



UNIVERSITETI I PRISHTINËS
"HASAN PRISHTINA"
FAKULTETI I SHKENCAVE MATEMATIKE NATYRORE

Rr. Eqrem Çabej, 10000 Prishtinë, Republika e Kosovës
Tel: +381-38-249-873 • E-mail: fshmn@uni-pr.edu • www.uni-pr.edu

FShMN

Ref. nr.

5240

Prishtinë, Dt.

02.10.2023

RAPORT I VLERËSIMIT TË DORËSHKRIMIT TË PUNIMIT TE DIPLOMES
MASTER

FAKULTETI	FShMN
Departamenti/ Programi	Departamenti i Kimisë
Projektpropozimi	Studimi teorik (DFT dhe Monte Carlo) i adsorbimit të agjentëve nervorë: Tabun, Sarin, VX dhe Novichok A-234 në sipërfaqen e Nanokonëve të karbonit <i>"Theoretical Study (DFT and Monte Carlo) of the Adsorption of Nerve Agents: Tabun, Sarin, VX, and Novichok A-234, on the Surface of Carbon Nanocones"</i>
Kandidati	Majlinda Haliti
Mentori	Prof. dr. Avni BERISHA
Aprovimi i projekt propozimit në	Datë: 24-11-2022
Këshillin e Fakultetit	Vendimi nr.: Ref. Nr. 7258

Kandidatja punimin e saj e fillon me përshkrimin e agjenteve nervorë, me theks të veçantë të atyre të cilët i përkasin grupit të organofosfateve (OPs) e të cilët konsiderohen si agjentët kimik të luftës (helme luftarake). Përshkruhet se si këto komponime mund të ndahen në dy lloje (sipas përdorimit): kundër njerëzve dhe atyre që përdoren kundër bimëve. Kandidatja vijon me përshkrimin rreth klasave kryesore të kolinsterazave – me qëllim të përshkrimit të mekanizmit veprues të agjenteve nervorë. Pra, mekanizmi primar i toksicitetit të të gjitha agjenteve nervorë përshkruhet të jetë inhibimi i enzimës acetyl kolinesterazë (AChE). Pjesë përberëse e kësaj kaptine është edhe diskutimi përmbajtësor rreth ekspozimit ndaj agjentëve nervorë dhe kontaminimit të mundshëm. Në veçanti në fokus është edhe përmbledhja e pjesëve të

ndërlidhura me dekontaminimin dhe kujdesin mbështetës e veprimet me antidotë (atropinë, oksime . . .) në rast ekspozimi ndaj këtyre helmeve kimike.

Në kapitullin e dytë, shtjellohen nanokonet e karbonit – materiale me veti unike të cilat kandidatja i ka analizuar si adsorbent ndaj agjentëve nervorë: Tabun, Sarin, VX dhe Novichok A-234. Në trajtimin e këtij kapitulli jepen informata shumë të vlefshme shkencore, rreth strukturës, përfitmit laboratorik e në shkallë më të madhe të nanokoneve të karbonit.

Kapitulli III-të përshkruan bazën e detajuar të metodave teorike me të cilat është shërbyer kandidatja për të realizuar hulumtimin në fjalë. Kapitulli përfshinë përshkrimin e Dinamikës Molekulare (si pjesë e metodave të mekanikës molekulare), fushën e forcave , metodën Monte Carlo (duke diskutuar me theks të veçantërreth përparësive të kësaj metode), pasuar metodën DFT.

Në pjesën pasuese paraqiten dhe diskutohen rezultatet e llogaritjeve teorike të realizuara. Pra, studimi si qëllim thelbësor ka patur hulumtimin e ndërveprimeve të agjentëve nervorë me nanokonet e karbonit (CNCs). Përmes rezultateve të përfituara, kandidatja arrin në konkluzion të rendësishme, përfshirë pikat vijuese:

- nanokonet e karbonit janë të efektshme për të kapur (adsorbuar) agjentët nervorë.
- vlera negative e energjisë së adsorbimit tregon se agjentët nervorë kanë tendencën të adsorbohen spontanisht në sipërfaqen e nanokonëve të karbonit.
- rezultatet e llogaritjeve DFT tregojnë se molekulat e agjentëve nervorë transferojnë ngarkesën në sipërfaqen e nanokonëve të karbonit gjatë procesit adsorptive të tyre.
- llogaritjet DFT konfirmojnë se pjesa e brendshme e nanokonëve ka një afinitet më të lartë për të adsorbuar agjentët nervorë, rreth -10 kcal/mol më shumë se sa pjesa e jashtme e nanokonëve.
- simulimet e dinamikës molekulare dhe rezultatet Monte Carlo (MC) tregojnë se agjentët nervorë kanë një gjeometri të ngjashme të adsorbimit, duke qëndruar paralel


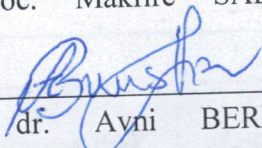
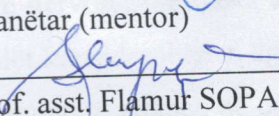
me sipërfaqen e nanokonëve të karbonit.

Në bazë të gjithë kësaj që u tha më lartë, komisioni profesional sjellë këto vlerësime: Autorja **Majlinda HALITI** në dorëshkrimin e temës së diplomës në studime master me titull "**Studimi teorik (DFT dhe Monte Carlo) i adsorbimit të agjentëve nervorë: Tabun, Sarin, VX dhe Novichok A-234 në sipërfaqen e Nanokonëve të karbonit**": a) temën e ka dorëzuar në formë të plotë ashtu si parashihet me statut; b) rezultatet e veta i ka trajtuar në bazë shkencore; c) vlerësojmë se duke patur parasysh cilësinë e dorëshkrimit të dorëzuar kandidatja ka fituar aftësi të shkëlqyeshme në aplikimin e llogaritjeve të avancuara teorike në studimin e vetitë adsorbitive të nanokoneve të karbonit ndaj molekulave të agjentëve nervorë dhe d) punimi është i rëndësishëm sepse vë në pah mundësin e aplikimit të nanokoneve të karbonit si material me performacë të lartë në adsorbimin e agjentëve nervorë.

Në bazë të gjithë kësaj që u tha më lartë, komisioni profesional vlerëson pozitivisht këtë dorëshkrim të punimit të masterit dhe i propozon Këshillit Mësimor Shkencor të FShMN-së që kandidatës Majlinda HALITI ia aprovoj atë si bazë për arritjen e gradës shkencore Master i Shkencave Kimike – drejtimi Kimi Analitike dhe Mjedis.

Prishtinë, 29-09-2023

Komisioni:

1. 
Prof. asoc. Makfire SADIKU
– kryetar
2. 
Prof. dr. Avni BERISHA
– anëtar (mentor)
3. 
Prof. asst. Flamur SOPAJ – anëtar