

## زهرا توانگر

دانشیار

دانشکده: دانشکده شیمی

گروه: شیمی فیزیک



### سوابق تحصیلی

مقطع تحصیلی	سال اخذ مدرک	رشته و گرایش تحصیلی	دانشگاه
کارشناسی	۱۳۷۳	شیمی محض	دانشگاه اصفهان
کارشناسی ارشد	۱۳۷۶	شیمی فیزیک	بوعلی سینا همدان
دکترای تخصصی	۱۳۸۸	شیمی فیزیک	دانشگاه اصفهان

### سوابق اجرایی

مدیر گروه شیمی فیزیک از شهریورماه 1393 تا آبان ماه 1397

مدیر گروه شیمی فیزیک از دی ماه 1401 تاکنون

### مقالات در همایش ها

1. زهرا توانگر، زهرا حاجی احمدی، 20th Iranian Physical Chemistry Conference، اراک، ۲۰۱۷، ۸-۲۰.
2. زهرا توانگر، هادی بشرنواز، Variation of the electronic property of zigzag boron nitride nanotubes by Al doping, A DFT study، 19th Iranian Chemistry Congress، شیراز، ۲۰۱۷، ۲-۲۱.
3. فریده کلاهدوزان، زهرا توانگر، حمیده کلاهدوزان، Physical Properties Of The Ambient Pressure Dried Silica Nanoporous Aerogel By The Co-Precursor Method، 19th Iranian Physical Chemistry Conference، زیباکنار، ۲۰۱۶، ۹-۱۳.
4. زهرا توانگر، هادی بشرنواز، Investigation of the interaction of furan molecule with (9, 0) boron nitride nanotubes، 2th international conference in new research on chemistry & chemical engineering، تهران، ۲۰۱۶، ۵-۵.
5. هادی بشرنواز، زهرا توانگر، Theoretical study of non-covalent adsorption of thiophene on boron nitride nanotubes، 6TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY، کرج، ۲۰۱۶، ۱۰-۲۶.
6. زهرا توانگر، مسعود همدانیان، هادی بشرنواز، بررسی خواص الکترونی و ساختاری نانولولههای بورنیترییدی خالص و ناخالص شده با سزیم، The International Conference on New Research in Chemistry and Chemical engineering، تهران، ۲۰۱۵، ۹-۱۷.

۷. زهرا توانگر، مسعود همدانیان، هادی بشرنواز، بررسی خواص الکترونی و ساختاری نانولوله‌های تک جداره بورنیترییدی خالص و ناخالص شده با آلومینیوم، NCWNN ۱۳۹۴، تهران، ۲۰۱۵، ۵ ۲۰.
۸. زهرا توانگر، مسعود همدانیان، پوریا مهدی زاده، Photocatalyst N-doped titanium oxide nanoparticles: Fabrication, characterization and investigation of the effect of doping on methyl orange dye degradation. The 9th International Chemical Engineering Congress & Exhibition (ICChE ۲۰۱۵)، شیراز، ۲۰۱۵، ۱۲ ۲۶.
۹. مریم ماله میر، بهرام خوشنویسان، زهرا توانگر، نانولوله های کربنی به عنوان مواد آند ذخیره کننده لیتیم: یک شبیه سازی دینامیک مولکولی، کنفرانس فیزیک ایران ۱۳۹۳، زاهدان، ۲۰۱۴، ۹ ۸.
۱۰. مسعود همدانیان، زهرا توانگر، بنفشه نوری کالوس، DFT Study of Electronic Properties of Na and K-Adsorbed (۱۰,۰) Single-Walled Carbon Nanotubes، ۱۷th Iranian Physical Chemistry Conference، تهران، ۲۰۱۴، ۱۰ ۲۱.
۱۱. مسعود همدانیان، زهرا توانگر، سارا ناصح، The Effect of Monovalent Functionalization on the Geometrical Properties of Zigzag Single-Walled Carbon Nanotubes، ۱۷th Iranian Physical Chemistry Conference، تهران، ۲۰۱۴، ۱۰ ۲۱.
۱۲. مسعود همدانیان، زهرا توانگر، سارا ناصح، The Electronic Characterization of the Monovalent Functionalization of Zigzag Single-Walled Carbon Nanotubes، ۱۷th Iranian Physical Chemistry Conference، تهران، ۲۰۱۴، ۱۰ ۲۱.

## مقالات در نشریات

1. Zahra Amaniseyed ,& Zahra Tavangar, Hydrogen storage on uncharged and positively charged Mg-decorated graphene, International Journal Of Hydrogen Energy, 2019
2. Z. Hajiahmadi ,& Z. Tavangar, Extensive theoretical study of corrosion inhibition efficiency of some pyrimidine derivatives on iron and the proposal of new inhibitor, Journal of Molecular Liquids, 2019
3. Zahra Hajiahmadi , Zahra Tavangar , Hadi Behzadi, A DFT Study of the Reaction between Benzopyrene Epoxide and C60 Derivatives as Possible Anticancer Activity, Polycyclic Aromatic Compounds, 2019
4. Seyedeh Leila Fani , Zahra Tavangar , Ali Kazempour, Boron decorated graphene nanosheet as an ultrasensitive sensor: the role of coverage, Journal of Molecular Modeling, 2019
5. A. Payvand ,& Z. Tavangar, Computational study on the functionalization of BNNC with pyrrole molecule, Superlattices and Microstructures, 2018
6. Z. Hajiahmadi ,& Z. Tavangar, Investigating the adsorption of nitrobenzene on M/Pd (1 1 1) bimetallic surface as an effective catalyst, Applied Surface Science, 2018
7. P. Mehdizadeh ,& Z. Tavangar, Photocatalyst Ag@N/TiO<sub>2</sub> nanoparticles: Fabrication, characterization, and investigation of the effect of coating on methyl orange dye degradation, Journal of Nanostructures, 2017, ISC
8. Z. Tavangar , M. Hamadani , H. Basharnavaz, Studying the effects of the configuration of doped Al atoms on the conductive properties of boron nitride nanotube using density functional theory, Chemical Physics Letters, 2017, ISI
9. Z. Tavangar ,& N. Zareie, Efficiency improvement of new Tetrathienoacene-based dyes by enhancing donor, acceptor and bridge units, a theoretical study, SPECTROCHIM ACTA A, 2016, ISI
10. Z. Tavangar , M. Hamadani , H. Basharnavaz, Variation of the electronic properties of zigzag boron nitride nanotubes by Al doping, A DFT study, Molecular Physics, 2016, ISI
11. M. Hamadani Z. Tavangar S. Naseh, The modification of benzene adsorption on zigzag single-wall carbon nanotubes by carboxylation, Materials Research Express, 2016
12. M. Hamadani , Z. Tavangar , S. Naseh, Improvement of electronic properties of carboxylated zigzag single wall carbon nanotubes by interaction with benzene derivatives, Current Applied Physics, 2015
13. M. Hamadani , Z. Tavangar , B. Noori, Modification of conductive properties of (10, 0)

- zigzag single-walled carbon nanotubes (SWCNT) by alkali metals absorption, *Journal of Molecular Structure*, 2014
- M. Hamadani, Z. Tavangar, B. Noori, Modification of the electronic properties of zigzag ( $n = 5-10$ ) and armchair ( $n = 3, 5$ ) carbon nanotubes by K atom adsorption, *Structural Chemistry*, 2014
- M. Hamadani, Z. Tavangar, S. Naseh, The structural and electronic properties of (10,0) zigzag Single-Wall Carbon Nanotubes modified by thiophene groups, *Chemical Physics Letters*, 2013
- Zahra Tavangar, Diels–Alder [4+2] Cycloadditions of C<sub>20</sub> with Some Diene and 1,2-Dioxo Compounds: A Theoretical Study, *Journal of Nanostructures*, 2012