

مشخصات فردی

نام: راضیه

نام خانوادگی: حبیب پور قراچه

مشخصات تماس

پست الکترونیکی: razihabibi@gmail.com و Habibpour@irost.ir

وب سایت: <https://irost.org/chemical/academic-staff>

آدرس: تهران - احمدآباد مستوفی - سازمان پژوهش های علمی و صنعتی ایران - پژوهشکده فناوری های شیمیایی - گروه صنایع معدنی و کاتالیست ها

وضعیت علمی/پژوهشی

مرتبه علمی: دانشیار

آخرین مدرک تحصیلی: دکتری تخصصی

رشته تحصیلی: شیمی

گرایش: شیمی فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد: تاثیر ساپورت ها و تقویت کننده های مختلف و اثر مقادیر آنها بر مورفولوژی و عملکرد کاتالیزورهای مخلوط اکسیدی آهن-کبالت برای تبدیل گاز سنتز به اولفین های سبک

پایان نامه دکتری: بررسی خواص الکترونی نانوکاتالیزگرهای طلا و اثر فلزات Pt، Cu و Fe بر روی فعالیت کاتالیزگری آنها با استفاده از روش های مکانیک کوانتوم

طرح های پژوهشی

- تهیه کاتالیست های موثر و پایدار به منظور تبدیل گاز سنتز به اتیلن و پروپیلن (شرکت پژوهش و فناوری پتروشیمی)
- شناسایی عناصر نادر و کمیاب خاکی (REE) کانسنگ استخراجی معدن مجتمع سرب و روی انگوران در زون های مختلف ماده معدنی و چگونگی استحصال این عناصر (مجتمع سرب و روی انگوران)
- ارائه خدمات پژوهشی جهت استحصال اکسید اسکاندیم از پسماند تولیدی شرکت آلومینای ایران (شرکت آلومینای ایران)
- بررسی پارامترهای موثر بر استریپ عناصر نادر خاکی و آهن از D2EHPA به عنوان استخراج کننده آلی و کرومین به عنوان رقیق کننده در فرایند استخراج حلالی روی (معاونت علمی و فناوری ریاست جمهوری)
- انجام مطالعات بازار در خصوص بکارگیری محصول میش متال و اکسیدهای تفریقی تولید داخل، انجام اصلاحات فرایندهای مربوطه و امکان سنجی فنی و اقتصادی پروژه در مقیاس صنعتی (سازمان توسعه و نوسازی معادن و صنایع معدنی ایران - ایمیدرو)

- ۶- طراحی محاسباتی و ارزیابی لیگاندهای چند منظوره جدید به عنوان ترکیبات موثر درمان بیماری آلزایمر (سازمان پژوهش های علمی و صنعتی ایران)
- ۷- بررسی استحصال عناصر نادر خاکی از فسفوژیپسوم تولیدی شرکت کیمیا داران کویر (شرکت کیمیا داران کویر)
- ۸- طراحی و ساخت پایلوت و آزمایش استحصال عناصر نادر خاکی از فسفوژیپسوم تولیدی شرکت کیمیا داران کویر (شرکت کیمیا داران کویر)
- ۹- انجام مطالعات پژوهشی بررسی روش های مختلف همگن سازی بوکسیت و طراحی مناسب ترین روش همگن سازی با توجه به ژنهای مختلف بوکسیت و در نظر گرفت شروط بخش فراوری و انجام محاسبات فنی و اقتصادی طرح (شرکت آلومینای ایران)
- ۱۰- بازیافت کبالت، روی، کادمیم، و نیکل از فیلتر کیک گرم و سرد فرآیند تولید روی در مقیاس پایلوت (شرکت راه ابریشم تیرازیس)
- ۱۱- بررسی پتانسیل ژئوشیمیایی عناصر استراتژیک در ذخایر آهن گلمنده و آنومالی ۲۱a (شرکت تهیه و تولید مواد معدنی ایران)
- ۱۲- ارتقاء کنسانتره عناصر کمیاب خاکی به دست آمده از منبع ثانویه فسفوژیپسوم به بیش از ۹۰ درصد با بهینه سازی روش ترکیبی انحلال- رسوب دهی- استخراج حلالی گزینش پذیر (بنیاد ملی علم ایران)
- ۱۳- کیوبیت های کریستالی عناصر نادر خاکی

پایان نامه های تحت راهنمایی

- ۱- مطالعه پایداری ساختاری و خواص الکترونی نانوخوشه های اکسید کادمیم با استفاده از نظریه تابعی چگالی (کارشناسی ارشد)
- ۲- بررسی اثر جذب اکسیژن بر پایداری و خواص الکترونی نانوخوشه های $\text{Sn}_m\text{Ge}_n(m+n \geq 4)$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی (کارشناسی ارشد)
- ۳- بررسی جذب آب بر روی نانوخوشه های اکسید روی $\text{Zn}_m\text{O}_n(m+n=2-4)$ با استفاده از نظریه تابعی چگالی (کارشناسی ارشد)
- ۴- بررسی مکانیزم و ترمودینامیک استخراج حلالی یون های فلزی لانتانیدی سبک با استفاده از استخراج کننده های اورگانوفسفر (D2EHPA, PC88A, CYANEX272, CYANEX301) (کارشناسی ارشد)
- ۵- بررسی نظری شناسایی NO_x با استفاده از نانوروبان های هیبریدی گرافن-نیتريد بور (کارشناسی ارشد)
- ۶- بررسی محاسباتی هالوژناسیون لبه نانو روباهای ترکیبی گرافن-بور نیتريد و بررسی اثرات لبه موج دار بر پایداری، خصوصیات ساختاری، الکترونیکی و شیمیایی آنها (کارشناسی ارشد)
- ۷- شبیه سازی پراکندگی گازهای سنگین در محیط گرد و خاک (دکتری)
- ۸- شبیه سازی دینامیک مولکولی گیرنده های دوپامین خانواده D2/آنتاگونیست های دوپامین آتپیکال با رویکرد اصلاح دارو (دکتری)
- ۹- سنتز، تعیین خصوصیات و کاربرد MOF های جدید ایمیدازولات برای جذب یونهای فلزی Pb و Ni ، Cd (دکتری)
- ۱۰- تهیه و بررسی عملکرد کاتالیست های پروسکایتی مضاعف بر پایه عناصر نادر خاکی (سربیم و لانتانیوم) و فلزات واسطه آهن، روی و مس جهت کاربرد در مبدل کاتالیستی خودرو (دکتری)
- ۱۱- بررسی جداسازی عناصر نادر خاکی از رسوبات محلول لیج سولفوری فسفوژیپسوم به کمک برج ARDC اصلاح شده (دکتری)
- ۱۲- تهیه اکسیدهای فلزی مضاعف با ساختار پروسکایتی مضاعف بر پایه عناصر نادر خاکی (سربیم و لانتانیوم) و فلزات واسطه آهن، منگنز و مس جهت بررسی عملکرد کاتالیستی در مبدل کاتالیستی (دکتری)

- ۱۳- انجام واکنش های مینیچی، سوزوکی و سایر واکنش های جفت شدن C-C روی نانولوله های کربنی و نانوکامپوزیتی با تمرکز بر کاربردهای کاتالیزوری یا ذخیره سازی انرژی آنها (دکتری)
- ۱۴- بررسی خواص فیزیکی-شیمیایی داروهای سرطان سینه و مطالعه داکینگ برهمکنش های آنها با پروتئین هدف (کارشناسی ارشد)
- ۱۵- بررسی جداسازی عناصر نادر خاکی از محلول لیج سولفوروی فسفوژنپسوم در یک ستون همزن دار ضربه ای (دکتری)

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) 222–231.
- 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 Au_nCu_m ($n+m \leq 5$) nanoclusters 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*, 115, 207 (2018) 1-10.
- 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 Cu_n ($n=2-8$) nanoclusters for CO Adsorption" *International Journal of Nano Dimension*, 8 (2017) 114-123.
- 12) R. Habibpour, E. 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. Vaziri, "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) E. Kashi, R. Habibpour, H. Gorzin, A. 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.
- 15) A. Tofighi Naeem, E. Kashi, M. A. Salehi, R. Habibpour, "Extraction and separation of La(III), Pr(III) and Nd(III) using binary mixture of D2EHPA with Cyanex272, TOPO, and TBP extractants" *Metallurgical Research & Technology*, 115, 612 (2018) 1-8.
- 16) R. Habibpour, M. Eslami, P. Amani and S. Bagheri Novir, "Tacrine-Flavonoid Quercetin Hybride as a MTDL ligand against Alzheimer's disease with metal chelating and AChE, BChE, AChE-induced A β aggregation inhibition properties: A computational study" *Physical Chemistry Research*, 7, 3 (2019) 561-579.
- 17) R. Habibpour, A. Ahmadi, M. Faghihnasiri, P. Amani, "A comparative investigation of pentagraphene and Pt single atom@ penta-graphene in H₂ and O₂ detection: DFT study with assessment of the van der Waals density functionals" *Applied Surface Science*, 528 (2020).
- 18) R. Habibpour, E. Kashi, "Ultrasound/complexing agent-assisted solvent extraction behavior of Zn²⁺ with D2EHPA from sulfuric media containing transition and rare earth (Fe, Ni, Cd, La, and Ce) metal ions" *Journal of Sustainable Metallurgy*, 2021.
- 19) R. Habibpour, E. Kashi, M. Janfada, "Preparation of a mixed Al/Sc nano-oxide derived from the bauxite residue (red mud) via the sulfuric acid roasting-leaching-precipitation process" *Journal of Metals, Materials and Minerals*, 2021.
- 20) P. Amani, R. Habibpour, L. Karami, A. Hofmann, "Docking screens of non-covalent interaction motifs of the human subtype-D2 receptors/75 schizophrenia antipsychotics complexes with physicochemical appraisal of antipsychotics" *ACS Chemical Neuroscience*, 12, 12 (2021) 2218-2232.
- 21) N. Hemati Alam, E. Kashi, R. Habibpour, "Investigation of field experiments and mathematical models for heavy gas dispersion" *Journal of Environmental Science and Technology*, 8, 23 (2021) 169-184.
- 22) P. Amani, R. Habibpour, L. Karami, "Characterizing aripiprazole and its ester derivatives, lauroxil and cavoxil, in interaction with dopamine D2 receptor: Molecular docking and dynamics simulations with physicochemical appraisals" *Journal of Molecular Liquids*, 362 (2022)119787.
- 23) N.H. Alam, E. Kashi, R. Habibpour, "Computational fluid dynamics simulation of gas dispersion in complex facilities using Kit Fox field experiments: Validation and statistical evaluation" *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 44 (2022) 412-423.
- 24) A. Khosravi, M. Ranjbar, R. Habibpour, "Synthesis, characterization, and application of ZIF-8 for removal of Cd, Ni, and Pb ions from aqueous solutions: Optimization of the process by Response Surface Methodology (RSM) based on Central Composite Design (CCD) technique" *Journal of Metals, Materials and Minerals*, 2, 33 (2023) 88-102.
- 25) R. Habibpour, E. Kashi, "Characterization of cordierite Ce-La/SiO₂-Al₂O₃-MgO-ZrO₂ catalyst washcoats with a different Ce-La weight percentage: structure, morphology, and oxygen property study" *Journal of Nanostructures*, Online Publish (2024).
- 26) A. Khosravi, R.Habibpour, and M.Ranjbar, "Enhanced adsorption and removal of Cd (II) from aqueous solution by amino-functionalized ZIF-8" *Scientific Reports*, 14 (2024) 10736.

مقالات کنفرانسی

- 1) 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, azarbajian university of tarbiat moallem, 2004.

- 2) A. A. Mirzaei, M. Habibi, R. Habibpour, "Effect of Promoter and Support Loading 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. 6
- 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 La³⁺ metal ion by means of Di-(2-Ethylhexyl)phosphoric acid and Bis(2,4,4-trimethylpentyl) phosphinic acid extractants" 18th 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" 19th 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" 19th 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" 20th 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" 20th 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" 25th 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" 25th Iranian Organic Chemistry Conference, Iran University of Science and Technology, Tehran, September 2-4, 2017.
- 17) P. Amani, R. Habibpour, "Evaluating Dopamine Targeting Drugs for Treatment of Schizophrenia by Applying a Practical Java Tool" 25th Iranian Physical Chemistry Conference, August 20-22, 2019.
- 18) P. Amani, R. Habibpour, "Generating the Supplementary Structure of Dopamine D₂ Receptor Based on the X-ray Crystal Structure for Molecular Modeling" 25th Iranian Physical Chemistry Conference, August 20-22, 2019.

ثبت اختراع

- تهیه مخلوط نانواکسید آلومینیم-اسکاندیم از گل قرمز شدیداً قلیایی غنی از آهن و خنثی سازی همزمان آن (شناسه ۱۴۰۱۱۵۰۳۴۰۰۰۳۰۰۰۲۰۵)
- ذخیره‌ساز اکسیژن کوردیریتی متخلخل تقویت شده با کنسانتره مخلوط عناصر نادر خاکی (شناسه ۱۴۰۲۵۰۳۴۰۰۰۳۰۰۱۲۸۰)
- روشی برای تهیه مخلوط اکسیدی عناصر نادر خاکی از پسماند فرایند تولید اسید فسفریک به روش تر (شناسه ۱۴۰۳۵۰۳۴۰۰۰۳۰۰۰۲۵۷)
- پروسکایت های مضاعف هیبرید عناصر نادر خاکی (Ce,La) /فلزات واسطه (Fe,Cu, Zn) فاقد فلزات گرانبها به عنوان کاتالیست مبدل کاتالیستی (شناسه ۱۴۰۳۵۰۳۴۰۰۰۳۰۰۱۶۹۳)

سایر فعالیت های آموزشی و پژوهشی

- ۱- تدریس دروس شیمی در مقطع کارشناسی ارشد و دکتری
- ۲- ارزیابی و داوری بیش از ۷۰ مورد پرونده ثبت اختراع
- ۳- ارزیابی و داوری بیش از ۶۰ مورد طرح ارائه شده به جشنواره جوان و بین الملل خوارزمی
- ۴- ارزیابی و داوری بیش از ۵۰ مورد مقاله برای ژورنال های معتبر علمی
- ۵- عضو کمیته تخصصی کاتالیست انجمن شیمی ایران
- ۶- عضو گروه تخصصی فناوری های شیمیایی جشنواره های جوان و بین الملل خوارزمی
- ۷- داور سامانه ملی ارزیابی اختراعات و نوآوری ها
- ۸- برگزاری کارگاه "مبدل کاتالیستی خودرو" در ساپکو