

## عادل رئیسی وانانی

استاد

دانشکده: دانشکده شیمی

گروه: شیمی فیزیک



### سوابق تحصیلی

مقطع تحصیلی	سال اخذ مدرک	رشته و گرایش تحصیلی	دانشگاه
کارشناسی	۱۳۷۶	دبیری شیمی	اصفهان
کارشناسی ارشد	۱۳۷۸	شیمی فیزیک	علم و صنعت ایران
دکترای تخصصی	۱۳۸۸	شیمی فیزیک	کاشان

### اطلاعات استخدامی

محل خدمت	عنوان سمت	نوع استخدام	نوع همکاری	پایه
دانشگاه کاشان	عضو هیأت علمی	قطعی	تمام وقت	

### سوابق اجرایی

مدیر نظارت و سنجش آموزشی از شهریور ۹۰ تا مرداد ۹۵  
سرپرست دبیرخانه جذب اعضای هیأت علمی از دیماه ۹۰ تا بهمن ۹۲  
مدیر گروه شیمی فیزیک از آبان ۹۷ تا آذر ۱۴۰۱  
مدیر برنامه ریزی، تحول و پایش آموزشی از مهر ۱۴۰۱ تا الآن

### جوایز و تقدیر نامه ها

استاد نمونه آموزشی دانشگاه کاشان در سال ۱۳۹۳  
استاد نمونه پژوهشی دانشگاه کاشان در سال ۱۳۹۶  
استاد نمونه پژوهشی دانشگاه کاشان در سال ۱۳۹۸  
استاد با چاپ مقاله دارای بالاترین نسبت IF به MIF در دانشگاه در سال ۱۳۹۹

## موضوعات تدریس تخصصی

شیمی محاسباتی

محاسبات کوانتومی در فاز جامد، مایع و گاز با استفاده از برخی کدهای محاسباتی

## فعالیت های علمی و اجرایی

عضو هیئت علمی دانشگاه کاشان از مهرماه ۱۳۸۸ تاکنون

## زمینه های تدریس

- مقطع کارشناسی: شیمی فیزیک ۱ و ۲، ۳، طیف سنجی مولکولی، شیمی فیزیک مهندسی، آزمایشگاه های شیمی فیزیک ۱ و ۲
- مقطع کارشناسی ارشد: شیمی فیزیک پیشرفته، مکانیک کوانتومی، سینتیک شیمیایی پیشرفته و شیمی محاسباتی
- مقطع دکتری: مباحث نوین در شیمی فیزیک

## مقالات در نشریات

۱. عادل رئیسی وانانی و زهرا شعبانی، Evaluation of the hydrogen adsorption onto Li and Li $\square$  decorated, *circumtrindene (C<sub>36</sub>H<sub>12</sub>): A theoretical study*, INT J HYDROGEN ENERG, ۲۰۱۷ ۹ ۰۱, ISI, SCOPUS
۲. عادل رئیسی وانانی و فاطمه شمسعلی، Influence of nitrogen doping in sumanene framework toward, *hydrogen storage: A computational study*, J MOL GRAPH MODEL, ۲۰۱۷ ۹ ۰۱, ISI, SCOPUS
۳. Experimental and Theoretical Investigation of Inhibition Efficiency of ۲- (۲-Hydroxyphenyl)- benzothiazole Using Impedance Spectroscopy, Experimental Design, and Quantum Chemical Calculations, IND ENG CHEM RES, ۲۰۱۷ ۸ ۰۱, ISI
۴. عادل رئیسی وانانی و مرضیه صفی پور، Investigation of carbon monoxide adsorption onto, *sumanene (C<sub>21</sub>H<sub>12</sub>) decorated with Li $\square$  ions toward its elimination*, CURR APPL PHYS, ۲۰۱۷ ۱۱ ۰۱, ISI, SCOPUS
۵. عادل رئیسی وانانی و فاطمه حاجی زاده، بررسی خصلت آروماتیکی برخی نانوساختارهای کربنی پلی سیکلی کاسه ای شکل، ISC, PubMed, ۲۰۱۷ ۱۰ ۰۱
۶. عادل رئیسی وانانی و سمیه مهردوست، Effect of boron doping in sumanene frame toward hydrogen, *physisorption: A theoretical study*, INT J HYDROGEN ENERG, ۲۰۱۶ ۹ ۰۱, ISI, SCOPUS
۷. ساجدین حسین پور کندری و عادل رئیسی وانانی، A mechanistic study for decomposition and, *reactivity of the C<sub>4</sub>F<sub>9</sub>O<sub>2</sub>H<sub>4</sub>O radical derived from HFE-۲۲۰۰ between ۲۰۰-۴۰۰ K*, Progress in Reaction Kinetics and Mechanism, ۲۰۱۶ ۹ ۰۱, ISI, SCOPUS
۸. سیامک نصیری کوخدان , عادل رئیسی وانانی , مسعود همدانیان, Ab initio and TD-DFT study of the, *structural and spectroscopic properties of C<sub>30</sub>H<sub>10</sub> as a new buckyball*, FULLER NANOTUB CAR, ۲۰۱۶ ۸ ۰۱, ISI, SCOPUS
۹. عادل رئیسی وانانی , مسعود همدانیان , سیامک نصیری کوخدان, Functionalization of the sumanene by, *nitrous oxide: A mechanistic study*, COMPUT THEOR CHEM, ۲۰۱۶ ۴ ۰۱, ISI, SCOPUS
۱۰. عادل رئیسی وانانی و سمیه بهرامیان, Diazomethane addition to sumanene as a subfullerene,

- structure: A theoretical mechanistic study, COMPUT THEOR CHEM, ۲۰۱۶ ۱۰ ۰۱, ISI, SCOPUS
۱۱. عادل رئیسی وانانی, مسعود همدانیان, سیامک نصیری کوخدان, Comprehensive theoretical study of the phenyl azide addition onto armchair (۵,۵) single wall carbon nanotube. COMPUT THEOR CHEM, ۲۰۱۶ ۱ ۰۱, ISI, SCOPUS
۱۲. وحید جباری و سایر, In,V-codoped TiO<sub>2</sub> nanocomposite prepared via a photochemical reduction, technique as a novel high efficiency visible-light-driven nanophotocatalyst. RSC ADV, ۲۰۱۵ ۸ ۰۱, ISI, SCOPUS
۱۳. عادل رئیسی وانانی و علی اصغر رضائی, Evaluation of the aromaticity of non-planar and bowl-shaped molecules by NICS criterion. J MOL GRAPH MODEL, ۲۰۱۵ ۶ ۰۱, ISI, SCOPUS
۱۴. Secondary Structure Effect on the Acidity of Histidine and Lysine-Based Peptides Model; A Theoretical Study. ۲۰۱۵ ۳ ۰۱, ISC
۱۵. عادل رئیسی وانانی, سمیه رحیمی, سیامک نصیری کوخدان, حسین ابراهیم پور کومله, Computational study of the gas phase reaction of hydrogen azide and corannulene: A DFT study. COMPUT THEOR CHEM, ۲۰۱۵ ۱۰ ۰۱, ISI, SCOPUS
۱۶. عادل رئیسی وانانی و ساجدین حسین پور کندری, A computational study of the mechanism and kinetics for gas-phase decomposition and reactivity of the C<sub>4</sub>F<sub>9</sub>OCH<sub>2</sub>O radical between ۲۰۰ and ۴۰۰ K. Progress in Reaction Kinetics and Mechanism, ۲۰۱۵ ۱ ۰۱, ISI, SCOPUS
۱۷. عادل رئیسی وانانی و لیلا علی حسینی, Evaluation of the Aromaticity of a Non-Planar Carbon Nano-Structure by Nucleus-Independent Chemical Shift Criterion: Aromaticity of the Nitrogen Doped Corannulene. ۲۰۱۴ ۶ ۰۱, ISC, SID
۱۸. عادل رئیسی وانانی, لیلا شاهرخ شهرکی, سیامک نصیری کوخدان, Theoretical study of the corannulene ozonolysis and evaluation of the various reaction paths. COMPUT THEOR CHEM, ۲۰۱۴ ۱۱ ۰۱, ISI, SCOPUS
۱۹. عادل رئیسی وانانی و لیلا علی حسینی, Computational investigation of the adsorption of molecular hydrogen on the nitrogen-doped corannulene as a carbon nano-structure. SURF SCI, ۲۰۱۳ ۱۱ ۰۱, ISI, SCOPUS
۲۰. علی اصغر رضائی, عادل رئیسی وانانی, سعید معصوم, An Application of Geometrical Isometries in Nonplanar Molecules. Iranian Journal of Mathematical Chemistry, ۲۰۱۶, ISI, ISC
۲۱. Z. Mirzaie, A. Reisi, & Vanani, M. Barati, S.M. Atyabi, The drug release kinetics and anticancer activity of the GO/PVA-curcumin nanostructures: The effects of the preparation method and the GO amount, Journal of Pharmaceutical Sciences, 44 2021
۲۲. M.H. Darvishnejad, A. Reisi, Vanani, DFT-D3 calculations of the charge-modulated CO<sub>2</sub> capture of N/Sc-embedded graphyne: Compilation of some factors, Journal of CO<sub>2</sub> Utilization, 29 1 2021
۲۳. M.H. Darvishnejad, A. Reisi, Vanani, Synergetic effects of metals in graphyne 2D carbon structure for high promotion of CO<sub>2</sub> capturing, Chemical Engineering Journal, 278 2020
۲۴. M. Ebadi, A. Reisi, Vanani, Methanol and carbon monoxide sensing and capturing by pristine and Ca-decorated graphdiyne: A DFT-D2 study, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 248 2020
۲۵. Teymourinia, Hakimeh et al., GQDs/Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/TiO<sub>2</sub> as a co-sensitized in DSSs: Improve the power conversion efficiency of DSSs through increasing light harvesting by using as-synthesized nanocomposite and mirror, Applied Surface Science, No. 512, pp. 145638, 2020 5 15
۲۶. Mofidi, Fatemeh, Reisi, Vanani, Adel, Investigation of the electronic and structural properties of graphyne oxide toward CO, CO<sub>2</sub> and NH<sub>3</sub> adsorption: A DFT and MD study, Applied Surface Science, No. 507, pp. 145134, 2020 3 30
۲۷. Z. Tabandeh, A. Reisi, & Vanani, Investigation of the adsorption behavior of two anticancer drugs on the pristine and BN-doped graphdiyne nanosheet: A DFT-D3 perception, Diamond and Related Materials, 125 2021