



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](mailto:fshmn@uni-pr.edu) • [www.uni-pr.edu](http://www.uni-pr.edu)

FShMN

Ref. nr. 7934 Prishtinë, Dt. 27/12/2023


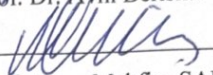
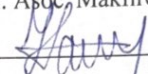
RAPORT VLERËSIMI TË DORËSHKRIMIT TË PUNIMIT TE DIPLOMES  
MASTER

FAKULTETI	FShMN
Departamenti/ Programi	Departamenti i Kimisë / Kimi fizike dhe Inorganike
Projektpropozimi	Efekti i shtresave karboksifenileve të grefuara mbi pikat kuantike të karbonit ndaj vetive adsorbitive në Metil Blu . Një studim teorik dhe eksperimental
Kandidati	Ardhmeri ALIJA
Mentori	Prof.dr. Avni BERISHA
Aprovimi i projekt propozimit në Këshillin e Fakultetit	Datë: 28.02.2023 Vendimi nr.: Ref. Nr. 1004
Vlerësimi i dorëshkrimit Pikat kuantike të karbonit (CQD) janë një grup i nanogrimcave sferike të karbonit me fluoreshencë me një grimcë madhësi rreth 10 nm, kanë biokompatibilitet të shkëlqyeshëm që i bën këto materiale të jenë premtuese për nano-bioteknologjinë si dhe në shumë fusha të tjera si bioimazheri, bartje e targetuar e barnave, optoelektronikë . . . Burimet natyrore të karbonit mund të përdoren për përgatitjen e CQD-ve për shkak të kostos së ulët, janë miqësore me mjedisin dhe gjerësisht të disponueshme. Grefimi i sipërfaqeve të CQD-ve realizohet përmes reduktimit kimik të kripërave arildiazonium në tretësirë duke përdorur duke përdorur acidi L-askorbik. Duke e përdorur tretësirën e Metilit Blu është vlerësuar ndikimi i shtresave të grefuara karboksifenile në vetitë adsorbitive të CQD-ve. Me përdorimin e spektroskopisë FTIR, u identifikuan grupet funksionale në CQD dhe CQD-Ph-COOH. Analiza e përqendrimit të molekulës së Metilit Blu gjatë adsorbimit është realizuar përmes spektroskopisë UV-VIS. Teknikat eksperimentale mundësuan në sqarimin e strukturës dhe funksionit të molekulave, por ato nuk mund të ofrojnë një kuptim të plotë të sistemeve komplekse. Prandaj, modele dhe teori nevojiten për të plotësuar eksperimentet. Simulimet kompjuterike kanë revolucionarizuar dallimin midis eksperimentit dhe teorisë.	

Një metodë e fuqishme simulimi është "Teoria e funksionalit të densitetit (DFT)" që përdor mekanikën kuantike për të llogaritur një sërë të vetive të sistemeve. Duke marrë parasysh interesimin për spektroskopinë dhe strukturën elektronike, është përdorur TD-DFT e cila mund të marrë në konsideratë edhe gjendjet e eksituar elektronike. Pra, me anë të TD-DFT është bërë llogaritja e spektrave të fotoabsorbimit. Po ashtu një tjetër metodë e përdorur është Monte Carlo, e cila është një mjet i fuqishëm matematikor që përfshin gjenerimin e konfiguracioneve të rastësishme të parametrevë për të eksploruar sjelljen e sistemeve tona komplekse të cilat përfshijnë : 1 CQD (CQD-Ph-COOH) + 1500 molekula ujë + 1 molekulë adsorbati (Metil Blu).

Prishtinë, 27.12.23

Komisioni:

1.   
/ Prof. Dr. Ayni Berisha – anëtar/
2.   
/ Prof. Assoc. Makfire SADIKU – anëtar/
3.   
/ Prof. Ass. Jeton HALILI – anëtar/

P.S. Numri i faqeve shtohet sipas nevojës.