

برنامه بیست و چهارمین کنفرانس شیمی فیزیک ایران (انجمن شیمی ایران)

دانشگاه اصفهان - ۲۹ و ۳۰ آبان ماه ۱۴۰۳

سه شنبه ۱۴۰۳/۰۸/۲۹	
زمان	برنامه
۸:۰۰-۸:۱۵	تلاوت آیاتی از قرآن مجید، نواختن سرود ملی گزارش دبیر علمی کنفرانس و گزارش دبیر اجرایی کنفرانس
۸:۱۵-۸:۲۵	گزارش دبیر انجمن شیمی ایران، دکتر مجید مقدم
۸:۲۵-۸:۳۵	گزارش دبیر کمیته شیمی فیزیک، دکتر سیفاله جلیلی
۸:۳۵-۹:۱۰	سخنرانی عمومی دکتر میرقاسم حسینی، شیمی فیزیک دان برجسته سال
۹:۱۰-۹:۲۰	یادی از خاطرات و خدمات علمی استاد گرانقدر مرحوم دکتر علی حیدر پاکباز
۹:۲۰-۹:۵۰	معرفی فعالیت‌ها و فرصت‌های شغلی (مصباح انرژی، اسنواک، صبا باتری)
۹:۵۰-۱۰:۳۵	پذیرایی، بازدید از پرده‌ها (پوسترها) و غرفه‌های نمایشگاه
۱۰:۳۵-۱۰:۵۰	عکس یادگاری کنفرانس
۱۰:۵۰-۱۲:۴۵	سخنرانی‌های تخصصی به تفکیک موضوعات مختلف شیمی فیزیک (طبق برنامه)
۱۲:۴۵-۱۳:۳۰	بازدید از پرده‌ها (پوسترها) و غرفه‌های نمایشگاه
۱۳:۳۰	نماز، ناهار و استراحت

چهارشنبه ۱۴۰۳/۰۸/۳۰	
زمان	برنامه
۸:۰۰-۸:۲۵	سخنرانی عمومی دکتر حسین فرخ پور
۸:۲۵-۸:۵۰	سخنرانی عمومی دکتر سعید عزیزیان
۸:۵۰-۹:۲۰	معرفی فعالیت‌ها و فرصت‌های شغلی (هسا، صنایع الکترواپتیک، صندوق پژوهش فولاد مبارکه)
۹:۲۰-۱۰:۲۰	پذیرایی، بازدید از پرده‌ها (پوسترها) و غرفه‌های نمایشگاه
۱۰:۲۰-۱۲:۱۵	سخنرانی‌های تخصصی به تفکیک موضوعات مختلف شیمی فیزیک (طبق برنامه)
۱۲:۱۵-۱۳:۰۰	بازدید از پرده‌ها (پوسترها) و غرفه‌های نمایشگاه
۱۳:۰۰-۱۳:۳۰	اختتامیه
۱۳:۳۰	نماز، ناهار و استراحت

برنامه سخنرانی های تخصصی شیمی کوانتومی، محاسباتی و طیف نوری

(تالار خاتم)

سه شنبه ۱۴۰۳ / ۸ / ۲۹ (میران جلسه: دکتر رضا امیدیان و دکتر محسن افتاده)		
سخنران	موضوع	زمان
رضوان رحیمی	شبیه سازی DFT بر روی عملکرد نانوصفحه BC2N برای تشخیص As^{3+} در فاضلاب شهری و صنعتی	۱۰:۵۰-۱۱:۱۵
محمد صالحی	چشم انداز ساختاری برهمکنش قند-پپتید و اثر آن در انتخاب ساختار جهت بازتولید طیف تجربی	۱۱:۲۰-۱۱:۴۵
سارا فخرایی	تجزیه و تحلیل توزیع حفره-الکترون برای اثر انتقال بار در کاتالیزور نوری کمپلکس آلی-فلزی نیکل	۱۱:۵۰-۱۲:۱۵
محمدرضا افیونی	بررسی هامیلتونی موثر الکترونی در شبکه‌ی بایفنینلین	۱۲:۲۰-۱۲:۴۵

چهارشنبه ۱۴۰۳ / ۸ / ۳۰ (میران جلسه: دکتر اکبر امیدوار و دکتر حسین فرخ پور)		
سخنران	موضوع	زمان
زهرا جمشیدی	دینامیک کاواک پلاسمونی بر پایه هامیلتونین خطی وایبرونیک	۱۰:۲۰-۱۰:۴۵
سید محمد اعظمی	ارزیابی بار و انرژی ذخیره شده در نانوخازنهای تشکیل شده از پولک گرافنی	۱۰:۵۰-۱۱:۱۵
کیمیا کارگر	مطالعه دینامیک کوانتومی جفت شدگی قوی تحت میدان کاواک پلاسمونی	۱۱:۲۰-۱۱:۴۵
مریم السادات رفیعی	محاسبات تحلیلی احتمال عبور با استفاده از مدل پتانسیل مستطیلی	۱۱:۵۰-۱۲:۱۵

برنامه سخنرانی‌های تخصصی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

(تالار مبین)

سه شنبه ۱۴۰۳/۸/۲۹ (میران جلسه: دکتر محمد موسوی و دکتر عزت کشاورزی)		
سخنران	موضوع	زمان
محمدحسین کوثری	شبیه‌سازی مولکولی فرآیند انحلال سلولز در مایع یونی ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم استات و مقایسه آن با محیط آبی	۱۰:۵۰-۱۱:۱۵
علیرضا صادقی	پیش‌بینی گاف نواری پروسکایت‌ها با استفاده از یادگیری ماشین	۱۱:۲۰-۱۱:۴۵
زهرا رضاپور	بررسی نقش کاتیون عامل‌دار شده در برهم‌کنش کارواکرول با مایعات یونی آمینواسیدی به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی	۱۱:۵۰-۱۲:۱۵
بشری مرادی	ارائه مدل دانه‌درشت تترامر کیتوزان بر اساس میدان نیروی مارتینی	۱۲:۲۰-۱۲:۴۵

چهارشنبه ۱۴۰۳/۸/۳۰ (میران جلسه: دکتر محمد حسین کوثری و دکتر منصور نازیان)		
سخنران	موضوع	زمان
امیرحسین جلیلی	رفتار حلالیت متان تیول و هیدروژن سولفید در مایع‌های یونی خانواده ایمیدازولیوم: بررسی مقایسه‌ای از دیدگاه تجربی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی	۱۰:۲۰-۱۰:۴۵
مهدی ظریف	آیا امکان داشتن تغییر فاز در سیستم‌های شبه-یک بعدی وجود دارد؟	۱۰:۵۰-۱۱:۱۵
محسن سروش منش	بررسی محاسباتی مکانیسم نفوذ داروی ایرینوتکان در چارچوب آلی کوولانسی بر پایه پورفیرین	۱۱:۲۰-۱۱:۴۵
زهرا استاد شریف معمار	پیش‌بینی چگالی فاز توده با استفاده از چگالی جرمی نانوقطرات مایع یونی دوکاتیونی: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از اساس	۱۱:۵۰-۱۲:۱۵

برنامه سخنرانی‌های تخصصی ترمودینامیک، سینتیک، کاتالیز، سل خورشیدی و طراحی دارو...

(تالار امین)

سه شنبه ۱۴۰۳ / ۸ / ۲۹ (میران جلسه: دکتر فخرالسادات محمدی و دکتر سعید غزینیان)		
سخنران	موضوع	زمان
حنانه السادات اقتداری	مطالعه نظری مکانیسم جذب آلاینده گاز دی اکسید کربن توسط مدل آنزیمی کربنیک آنهیدراز انسانی	۱۰:۵۰-۱۱:۱۵
مهدی طالبیان	بررسی سینتیکی واکنش پیروگالول با سدیم‌یدات به روش تجربی و محاسبه‌ی تغییرات تابع گیبس واکنش با روش‌های نظری	۱۱:۲۰-۱۱:۴۵
زینب کرکنی	برخورد C2 با H2 و هم‌تاهای ایزوتوپی آنها در فضای بین ستاره‌ای	۱۱:۵۰-۱۲:۱۵
نهاد نصرت پور	بررسی اثر دما و طول زنجیر آلکیلی کاتیون بر رفتار تعادل فاز مایع-مایع سیستم‌های سه تایی آبی پلی پروپیلن گلیکول - نمک تترا آلکیل آمونیوم هالید	۱۲:۲۰-۱۲:۴۵

چهارشنبه ۱۴۰۳ / ۸ / ۳۰ (میران جلسه: دکتر نسیم سهرابی و دکتر فاطمه سادات فاطمی نسب)		
سخنران	موضوع	زمان
زهرا چاوش پور	بررسی پایداری حرارتی آنزیم سیتوکروم سی انکپسوله شده در شبکه فلز-آلی IR-MOF-74-VI از طریق شبیه سازی دینامیک مولکولی	۱۰:۲۰-۱۰:۴۵
مریم دهستانی	بررسی جفت شدگی ناآدیاباتیکی در سطوح انرژی پتانسیل اکسیژن دی فلورید	۱۰:۵۰-۱۱:۱۵
جابر جهان بین سردودی	موتورهای حرارتی و یخچال‌های کوانتومی طراحی شده بر پایه انتقالات الکترونی و تغییر پیکربندی هیدروکربن‌های حلقوی آروماتیک و پی‌ریزی نظری ترمودینامیک کوانتومی آنها	۱۱:۲۰-۱۱:۴۵
شاهین قاسم زاده	ساخت سل خورشیدی آلی بر پایه ترکیب ITIC:PCE10 و بررسی پایداری دمایی و نوری آن	۱۱:۵۰-۱۲:۱۵