum nitride, silicon carbide and carbon nanotubes: A first-principles study"
Journal of Physics and Chemistry of Solids, 90(2016)27–34.

M. DarvishGanji*, R.Agheb, H.Darvish Ganji, S.Ashrafian
"First principles computational investigation on the possibility of Pt-decorated SiC hexagonal sheet as a suitable material for oxygen"
Journal of Physics and Chemistry of Solids, 88(2016)47–53.

M. Rezvani, **M. Darvish Ganji***, S. Jameh-Bozorghi
"Structural and electronic properties of metalloporphyrin (MP, M = Fe,Co and Zn) adsorbed on single walled BNNT and SiCNTM"
Applied Surface Science, 360 (2016) 69–76.

M. DarvishGanji*, M.Tajbakhsh*, M.Kariminasab, H.Alinezhad
"Tuning the LUMO level of organic photovoltaic solar cells by conjugately fusing graphene flake: A DFT-B3LYP study"
Physica E, 81(2016)108–115.

M. Ghorbanzadeh Ahangari, **M.DarvishGanji***, A.Jalali
"Interaction between fullerene-wheeled nanocar and gold substrate: A DFT study"
Physica E, 83 (2016)174–179.

M. Darvish Ganji*
"Computational Design of Multi-States Monomolecular Device Using Molecular Hydrogen and C20 Isomers1"
Physics of the Solid State, 58 (2016)1476–1482.

M.D. Ganji*, S. Jameh-Bozorgi, M. Rezvani
A comparative study of structural and electronic properties of formaldehyde molecule on monolayer honeycomb structures basedon vdW-DF prospective
Applied Surface Science, 384 (2016) 175–181.

2015

H. Tavassoli Larijani, M. Darvish Ganji*, M. Jahanshahi
"Trends of amino acid adsorption onto graphene and graphene oxide surfaces: a dispersion corrected DFT study"
RSC Adv., 2015, 5, 92843

F. Memarian, A. Fereidoon, M. Darvish Ganji*
Graphene Young's modulus: Molecular mechanics and DFT treatments Superlattices and Microstructures. 85 (2015) 348–356.

A. Fereidoon, M. Mostafaei, **M. Darvish Ganji ***, F. Memarian*
"Atomistic simulations on the influence of diameter, number of walls, interlayer distance and temperature on the mechanical properties of BNNTs"
Superlattices Microstruct. 86 (2015) 126–133.

Masoud Darvish Ganji *, Hoda Mazaheri, Azadeh Khosravi
"Acetone adsorption on pristine and Pt-doped graphene: A first-principles vdW-DF study"
Comm. Theor. Phys. 64 (2015) 576–582.

A. Fereidoon, M. khorasani, **M. Darvish Ganji *** and F. Memarian*
"Atomistic simulation study of mechanical properties of periodic graphene nanobuds"
Comp. Mat. Sci. 107 (2015) 163–169.

S. Ashrafian, **Masoud Darvish Ganji ***, M. Jahanshahi, R. Agheb and
"Greatly enhanced adsorption of platinum on periodic graphene nanobuds: A first-principles study"
App. Surf. Sci. 351 (2015) 1105–1115.

M. Darvish Ganji *, S. M. Hosseini-khah and Z. Amini-tabar
"Theoretical insight into hydrogen adsorption on graphene: a first-princilpes B3LYP-D3 study"
Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2015) 2504-2511.

Masoud Darvish Ganji *, S. N. Emami, M. Abbasi and A. Khosravi
"Si-decorated graphene as potential media for hydrogen adsorption: a DFT study"
App. Surf. Sci. 332 (2015) 105–111

M. Darvish Ganji *, H. Alinezhad *, E. Soleimani and M. Tajbakhsh
"Adsorption of TCDD molecule onto boron nitride nanotubes: ab initio van der Waals Density-Functional study"
Physica E. 67 (2015) 105–111.

Z. Izakmehri, M. Ardjmand, **M. Darvish Ganji,*** E. Babanezhadd and A. Heydarinasab
"Removal of dioxane pollutants from water by using Al-doped single walled carbon nanotubes"
RSC Adv. 5 (2015) 48124–48132.

M. Darvish Ganji *, M. Shokri, R. Alizadeh and M. Khademaboulfazli
"Structural and electronic properties of supramolecular C60:Ru(II)(bipy)3:C60 triad: ab initio vdW-DF based molecular dynamics simulation "
Physica E. 69 (2015) 384–393.

M. Ghorbanzadeh Ahangari, **M.D.Ganji***, F.Montazar
Mechanical and electronic properties of carbon nanobuds: First-principles study
Solid State Communications. 203(2015)58–62.

M.Ahmadnezhad, **M.DarvishGanji***, M.Rezvani
Theoretical studies on the geometrical and electronic structures of supramoleculebis(2,2′-bipyridine)-5-amino-1,10-phenanthrolineru- thenium(II)/functionalized SWCNTdyads
Journal of Physics and Chemistry of Solids. 86 (2015) 148–154.

2014

M. Darvish Ganji *, M. Gholian and S. Mohammadzadeh
"Structural, energetic and electrical properties of boron nitride nanotubes interacting with DMMP chemical agent"
Applied Surface Science 314 (2014) 575–580

Masoud Darvish Ganji *, M. Ghorbanzadeh and S. M. Ememi
"Carborane-wheeled nanocar moving on graphene/graphyne surfaces: van der Waals corrected density functional theory study"
Mat Chem Phys 148, (2014) 435–443

M.D. Ganji, N. Sharifi, M. Ghorbanzadeh Ahangari*, A. Khosravi
"Density functional theory calculations of Hydrogen molecule adsorption on monolayermolybdenum andtungsten disulfide"
Physica E, 57 (2014) 28–34.

A. Khosravi, A. Fereidoon, M. Ghorbanzadeh Ahangari, M. D. Ganji * and S. N. Emami
"First-principles vdW-DF study on the enhanced hydrogen storage capacity of Pt-adsorbed graphene"
J Mol Model 20 (2014) 2230.

Masoud Darvish Ganji *, M. Ghorbanzadeh and Azadeh Khosravi
"Doping of carbon nanotubes with aluminum atom to improve Pt adsorption"
App Surf Sci 290 (2014) 86– 91.

Masoud Darvish Ganji *, Zihab Sohbatzadeh and Azadeh Khosravi
"Spin-dependent transport characteristics of Fe met-cars"
Struc Chem (In Press) DOI 10.1007/s11224-013-0328-8.

M. Darvish Ganji, N. Sharifi, A. Fereidoon, M. Ghorbanzadeh Ahangari *
"Electronic and mechanical properties of Group III (B, Al, Ga) nitride nanotubes under epoxy monomer interaction: A DFT study"
Superlattices Microstructures 67 (2014) 127–143.

2013

Fatemeh Emami and Masoud Darvish Ganji *
"Periodic graphene nanobuds: A novel Li-storage material"
Mat Chem. Phys. 142 (2013) 44-51.

Masoud Darvish Ganji and Nasim Danesh
"Adsorption of H_2S molecule by cucurbit[7]urils: An *ab initio* vdW-DF study"
RSC Adv. 3 (2013) 22031–22038.

M. Darvish Ganji *, F. Emami
"Simulation for adsorption of glucose molecule by Pt adsorbed single walled carbon nanotubes using first-principles vdW-DF method"
Full Nanotube Carbon Nano (In Press) (2013)

M. Darvish Ganji *, A. Bakhshandeh
"Electronics and structural properties of single-walled carbon nanotubes interacting with a glucose molecule: *ab initio* calculations"
Commun. Theor. Phys. 60 (2013) 341–347.

Mahsa Sabet and **M. Darvish Ganji ***
"Simulations on the possibility of formation of complexes between fluorouracil drug and cucurbit[n]urils: ab initio van der Waals DFT study"

J Mol Model 19 (2013) 4013–4023.

Narges Sharifi, Mahdi Ardjmand, M. Ghorbanzadeh Ahangari, M. Darvish Ganji *
"Si-decorated graphene: a superior media for lithium-ions storage"
Struct Chem 24 (2013) 1473–1483.

Behrooz Abbaszadeh and M. Darvish Ganji *
"Electrical characteristics of C_{36} molecular conductor and its B- and N-doped isomers"
Elec Mat Lett. 9(1) (2013) 63-69.

Mahyar Rezvani, Masoud Darvish Ganji * and M. Faghihnasiri
"Encapsulation of lamivudine into single walled carbon nanotubes: a DFT study"
Physica E 52 (2013) 27–33.

M. D. Ganji, A. Boshra and A. Bakhshandeh
"Spin polarization of electrons in encapsulated B24N24 nanocage: A density functional theory investigation"
J. Comp. Theor. Nanosci. 10 (2013) 1–6.

M.D. Ganji, A. Fereidoon, M. Jahanshahi, M. Ghorbanzadeh Ahangari *
"Electronic and mechanical properties of single-walled carbon nanotubes interacting with epoxy: A DFT study"
Physica E 48 (2013) 148–156.

Masoud Bezi Javan, Masoud Darvish Ganji *
"Theoretical investigation on the encapsulation of atomic hydrogen into heterofullerene nanocages"
Curr App Phys 13 (2013) 1525-1531.

M. D. Ganji *, M. Rezvany
"Boron nitride nanotube based nano-sensor for acetone adsorption: a DFT simulation"
J Mol Model 19 (2013) 1259–1265.

Masoud Darvish Ganji, Maryam Mohseni and A. Bakhshandeh
"Simple benzene derivatives adsorption on defective single-walled carbon nanotubes: a first-principles van der Waals density functional study "
J Molec Model 19 (2013) 1059–1067.

M. D. Ganji *, M. Nashtahosseini, S. Yeganegi and and M. Rezvani
"First-principles investigation on the interaction between oxazepam molecule and C_{60} fullerene"
J Mol Model. 19 (2013) 1929–1936.

M Ghorbanzadeh Ahangari, A Fereidoon and M Darvish Ganji *
"Density functional theory based molecular dynamics simulation study on bulk modulus of multi-shell fullerenes"
Physica B 423 (2013) 1 – 5.

2012

M. D. Ganji, N. Sharifi, M. Ardjmand, M. Ghorbanzadeh Ahangari
"Pt-decorated graphene as superior media for H_2S adsorption: a First-principles study"
App Surf Sci 261 (2012) 697– 704.

Masoud Darvish Ganji *, A. Fereidoon , Azadeh Khosravi , Nasim Ahmadian, Sanaz Mohammad zadeh
" Adsorption of hydrogen molecules onto Li-decorated Titanium Met-car cluster: a first-principles study "
Physica E 46 (2012) 193–197.

M. D. Ganji
"Azopyridine molecule: a superior device for molecular switch technology"
Elec Mat Lett. 8(6) (2012) 565-570.

M. D. Ganji, A. Fereidoon, M. Jahanshahi, M. Ghorbanzadeh Ahangari *
" Elastic properties of SWCNTs with curved morphology: Density functional tight binding based treatment"
Solid State Commun. 152 (2012) 1526–1530.

Behrooz Abbaszadeh and M. D. Ganji

"First-principles study on the current-voltage characteristics of $B_{24}N_{24}$ fullerene-like nanocage"
Mol Sim (In Press) DOI: 10.1080/08927022.2013.803101.

Nasim Ahmadian, Masoud Darvish Ganji * and Mozayyan Laffafchy
" Theoretical investigation of nerve agent DMMP adsorption onto defected single walled carbon nanotube "
Mat Chem. Phys. 135 (2012) 569e574.

Nasim Ahmadian, Masoud Darvish Ganji * and Ghasem Valizadeh
" Theoretical investigation of the interaction between Al-decorated C_{60} fullerene and glycine amino acid: density functional calculations"
J. Comp. Theor. Nanosci. 9 (2012) 1–5.

M.D. Ganji, A. Fereidoon, M. Ghorbanzadeh Ahangari
" Investigation of the mechanical properties of multi-walled carbon nanotubes using density functional theory calculations"
J. Comp. Theor. Nanosci. 9 (2012) 980-985.

A. Fereidoon, M. Ghorbanzadeh Ahangari and M. D. Ganji
Density functional theory investigation of the mechanical properties of single-walled carbon nanotubes
Comp. Mat. Sci. 53 (2012) 377–381.

2011

M. D. Ganji, M. Mousavy, M. Rezvani
On the encapsulation of azafullerenes inside the single-walled carbon nanotubes: Density-functional theory based treatments
Physica B 406 (2011) 1561–1566.

M. D. Ganji, B. Abbaszadeh, B. Ahaz
Hydrogen incorporation into BN fullerene-like nanostructures: A first-principles study
Physica E 44 (2011) 290–297.

M. D. Ganji, N. Seyed-aghaei; M. M. Taghavi; M. Rezvani; F. Kazempour
Ammonia Adsorption on SiC Nanotubes: A Density Functional Theory Investigation
Full., Nanotubes, Carbon Nanost., 19 (2011) 289–299.

M. D. Ganji and A. Bakhshandeh
Functionalized single–walled carbon nanotubes interacting with glycine amino acid: DFT study
Physica B 406 (2011) 4453–4459.

M. D., Ganji; Gh., Valizadeh; Jahan-tigh, M.
"Hydrogen storage capacity of C_{120} nanocapsules: Density functional theory based treatments"
Comm. Theor. Phys. 55(3) (2011) 519-526.

M. D. Ganji, M. Mousavi and M. Rezvani
"On the encapsulation of azafullerenes inside the single-walled carbon nanotubes: density-functional theory based treatments"
Physica B 406 (2011) 1561–1566.

M. D. Ganji, M. Goodarzi and A. Mommadi-nejad
"Theoretical studies on the interaction between methanol and functionalized single-walled carbon nanotubes"
Comm. Theor. Phys. 55 (2011) 365–370.

M. D. Ganji, M. Goodarzi, and H. A. Khorrami,
"Molecular Hydrogen Interacting with Si-, S- and P-doped C60 Fullerenes and Carbon Nanotube"
J. Comp. Theor. Nanosci. 8 (2011) 120.

M. D. Ganji, M. Shokry and S. Mahmoudy
"Interaction between methanol and single-walled carbon nanotubes: a density functional theory study"
Physica B 406 (2011) 1295–1299.

M. D. Ganji, M. Rezvani, M. Shokry and A. Mirnejad
"*First-principles* investigation on the formation of endohedral complexes between CH_4 molecules and Si_{60}

fullerene nanocage"
Full., Nanotubes, Carbon Nanost., 19 (2011) 421–428.

M. D. Ganji
“Electrical characterization of titanium met-cars molecular wires: theoretical study”,
J. Comp. Theor. Nanoscience 8 (2011) 12.

2010

M. D. Ganji, M. Tajbakhsh and M. Laffafchy,
"Nerve agents interacting with single wall carbon nanotubes: Density functional calculations"
Solid State Sci. 12 (2010) 1547.

M. D. Ganji
“Calculation of encapsulation of nucleic acid bases inside single-walled carbon nanotubes: a density functional theory treatment”,
Full., Nanotubes Carbon Nanost., 18 (2010) 24–36.

M. D. Ganji , M. Ghorbanzadeh, M. Negaresh, A. A. Najafi, M. Rezvani and M. Shokry
"First-principles investigations on the feasibility of the boron nitride fullerene-like $B_{36}N_{36}$ for natural gas storage"
J. Comp. Theor. Nanosci. 18 (2010) 46.

M. D. Ganji and A. Najafi
"Theoretical investigation of the adsorption of natural gases on boron nitride nanotubes (BNNTs)"
Sci. Technol. Adv. Mater. 11 (2010) 045001.

M. D. Ganji, H. Yazdani and A. Mirnejad
"$B_{36}N_{36}$ fullerene-like nanocages: a novel material for drug delivery"
Physica E 42 (2010) 2184–2189.

M. D. Ganji and B. Ahaz
“ First principles simulation of molecular oxygen adsorption on SiC nanotubes ”,
Comm. Theor. Phys. 53 (2010) 742–748.

M. D. Ganji,
“First principles investigation of the encapsulation of amino acids inside (13, 0) single wall carbon nanotubes”,
Full. Nanotubes Carbon Nanost. 18 (2010) 24–36.

M. D. Ganji and H. Yazdani
" Investigation of the possibility of formation of complexes between B-doped C_{60} fullerene and glycine amino acid"
Chin. Phys. Lett. 27(4) (2010) 043102.

2009

M. D. Ganji, A. Mohseni and O. Goli,
"Modeling complexes of NH_3 molecules confined in C_{60} fullerene",
J. Molec. Struc.: Theochem 913 (2009) 54.

M. D. Ganji and A. Afsari
"Interaction of alkanethiols with single wall carbon nanotubes: First principles calculations"
Physica E 41 (2009) 1696.

M. D. Ganji
“First principles simulation of the encapsulation of molecular hydrogen in C_{120} nanocapsules”,
Physica E 41 (2009) 1433.

M. D. Ganji,
"ab initio investigation of the possibility of formation of endohedral complexes between H_2 molecules and B-, N- and Si-doped C_{60} fullerenes",
Physica E 41 (2009) 1406.

M. D. Ganji,
"Density functional theory based treatment of amino acids adsorption on single-walled carbon nanotubes",
Diamond Related Mater*. 18 (2009) 662. *** Top Cited Author **

2008

M. D. Ganji and A. Mohammadi-nejad,
"Simulation of STM technique for electron transport through boron-nitrid nanotubes",
Phys. Lett. A 372 (2008) 4839-4844.

M. D. Ganji and I. Rungger,
"ab initio Investigation of the Switching Behavior of the Dithiole-Benzene (DTB) Nano-Molecular Wire",
J. Iranian Chem. Soc., 5 (2008) 566-573.

H. Aghaie, M. R. Gholami, M. Monajjemi and M. D. Ganji
"Electron transport phenomenon simulation through the carborane nano-molecular wire",
Physica E, 40 (2008) 2965–2972.

M. D. Ganji, H. Aghaei and M. R. Gholami,
"Design of nanoswitch based on C_{20}-bowl molecules: A first principles study",
Microelectronic Journal, 39 (2008) 1499– 1503.

M. D. Ganji,
"Theoretical study of the adsorption of CO_2 on tungsten carbide nanotubes",
Phys. Lett. A, 372 (2008) 3277–3282.

M. D. Ganji,
"Behavior of a single nitrogen molecule on the pentagon at a carbon nanotube tip: a first-principles study",
Nanotechnology, 19 (2008) 025709 (5pp).

M. D. Ganji and A. Mir-Hashemi,
"ab initio investigation of the I–V characteristics of the butadiene nano-molecular wires: A light-driven molecular switch",
Phys. Lett. A, 372 (2008) 3058–3063.

M. D. Ganji and F. Nourozi,
"Density functional non-equilibrium Green's function (DFT-NEGF) study of the smallest nano-molecular switch",
Physica E, 40 (2008) 2606–2613.

~~~
~~~

طراحی و شبیه سازی نانو سنسورهای مناسب بر پایه نانو لوله های کربنی برای تشخیص گلوگز بیماران دیابتی با استفاده از روش کوانتمی تابع چگالی **(طرح پژوهشی)**	۱۳۹۱	۱۳۹۳	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	
بررسی برهمکنش میان پلاتین و نانو لوله های کربنی تقویت شده با فلزات سبک با استفاده از روش کوانتمی نظریه چگالی **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۸۹	۱۳۹۰	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر محمود تاجبخش
مطالعه کوانتمی فرایند تشکیل کمپلکس میان مولکول ایزونیازید و نانو لوله های کربنی تقویت شده توسط اتم بور **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۸۹	۱۳۹۰	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر محمود تاجبخش
بررسی فرآیند جذب نانو خودرو بر پایه فولرن بر سطح طلا با استفاده از محاسبات کوانتمی تابعیت چگالی **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۹۰	۱۳۹۱	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر نوامه نامی
مطالعه مکانیک کوانتمی ظرفیت ذخیره سازی گاز هیدروژن مولکولی توسط گرافن تقویت شده با اتم های Al، Si، S **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۹۰	۱۳۹۱	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر اسماعیل بابانژاد
بررسی فرآیند جذب گاز شیمیایی عامل اعصاب (DMMP) روی نانو لوله های بورون-نیترید (BNNT) با استفاده از محاسبات کوانتمی تابعیت چگالی **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۹۰	۱۳۹۱	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر مجید مرادیان
مطالعه آغازین افزایش قدرت جذب لیتیوم بر روی گرافن آلاییده شده توسط آلومینیم، سیلیسیم و فسفر **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۹۰	۱۳۹۱	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر اسماعیل بابانژاد
مطالعه برهمکنش نانو لوله کربنی با هیدرازین با استفاده از روش کوانتمی تابعیت چگالی **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۸۹	۱۳۹۰	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر محمود تاجبخش
بررسی فرایند جذب مشتقات بنزن بر روی لبه های نانو لوله های کربنی ته باز با استفاده از روش تابعیت چگالی **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۸۹	۱۳۹۰	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر نوامه نامی
بررسی برهمکنش بین مولکول پاراکروزول و زئولیت ZSM-5 با استفاده از روش نظریه تابعیت چگالی **(پایان-نامه – ارشد)**	۱۳۹۰	۱۳۹۱	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر مجید مرادیان
به کارگیری نانو کپسول های بور-نیتریدی و فولرن های بهینه شده برای رسانش داروی هدفمند با استفاده از شبیه سازی کوانتمی تابع چگالی **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۸۹	۱۳۹۰	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر محمود تاجبخش
مطالعه فرآیند ذخیره سازی گاز متان توسط نانو لوله ها و نانو کپسول های بور-نیترید با استفاده از روش کوانتمی تابع چگالی **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۸۹	۱۳۹۰	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر محمود تاجبخش
بررسی فرآیند جذب لیتیوم توسط نانو غنچه(نانوباد)های گرافن با استفاده از محاسبات کوانتمی تابعیت چگالی **(پایان-نامه – ارشد)**	۱۳۹۱	۱۳۹۲	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر نوامه نامی

مطالعه کوانتمی خواص ساختاری الکتریکی و مکانیکی نانو غنچه های نانو لوله کربنی **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۹۱	۱۳۹۲	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر زینت السادات حسینی
شبیه سازی حرکت نانو ماشین کربو رانی بر روی سطح گرافن با استفاده از محاسبات نظریه تابعیت چگالی **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۹۱	۱۳۹۲	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر مجید مرادیان
نمک زدایی آب با استفاده از نانو-منفذهای گرافن **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۹۲	۱۳۹۳	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر اسماعیل بابانژاد
رسانایی حرارتی نانولوله های تک-جداره سیلکونی با استفاده از روش دینامیک مولکولی کلاسیک **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۹۲	۱۳۹۳	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر نوروزی
ادامه صفحه بعد				
شبیه سازی دینامیک مولکولی بنزن کپسوله شده در نانو لوله های کربنی برای آزادسازی موثر دارو **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۹۲	۱۳۹۳	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر زینت السادات حسینی
مطالعه نظری تشکیل، ساختار و خواص الکترونیکی داروی ضد سرطان اکسالیپلاتین و نانولوله های کربنی تک-جداره	۱۳۹۲	۱۳۹۳	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر محمود تاجبخش
مطالعه MP2 جذب هیدروژن بر روی گرافن **(پایان‌نامه – ارشد)**	۱۳۹۲	۱۳۹۳	دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	دکتر داریوش زارعی
Synthesis and investigation of mechanical, thermal and morphological properties of capsules and self-healing nanocomposites and appointment of mechanical properties of nanocomposite by quantum mechanic **(رساله – دکتری)**	۱۳۸۸	۱۳۹۲	دانشگاه سمنان – دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	Prof. A. Fereidoon – Prof. M. Jahanshahi
Selective adsorption of enantiomer drugs using cyclodextrin functionalized carbon nanotubes and graphene **(رساله – دکتری)**	۱۳۹۴	در حال انجام	دانشگاه مازندران – دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	Prof. H. Alinezhad
Significant enhancement in efficiency of polymer-fullerene solar cells by conjugately fusing graphene flakes **(رساله – دکتری)**	۱۳۹۴	در حال انجام	دانشگاه مازندران – دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	Prof. M. Tajbakhsh
Removal of phenol contaminant from water using carbon nanotubes and cyclodextrine membranes by molecular dynamic simulations **(رساله – دکتری)**	۱۳۹۴	در حال انجام	دانشگاه مازندران – دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	Dr. A. Sarrafi
Molecular dynamic and first-principles simulations on the gas separation performance of porous nanotube and graphene membranes **(رساله – دکتری)**	۱۳۹۴	در حال انجام	دانشگاه سمنان – دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	Dr. H. Fazli
Experimental and DFT simulation study on binding of metal-doped carbon nanotubes with Dioxan **(رساله – دکتری)**	۱۳۹۳	در حال انجام	دانشگاه علوم و تحقیقات تهران – دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	Dr. H. Arjmand
DFT/TDDFT investigation of electronic structures, spectra properties and intramolecular charge transfer and intermolecular double proton transfer in the excited state in water/ethanol solvent of Hg-based dye sensitizers for solar cells **(رساله – دکتری)**	۱۳۹۳	در حال انجام	دانشگاه مازندران – دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	Dr. R. Alizadeh
Monte Carlo simulation and DFT calculations on the hydrogen capacity of BN-/SiC-pillared graphene **(رساله – دکتری)**	۱۳۹۳	در حال انجام	دانشگاه زنجان – دانشگاه آزاد اسلامی	Dr. M. Shadman

			قائم شهر	
Quantum mechanical investigation of structural, electrical and photochemical properties of fullerene-metalloporphyrine dyads and triads supramolecular systems toward enhancement of solar cells efficiency **(رساله - دکتری)**	۱۳۹۳	در حال انجام	دانشگاه علوم و تحقیقات اراک - دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	Prof. M. Jame-bozorgi
Fabrication and investigation of mechanical and shape memory properties of shape memory nanocomposites **(رساله - دکتری)**	۱۳۹۳	در حال انجام	دانشگاه سمنان - دانشگاه آزاد اسلامی قائم شهر	Prof. A. Fereidoon