

## بسمه تعالی و تبارک

نام و نام خانوادگی: راضیه حبیب پور قراچه

محل کار: گروه صنایع معدنی و کاتالیست ها، پژوهشکده فناوری های شیمیایی، سازمان پژوهش های علمی و صنعتی ایران

سمت: استادیار شیمی فیزیک

پست الکترونیک: Habibpour@irost.ir

### سوابق تحصیلی:

کارشناسی - شیمی - دانشگاه شهید باهنر کرمان - ۱۳۸۰

کارشناسی ارشد - شیمی فیزیک - دانشگاه سیستان و بلوچستان - ۱۳۸۴

دکتری - شیمی فیزیک - دانشگاه اصفهان - ۱۳۹۱

### زمینه های تحقیقاتی:

سنتز فیشر-تروپش (تهیه کاتالیست و بررسی عملکرد)

طراحی (مدلسازی کامپیوتری) کاتالیست ها و مواد جدید

محاسبات مکانیک کوانتوم به منظور حل مسائل شیمی

طراحی محاسباتی داروها

استخراج حلالی

### پروژه های تحقیقاتی:

- تهیه کاتالیزورهای موثر و پایدار برای تبدیل گاز سنتز به اتیلن و پروپیلن (همکار)

- شناسایی عناصر نادر و کمیاب خاکی (REE) کانسنگ استخراجی معدن انگوران در زون های مختلف ماده معدنی و چگونگی استحصال این عناصر (مجری مشترک)

- بررسی پارامترهای موثر بر استریپ عناصر نادر خاکی و آهن از D2EHPA به عنوان استخراج کننده آلی و کرومیزین به عنوان رقیق کننده در فرایند استخراج حلالی روی (مجری)

- طراحی محاسباتی و ارزیابی لیگاندهای چندمنظوره‌ی جدید به عنوان ترکیبات مؤثر درمان بیماری آلزایمر (مجری)

- ارائه خدمات پژوهشی جهت استحصال اکسید اسکاندیم از پسماند تولیدی شرکت آلومینای ایران (مجری مشترک)

## مهارت ها:

- مسلط به استفاده از دستگاه های GC و BET, XRF, XRD

- مسلط به سیستم عامل های *Linux* و *Windows*

- مسلط به نرم افزارهای

Quantum Espresso, Crystal Maker, Nanotube Modeler, Gauss View, GaussSum, Gaussian, and Gromacs.

راهنمایی پایان نامه های دانشجویی: ۶ دانشجوی کارشناسی ارشد (خاتمه یافته) و ۱ دانشجوی دکتری (جاری)

- 1) **Title:** Study of the electronic properties and structural stability of cadmium oxide nano-clusters using density functional theory, **Student:** Mousa Asadi
- 2) **Title:** Investigation of the effect of oxygen adsorption on the stability and electronic properties of  $\text{Sn}_m\text{Ge}_n(m+n \leq 4)$  Nano-clusters by density functional theory method, **Student:** Mina Toufanian
- 3) **Title:** Investigation of  $\text{H}_2\text{O}$  adsorption on  $\text{Zn}_m\text{O}_n$  ( $m + n = 2-4$ ) nanoclusters using DFT, **Student:** Elham Khalese
- 4) **Title:** Investigation of the thermodynamic and mechanism of the solvent extraction of the lighter lanthanide metal ions by means of organophosphorus extractants: D2EPHA, PC88A, CYANEX272, CYANEX301, **Student:** Maryam Bagherpour
- 5) **Title:** Theoretical investigation of  $\text{NO}_x$  detection by Graphene-Boron Nitrid Hybrid Nanoribbons, **Student:** Sotoudeh Delavarkhan
- 6) **Title:** Computational investigation of edge halogenation of hybrid graphene-boron nitride nanoribbons and study of ripple edge effects on their stability, structural, electronic and chemical properties, **Student:** Zahra Soltani
- 7) **Title:** Simulation of dens gas dispersion in the dusty environment, **Student:** Narjes Hemmati

## انتشارات

- مقالات ژورنالی

- 1) A. A. Mirzaei, R. Habibpour and E. Kashi, "Preparation and optimization of mixed iron cobalt oxide catalysts for conversion of synthesis gas to light olefins" **Applied Catalysis A: General** 296 (2005) 222–23.

- 2) A. A. Mirzaei, R. Habibpour, E. Kashi, M. Feizi, "Characterization of iron-cobalt oxide catalysts: effect of different supports and promoters upon the structure and morphology of precursors and catalysts" **Applied Catalysis A: General** 301 (2006) 272–283.
- 3) A. A. Mirzaei, M. Faizi, R. Habibpour, "Effect of preparation conditions on the catalytic performance of cobalt manganese oxide catalysts for conversion of synthesis gas to light olefins" **Applied Catalysis A: General** 306 (2006) 98–107.
- 4) S. Jalili, A. Zeini Isfahani, R. Habibpour, "Atomic oxygen adsorption on Au (100) and bimetallic Au/M (M = Pt and Cu) surfaces" **Computational and Theoretical Chemistry**, 989 (2012) 18.
- 5) S. Jalili, A. Zeini Isfahani, R. Habibpour, "DFT Investigations on the Interaction of Oxygen Reduction Reaction Intermediates with Au (100) and Bimetallic Au/M (100) (M = Pt, Cu and Fe) Surfaces" **International Journal of Industrial Chemistry** 4 (2013) 33.
- 6) R. Habibpour, R. Vaziri, "Computational study of electronic, spectroscopic, and chemical properties of  $(\text{CdO})_n$  ( $n=1-7$ ) nanoclusters as a transparent conducting oxide" **Journal of Particle Science & Technology**, 1 (2015) 195-204.
- 7) R. Habibpour, R. Vaziri, "Computational and theoretical study of electronic, spectroscopic and chemical properties of  $(\text{ZnO})_n$  ( $n \leq 4$ ) nanoclusters" **Journal of Research on Many-body Systems**, (2015).
- 8) R. Habibpour, R. Vaziri, "Investigation of structural and electronic properties of small  $\text{Au}_n\text{Cu}_m$  ( $n+m \leq 5$ ) nano-clusters for oxygen adsorption" **International Journal of Nano Dimension**, 7 (2016) 208-224.
- 9) R. Habibpour, M. Dargahi, M. Bagherpour, E. Kashi, "Comparative study on Ce (III) and La (III) solvent extraction and separation from a nitric acid medium by D2EHPA and Cyanex272" **Metallurgical Research & Technology**, DOI: 10.1051/metal/2017083.
- 10) E. Kashi, R. Habibpour, A. Maleki, H. Gorzin, "Effective parameters interaction study in cerium extraction from sulfuric media using di-(2-ethylhexyl) phosphoric acid" **Chemistry & Chemical Technology**, 11 (2017) 144-151.
- 11) R. Habibpour, E. Kashi, R. Vaziri, "Computational Study of Electronic, Spectroscopic, and Chemical Properties of  $\text{Cu}_n$  ( $n=2-8$ ) nanoclusters for CO Adsorption" **International Journal of Nano Dimension**, 8 (2017) 114-123.
- 12) Razieh Habibpour, Eslam Kashi, "Interaction of atomic hydrogen with monometallic Au(100), Cu(100), Pt(100) surfaces and surface of bimetallic Au@Cu(100), Au@Pt(100) overlayer systems: The role of magnetism" **Iranian Journal of Hydrogen & Fuel Cell**, 3(2017) 209-218.
- 13) R. Habibpour, E. Kashi, R. Vazirib, "N-doped Hybrid Graphene and Boron Nitride Armchair Nanoribbons as Nonmagnetic Semiconductors with Widely Tunable Electronic Properties" **Russian Journal of Physical Chemistry A**, 92 (2018) 530-537.
- 14) Eslam Kashi, Razieh Habibpour, Hesamoddin Gorzin, Armin Maleki, "Solvent Extraction and Separation of Light Rare Earth Elements (La, Pr and Nd) in the Presence of Lactic Acid as a Complexing Agent by Cyanex 272 in Kerosene and the Effect of Citric Acid, Acetic Acid and Titriplex III as Auxiliary Agents" **Journal of Rare Earths**, 36 (2018) 317-323.

- 1) I. A. A. Mirzaei, M. Habibi, R. Habibpour, “**Effect of Preparation Condition on the Catalytic Performance of Iron-Cobalt Oxide atalysts for the Hydrogenation of Carbon Monoxide to Light Olefins**” 8th Iranian inorganic chemistry conference, azarbaijan university of tarbiat moallem, 2004.
- 2) A. A. Mirzaei, M. Habibi, R. Habibpour, “**Effect of Promoter and Support Loadingon on Activity and Selectivity of Iron-Cobalt Oxide Catalysts**” 8th Iranian inorganic chemistry conference, Azarbaijan university of tarbiat moallem, 2004.
- 3) A. A. Mirzaei, M. Habibi, R. Habibpour, “**Performance of Fe-Co Supported and promoted Catalysts for directly Producing Light Olefins via Hydrogenation of Carbon Monoxide**” 7th conference of physical chemistry, Esfahan university of technology, 2005.
- 4) S. Jalili, A. Zeini Isfahani, R. Habibpour, “**Role of Strain and Ligand Effects in the Modification of the Electronic and Chemical Properties of Au/M (M=Pt, Cu and Fe) Bimetallic Surfaces**” 14th Iranian Physical Chemistry Conference, University of Tehran, Kish, February 25-28, 2011.
- 5) S. Jalili, A. Zeini Isfahani, R. Habibpour, “**Effects of Electronic Structure Modifications on the Adsorption of Oxygen Reduction Reaction Intermediates on Au(100)/M (M=Pt, Cu and Fe) surfaces**” 14th Iranian Physical Chemistry Conference, University of Tehran, Kish, February 25-28, 2011.
- 6) S. Jalili, A. Zeini Isfahani, R. Habibpour, “**Atomic Oxygen Adsorption on Au(100) and Au/M ( M = Pt, Cu and Fe ) Bimetallic Surfaces: Effects of Coverage**” 14th Iranian Physical Chemistry Conference, University of Tehran, Kish, February 25-28, 2011.
- 7) S. Jalili, A. Zeini Isfahani, R. Habibpour, “**Study of Au Nanocatalysts, Electronic Properties and Effect of Pt, Cu and Fe metals on Their Catalytic Activity Using Density Functional Theory** ” 16th Iranian Physical Chemistry Conference, University of Mazandaran, Babolsar, October 28-30, 2013.
- 8) R. Habibpour, R. Vaziri, “**Superconductivity of Nitrogen Doped Graphite Intercalated with La and Ce**” 17th Iranian Chemical Conference, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan, September 1, 2014.
- 9) R. Habibpour, R. Vaziri, “**Application of Nitrogen Doped Graphite Intercalated Compounds NdC6 and PrC6 in Batteries**” 17th Iranian Chemical Conference, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan, September 1, 2014.
- 10) M. Bagherpour, R. Habibpour, M. Dargahi, “**Thermodynamic and mechanism of the solvent extraction of the La<sup>3+</sup> metal ion by means of Di-(2-Ethylhexyl)phosphoric acid and Bis(2,4,4-trimethylpentyl) phosphinic acid extractants**” 18<sup>th</sup> Iranian Chemistry Congress, University of Semnan, Semnan, August 30 – September 1, 2015.
- 11) R. Habibpour, R. Vaziri, “**Engineering the Work Function and Electronic Emission of Hybrid Graphene-Boron Nitride Armchair Nanoribbon using B-doping**” 19<sup>th</sup> Iranian Physical Chemistry Conference, University of Guilan, Rasht, September 13-15, 2016.
- 12) R. Habibpour, R. Vaziri, “**Lithium Adsorption on Armchair Graphene Nanoribbon: Insight from Theory**” 19<sup>th</sup> Iranian Physical Chemistry Conference, University of Guilan, Rasht, September 13-15, 2016.

- 13) R. Habibpour, “**Sodium Adsorption on Boron Nitride Armchair Nanoribbon: Insight from DFT**” 20<sup>th</sup> Iranian Physical Chemistry Conference, University of Arak, Arak, August 20-22, 2017.
- 14) R. Habibpour, “**Atomic Scale Investigation of nitrogen doping effects on the structural and electronic properties of Boron Nitride Embedded Armchair Graphene Nanoribbons**” 20<sup>th</sup> Iranian Physical Chemistry Conference, University of Arak, Arak, August 20-22, 2017.
- 15) R. Habibpour, E. Kashi, “**Evaluation of the selectivity on the La(III)/Ce(III) separation from nitric acid medium with D2EHPA and Cyanex272 extractants**” 25<sup>th</sup> Iranian Organic Chemistry Conference, Iran University of Science and Technology, Tehran, September 2-4, 2017.
- 16) R. Habibpour, E. Kashi, “**Study of the F-terminated Boron Nitride Armchair Nanoribbon**” 25<sup>th</sup> Iranian Organic Chemistry Conference, Iran University of Science and Technology, Tehran, September 2-4, 2017.

#### تدریس ها

- شیمی فیزیک I و II (کارشناسی)، دانشگاه آزاد اسلامی و دانشگاه پیام نور
- شیمی عمومی (کارشناسی)، دانشگاه آزاد اسلامی و دانشگاه پیام نور
- آزمایشگاه شیمی فیزیک I و II (کارشناسی)، دانشگاه اصفهان
- شیمی نظری ساختارهای نانو (کارشناسی ارشد)، سازمان پژوهش های علمی و صنعتی ایران
- مبانی شیمی کوانتومی III (دکتری)، سازمان پژوهش های علمی و صنعتی ایران
- ایمنی در صنایع فرایندی (دکتری)، سازمان پژوهش های علمی و صنعتی ایران
- بیوشیمی فیزیک (دکتری)، سازمان پژوهش های علمی و صنعتی ایران
- شیمی محاسباتی ( کارشناسی ارشد)، دانشگاه پیام نور
- طیف سنجی مولکولی ( کارشناسی ارشد)، دانشگاه پیام نور