به نام خدا

مشخصات فردی

نام و نام خانوادگی: علیرضا (افشین) عباسی

تاریخ تولد: ۱۳۵۵

محل تولد: شهرکرد، ایران

ملیت: ایرانی

وضعیت تأهل: متأهل، دارای دو فرزند

آدرس محل سکونت: قم، تقاطع دانیال-فردوسی، خیابان دانیال، آپارتمان اعظم، پلاک سه، طبقه اول

آدرس محل کار: دانشکده علوم، دانشگاه قم،

ایمیل: a.abbasi@qom.ac.ir

تلفن ثابت: ۰۲۵۳۲۱۰۳۰۹۱

تلفن همراه: ۰۹۱۲۸۵۱۴۰۱۲

تحصیلات

۱۳٦۱ - ۱۳٦٦: دبستان مطهری، سورشجان، ایران

۱۳٦٦- ۱۳٦۹: مدرسه راهنمایی ابوذَر، سورشجان، ایران

۱۳٦۹ - ۱۳۷۳: دبیرستان نَواب صفوی، سورشجان، ایران (رشته علوم تجربی)

۱۳۷۳ - ۱۳۷۷ :کارشناسی شیمی، دانشگاه اصفهان (سه نفر اول)

موضوع پایان‌نامه: تولید کلراید کولین

۱۳۷۷ - ۱۳۸۰: کارشناسی ارشد شیمی‌فیزیک، دانشگاه اصفهان (نفر اول)

موضوع پایان‌نامه: مطالعه کوانتومی ساختار، چرخش درون مولکولی و انرژی پتانسیلHPCP

۱۳۸۳ - ۱۳۸۸: دکتری فیزیک، دانشگاه فنی کمنیتس، آلمان

۱۳۸۶–۱۳۸۷: فرصت مطالعاتی، دانشگاه صنعتی مونیخ آلمان

موضوع رساله: جذب مواد آلی بر سطوح فلزی: مطالعه PTCDA و NTCDA بر Ag(۱۱۰)

سوابق شغلی

۱۳۸۹ - تاکنون: عضو هیئت علمی، دانشگاه قم، تدریس دروس مختلف شیمی‌فیزیک، شیمی فیزیک پیشرفته (کارشناسی ارشد)، شیمی کوانتومی، شیمی کوآنتومی ۲ (کارشناسی ارشد) طیف سننجی مولکولی (کارشناسی و کارشناشی ارشد)، ترمودینامیک، شیمی محاسباتی (کارشناشی ارشد)، شیمی عمومی، زبان تخصصی شیمی، ایمنی در آزمایشگاه، مبانی کامپیوتر و برنامه نویسی ، کاربرد رایانه در شیمی، آزمایشگاه های شیمی عمومی و شیمی فیزیک یک و دو.

لینک برخی دروس تدریس شده به صورت آنلاین.

https://www.aparat.com/afshin_ab

۱۳۹۶–۱۳۹۹: مدیر نمایندگی مجتمع فنی تهران در شهرکرد. تدریس دروس زبان آلمانی از سطح A۱ تا B۱

۱۳۸۹ - ۱۳۹۰ :استاد مدعو دانشکده نفت آبادان، تدریس دروس شیمی عمومی، شیمی فیزیک، شیمی تجزیه، آزمایشگاه های شیمی عمومی، شیمی فیزیک و شیمی تجزیه

۱۳۸۸ - ۱۳۸۹:محقق، مؤسسه ماکس پلانک، آلمان، مطالعه خواص مکانیکی آلیاژهای آهن با روشهای محاسباتی

۱۳۸۳ - ۱۳۸۸: پژوهشگر، دانشگاه فنی کمنیتس، مطالعه جذب مولکول‌های آلی بر سطوح فلزی

۱۳۸۰ - ۱۳۸۳: مدرس، دانشگاه آزاد شهرضا، تدریس دروس شیمی عمومی، شیمی فیزیک، مبانی رایانه رشته شیمی و مهندسی شیمی، مبانی اینترنت، آزمایشگاه های شیمی عمومی و شیمی فیزیک

۱۳۸۰ - ۱۳۸۲: معلم، دبیرستان شهداء، سورشجان، تدریس شیمی و رایانه

مهارت‌ها

نرم‌افزارهای شیمی محاسباتی: Gaussian, Turbomole, Siesta, Vasp

مهارت‌های رایانه‌ای: برنامه‌نویسی (Fortran, Pascal),

نرم‌افزارهای ریاضی و گرافیکی: MATLAB, Mathematica, GIMP

زبان‌ها: فارسی (مادری)، انگلیسی (مسلط)، آلمانی (مسلط)، عربی (مقدماتی)

پروژه‌های جاری

مطالعه نظری و عملی باتری های یون لیتومی

بازیافت فلزات گران‌بها از زباله‌های الکترونیکی

انتشارات علمی

لیست مقالات و کنفرانس‌ها موجود است، شامل پژوهش‌های منتشرشده در مجلات معتبر بین‌المللی و کنفرانس‌های علمی.

A .Abbasi, S. S. Samadi,

DFT study on interaction between naproxen and lactic-glycolic acid oligomers.

Advances in Energy and Materials Research (accepted)

A. Abbasi, M. Schreiber, R. Scholz

Influence of dispersion interactions on the adsorption of TCDA on Ag(۱۱۰).

Advances in Energy and Materials Research ۱ (۱), ۱۲-۲۲ (۲۰۲۳)

https://jaem.qom.ac.ir/article_۲۵۵٤.html

M. Kamalian, Y. Seyed Jalili, A. Abbasi

Effect of B, N, Ge, Sn, K doping on electronic-transport properties of (٥, ٠) zigzag carbon nanotube.

Mater. Res. Express ٥ (٤), ٠٤٥٠٣١ (٢٠١٨)

https://doi.org/١٠,١٠٨٨/٢٠٥٣-١٥٩١/aaba٥٤

H. Mostaanzadeh, A. Abbasi, E. Honarmand

DFT theoretical calculation of the Site selectivity of hydroxylated open ended (٥, ٠) Zigzag carbon nanotube

Russian J. Phys. Chem. A ٩١ (١٣), ٢٦٣٦-٢٦٤٢ (٢٠١٧)

https://doi.org/١٠,١١٣٤/S٠٠٣٦٠٢٤٤١٧١٣٠١٥٥

M. Yadi, R. Karimzadeh, and A. Abbasi

Effect of treatment by electrostatic field and ٥٣٢-nm laser irradiation on optical and thermo-optical properties of graphene oxide colloids.

J. Mater. Sci. ٥٢ (٨), ٤٥٣٢-٤٥٤٢ (٢٠١٧)

http://link.springer.com/article/١٠,١٠٠٧/s١٠٨٥٣-٠١٦-٠٦٩٨-٦

P. Langer, S. A Ejaz; S. J Shah; V. Iaroshenko; A.Villinger; V. Sosnovskikh; J. Iqbal; A. Abbasi

Reactions of ٣-Acylchromones with Heterocyclic Ketene Aminals: One-Pot Synthesis and Phosphatase Inhibitory Activity of Fused Pyridine Derivatives

Eur. J. Org. Chem. ١٠,١٠٠٢/ejoc.٢٠١٦٠١١٣٨

https://doi.org/١٠,١٠٠٢/ejoc.٢٠١٦٠١١٣٨

M. Kamalian; A. Abbasi; Y. Seyed Jalili

Electrical and optical properties of a small capped (٥, ٠) zigzag Carbon nanotube by B, N, Ge and Sn atoms: DFT theoretical calculation.

Int. J. Nano Dimens., ٧(٤): ٣٢٩-٣٣٥ (٢٠١٧)

http://www.ijnd.ir/article_٢٣٠٥٩.html

M. Torabi Rad, A. Abbasi

The Conditions of the Violations of Le Chatlier's Principle in

Gas Reactions at Constant T and P

Iranian J. Math. Chem. ٨ (١) ٤٧–٥٢ (٢٠١٧)

http://ijmc.kashanu.ac.ir/article_٤٠٨٧٧.html

A. Abbasi, H. Mostaanzadeh, R. Safari, E. Honarmand

Site Selectivity of One Hydroxyl Group Bonded on the Surface of Finite (٥, ٠) Zigzag Carbon Nanotube.

Computational Chemistry, ٥, ١-٨. doi: ١٠,٤٢٣٦/cc.٢٠١٧,٥١٠٠١. (٢٠١٧)

http://dx.doi.org/١٠,٤٢٣٦/cc.٢٠١٧,٥١٠٠١

M. Kamalian, Y. Sayed Jalili, A. Abbasi,

Density functional theory calculations of the carbon nanotube based P–N junction by substitution of carbon atoms with B, N, Ge and Sn

Indian Journal of Physics

http://link.springer.com/article/١٠,١٠٠٧٪٢Fs١٢٦٤٨-٠١٤-٠٦٣١-٢

A. Abbasi, A. Dick, T. Hickel, J. Neugebauer,

First-principles investigation of the effect of carbon on the stacking fault energy of Fe-C alloys.

Acta Mater. ٥٩, ٣٠٤١ - ٣٠٤٨ (٢٠١١).

http://dx.doi.org/١٠,١٠١٦/j.actamat.٢٠١١,٠١,٠٤٤

R. Scholz and A. Abbasi,

Influence of dispersion interactions on the adsorption of

PTCDA on Ag(١١٠)

Phys. Status Solidi C ٧ (٢), ٢٣٦ - ٢٣٩ (٢٠١٠).

http://dx.doi.org/١٠,١٠٠٢/pssc.٢٠٠٩٨٢٥٠٠

A. Abbasi and R. Scholz,

Ab initio calculation of the dispersion interaction between a

polyaromatic molecule and a noble metal substrate: PTCDA on

Ag(١١٠).

J. Phys. Chem. C ١١٣, ١٩٨٩٧ ١٩٩٠٤ (٢٠٠٩).

http://pubs.acs.org/doi/abs/١٠,١٠٢١/jp٩٠٢٣٧٠b

A. Abbasi, E. Nadimi, P. Plänitz, C. Radehaus,

Density functional study of the adsorption of Aspirin on the

hydroxylated (٠٠١) αquartz surface.

Surf. Sci. ٦٠٣ (١٦), ٢٥٠٢ - ٢٥٠٦ (٢٠٠٩).

http://dx.doi.org/١٠,١٠١٦/j.susc.٢٠٠٩,٠٦,٠٠٤

کنفرانس های شرکت کرده به صورت سخنرانی و پوستر

N. Al-timimi, A. Abbasi,

Structural and electrochemical properties study of the ۱,٤,٥,۸-

Naphthalenetetracarboxylic diimide (NTCDI) molecule and its polymers for the use in lithium-ion batteries using density functional theory (DFT) calculations

۲۹th Iranian Organic Chemistry Conference (۲۰۲۳)

R. Ahoza, A. Abbasi,

How fluorine functionalization influence on ۱,٤,٥,۸-Naphthalenetetracarboxylic diimide (NTCDI) molecule in the reaction with lithium atoms: A density functional theory (DFT) study

۲۹th Iranian Organic Chemistry Conference (۲۰۲۳)

Z. Alsoudani, A. Abbasi,

Structural and electrochemical properties study of the ۲,٦-dicyano۱,٤,٥,۸-Naphthalenetetracarboxylic diimide (NTCDI(CN)۲) molecule and its dimers for the use in lithium-ion batteries using density functional theory (DFT) calculations

۲۹th Iranian Organic Chemistry Conference (۲۰۲۳)

M. Kamalian, A. Abbasi, Y. Seyed Jalili

Electronic properties of doped (٥, ٠) zigzag carbon nanotube by Boron and Nitrogen atoms: Density Functional Theory calculations

۶th international congress on nanoscience and nanotechnology

A. Abbasi, H. Mostaanzadeh, M. Kiamehr, E. Honarmand (oral)

Study of Site selectivity of tri-hydroxylated in finite (٥, ٠) Zigzag carbon nanotube using ab initio calculations

١٩th Iranian Physical Chemistry Conference

A. Abbasi, H. Mostaanzadeh, M. Kiamehr, E. Honarmand

ab initio study of the interaction of HX (X=F, Cl, OH and SH) with (٥, ٠) Zigzag carbon nanotube

١٩th Iranian Physical Chemistry Conference

Abbasi, R. Scholz, (oral)

Ab initio study of the effect of the cluster size on the chemisorptions of NTCDA on the Ag(١١٠) surface.

١٥th Iranian Physical Chemistry Conference

University of Tehran, Tehran, September ٣-٦, ٢٠١٢

H. Mostaanzadeh, A. Abbasi, F. Hajizadeh, T. Koval, M. Dusek, (poster)

Experimental and theoretical study of the structure and the vibrational spectra of a new diazaphospholane compound: (ClCH٢CH٢)٢NPO[HN(CH٢)٢NC(O)C٦H٤(p-NO٢)]

١٥th Iranian Physical Chemistry Conference

University of Tehran, Tehran, September ٣-٦, ٢٠١٢

A Dick, F. Körmann, A. Abbasi, T. Hickel, J. Neugebauer, (oral) Towards an *ab initio* based understanding of deformation mechanisms in high-manganese Steels. ١st Int. Conf. on High Manganese Steels, Seoul, Republic of Korea, ٢٠١١

A. Dick, A. Abbasi,T. Hickel, J. Neugebauer, (oral)

Ab initio Description of Iron and Steel: Mechanical properties

Ringberg Castle, Tegernsee, Germany, October ٢٤ - ٢٩, ٢٠١٠.

A. Abbasi, A. Dick, T. Hickel, J. Neugebauer, (poster)

Ab initio study of the stacking fault energy of Fe-Mn-C alloys.

Ab initio Description of Iron and Steel: Mechanical properties

Ringberg Castle, Tegernsee, Germany, October ٢٤ - ٢٩, ٢٠١٠.

A. Abbasi, A. Dick, T. Hickel, J. Neugebauer, (poster)

The influence of interstitial carbon on the stacking fault energy

of Fe based materials.

ICAMS scientific retreat, Akademie Biggesee, Germany, September ٢٩ - October ١, ٢٠١٠.

A. Abbasi, A. Dick, T. Hickel, J. Neugebauer, (oral)

The influence of interstitial carbon on the stacking fault energy

of Fe based materials.

Ψk٢٠١٠ conference, Berlin September ١٢ – ١٦, ٢٠١٠.

A. Abbasi, A. Dick, T. Hickel, J. Neugebauer, (oral)

First principles calculations of the stacking fault energies for

Mn and Fe.

Computational Materials Science on Complex Energy

Landscapes Workshop. Imst, Austria. January ٢٥ - ٢٩ ٢٠١٠.

A. Abbasi, R. Scholz, and M. Schreiber, (oral)

Influence of dispersion interactions on the adsorption of NTCDA on (١١٠)-oriented noble metals.

DPG Conference ٢٠٠٩, Dresden March ٢٢ - ٢٧, ٢٠٠٩.

A. Abbasi and R. Scholz, (oral)

PTCDA chemisorbed on Ag(١١٠): Dispersion interactions and charge equilibration.

DPG Conference ٢٠٠٩, Dresden March ٢٢ - ٢٧, ٢٠٠٩.

A. Abbasi, E. Nadimi, P. Plänitz, C. Radehaus, (oral)

Density functional study of the adsorption of Aspirin on (٠٠١) surface of α-quartz surface.

DPG Conference ٢٠٠٩, Dresden March ٢٢ - ٢٧, ٢٠٠٩.

M. Abdel-Hafiez, M. Toader, T.G. Gopakumar, A. Abbasi, and M. Hietschold, (poster)

Adsorption Geometry and Molecular Orbital Structure of Fluorinated Cobalt Phthalocyanine (F١٦CoPc) Layers on HOPG Substrate.

DPG Conference ٢٠٠٩, Dresden March ٢٢ - ٢٧, ٢٠٠٩.

A. Jakob, S. Jahn, A. Abbasi, T. Blaudeck, C.C. Himcinschi, M. Friedrich, H. Lang, R.R. Baumann, M. Schreiber, and D.R.T. Zahn, (oral)

Thermal and photo-induced phase transformations of Silver(I)-٢-[٢-(٢-methoxyethoxy)-ethoxy]acetat.

MRS Fall Meeting ٢٠٠٨, Boston, MA, December ١ - ٥, ٢٠٠٨.

A. Abbasi, R. Scholz, and M. Schreiber, (poster)

Influence of dispersion interactions on the adsorption of

NTCDA on (١١٠)-oriented noble metals.

DPG Conference ٢٠٠٨, Berlin April ٢٥ - ٢٩, ٢٠٠٨.

M. Abdel-Hafiez, M. Toader, T. Gopakumar, A. Abbasi, M. Hietschold, (poster)

Adsorption Structure of Fluorinated Cobalt Phthalocyanine (F١٦CoPc) Layers on Crystalline Substrates.

Materials for Advanced Metallization Conference (MAM) Dresden (Germany), March ٢ - ٥, ٢٠٠٨.

A. Abbasi, R. Scholz, and M. Schreiber, (poster)

Quantum chemical calculations of PTCDA and NTCDA

adsorbates on Ag(١١٠).

DPG Conference ٢٠٠٧, Regensburg March ٢٦ - ٣٠, ٢٠٠٧.

A. Abbasi, R. Scholz, (oral)

Organic adsorbates on open metal surfaces: PTCDA and NTCDA on Ag(١١٠).

٣٨٣. WE–Heraeus–Seminar on " Physics of Highly Ordered Organic Interfaces and Layers",

Bad Honnef January ٢٢ - ٢٤, ٢٠٠٧.

A. Abbasi, M. Schreiber, and R. Scholz, (poster)

Chemisorption of PTCDA on Ag(١١٠): A quantum chemical study.

DPG Conference, Dresden March ٢٧ - ٣١, ٢٠٠٦.

A. Abbasi, R. Scholz, and M. Schreiber, (oral)

Quantum chemical investigation of the adsorption of PTCDA on Ag(١١٠).

DPG Conference, Berlin March ٤ - ٩, ٢٠٠٥.

L. Mancera, R. Scholz, A. Abbasi, M. Schreiber, B.A. Paez, G. Gavrila, G. Salvan, D.R.T. Zahn, (poster)

Theoretical Investigation of the Reactivity of Mg Deposited on PTCDA Films.

DPG Conference, Berlin March ٤ - ٩, ٢٠٠٥.

R. Scholz, A. Abbasi, (poster)

Spectroscopic properties of α-PTCDA single crystals and PTCDA molecules adsorbed on metals substrates

International Karlsruhe Nanoscience Workshop

Karlsruhe January ٢٣ - ٢٦, ٢٠٠٥.

H. Sabzyan, A. Abbasi, (poster)

Ab initio study of structure, intramolecular rotation and hydrogen exchange potential energy surfaces, and possibility of diabatic level crossing for ٢-hydroxy-٤-phenyl-٢,٤-cyclopentadien-١-one.

Physical Chemistry Conference, Booshehr, Iran ٢٠٠٢.

Book Chapter:

T. Khayamian, M. Esteki, A. Abbasi,

Application of wavelet neural networks in multivariate data analysis (Chapter ٤). Progress in chemometrics research, New Yourk: Nova Science, ٢٠٠٥, P. ٣٧ - ٤١.

رساله راهنمایی شده دکتری:

مطالعات ab initio و DFT بر روی ترانزیستورهای NPNو PNP

منیر کمالیان (۱۳۹۳)

رساله های راهنمایی شده دوره کارشناسی ارشد:

بازیافت و خالص سازی طلا از زباله های پردازنده رایانه با استفاده از روش الکتروشیمی

فرشته بابایی خمارکی (۱۴۰۳)

بازیافت نقره از زباله های پردازنده رایانه با استفاده از روش الکتروشیمی

بهار زینلی (۱۴۰۲)

بازیافت مس از زباله های پردازنده رایانه با استفاده از روش الکتروشیمی

فاطمه حیدری (۱۴۰۲)

مطالعه خواص ساختاری و الکتروشیمیایی مولکول دی فنیل- ۱و۴و۵و۸-نفتالن تتراکربوکسیلیک دی ایمید (DP-NTCDI) و برخی ایزومرهای آن برای استفاده در باتری¬های یون لیتیوم با استفاده از محاسبات تئوری تابعیت چگالی (DFT)

کرار کردی (۱۴۰۳)

مطالعه خواص ساختاری و الکتروشیمیایی مولکول ۲و۶-دی متیل ۱و۴و۵و۸-نفتالن تتراکربوکسیلیک دی ایمید (NTCDI) و بسپارهای آن برای استفاده در باتری¬های یون لیتیوم با استفاده از محاسبات تئوری تابعیت چگالی (DFT)

زینب الیاسری (۱۴۰۳)

مطالعه خواص ساختار ی و الکتروشیمیایی مولکول ۲و -۶دی سیانو۱و۴و۵و-۸نفتالن تتراکربوکسیلیک دی ایمید)۲(CN(NTCDI)و بسپارهای آن برا ی استفاده در باتریهای یون لیتیوم با استفاده از محاسبات تئور ی تابعیت چگالی) DFT

زهرا السودانی (۱۴۰۲)

مطالعه خواص ساختاری و الکتروشیمیایی مولکول ۲و-۶دی فلوئورو ۱و۴و۵و-۸نفتالن تتراکربوکسیلیک دی ایمید (NTCDI) و بسپارهای آن برای استفاده در باتریهای یون لیتیوم با استفاده از محاسبات تئوری تابعیت چگالی (DFT)

روی الهزاع (۱۴۰۲)

مطالعه خواص ساختاری و الکتروشیمیایی مولکول ۱و۴و۵و۸- نفتالن تتراکربوکسیلیک دی ایمید (NTCDI)و بسپارهای آن برای استفاده در باتری های یون لیتیوم با استفاده از محاسبات تئوری تابعیت چگالی (DFT)

نبا التمیمی (۱۴۰۲)

مطالعه و برسی خواص الکتروشیمایی و ساختاری مولکول های Quinone و برخی استخلافهای آن برای استفاده در باتری¬های یون لیتیومی

عباس صفرخانی (۱۴۰۲)

مطالعه خواص الکتروشیمایی و ساختاری مولکول هیدروکینون و برخی استخلافهای آن برای استفاده در باتریهای یون لیتیوم

سید محسن رضایی (۱۴۰۲)

مطالعه خواص الکتروشیمایی و ساختاری مولکول PTCDI و برخی استخلافهای آن برای استفاده در باتری¬های یون لیتیومی

فائزه ابراهیمی (۱۴۰۱)

مطالعه از اساس اثر آنیلین بر سطح آهن به عنوان یک بازدارنده خوردگی

مهتاب بیات (۱۳۹۹)

مطالعه از اساس اثر آنیلین بر سطح آلمینیوم به عنوان یک بازدارنده خوردگی

افسانه حمد زاده (۱۳۹۹)

بررسی تاثیر نوسانات تصادفی ناخالصی روی خواص الکترونیکی نانوسیمxN/GaN۱InxGa- با سطح مقطع شش ضلعی تغییر شکل داده شده

مجید داور (۱۳۹۷)

محاسبه خواص نوری نانوسیم xN/GaN۱InxGa- با سطح مقطع شش ضلعی تغییرشکل یافته

سید حسام الدین حسینی (۱۳۹۷)

بررسی ویژگی های دزیمتری نقاط کوانتومی کادمیوم تلورید در بابر پرتوهای گاما

وحید چگینی (۱۳۹۶)

محاسبه از اساس جذب گاز سمی CO بر روی نانو تیوپ های کربنی و نانو تیوپ های کربنی عامل دار

محمد رئیسی (۱۳۹۵)

محاسبه از اساس جذب گاز سمی Cl_2 بر روی نانو تیوپ های کربنی و ناتوتیوپ های کربنی عامل دار

محمد حسین جعفری (۱۳۹۵)