



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.

7933

Prishtinë, Dt.

22/12/2023

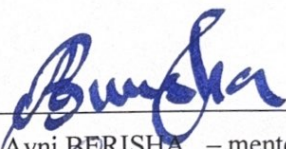
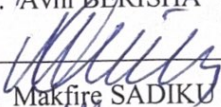
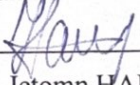
RAPORT VLERËSIMI TË DORËSHKRIMIT TË PUNIMIT TE DIPLOMES
MASTER

| | |
|--|--|
| FAKULTETI | FShMN |
| Departamenti/ Programi | Departamenti i Kimisë / Kimi Fizike dhe Inorganike |
| Projektpropozimi | Një studim teorik dhe eksperimental i vetive adsorbitive të pikave kuantike të karbonit të modifikuara me shtresa nitrofenile si adsorbent ndaj metil violet |
| Kandidati | Rilinda PLAKAJ |
| Mentori | Prof. dr. Avni BERISHA |
| Aprovimi i projekt propozimit në Këshillin e Fakultetit | Datë: 28.02.2023 Vendimi nr.: Ref. Nr. 1005 |
| Vlerësimi i dorëshkrimit Pikat kuantike të karbonit paraqesin një klasë unike të alotropeve të karbonit dimensionet e të cilave janë në rangun 10 nm. Falë vetive të tyre optike, elektrike e biosensitive - ato kanë tërhequr vëmendjen e thellë në komunitetin shkencor. Punimi në fjalë fokusohet në modifikimin dhe eksplorimin e vetive adsorbitive të këtij materiali ndaj molekulës metil violet. Për më tepër, pjesë e veçantë hulumtimit është edhe modifikimi i sipërfaqes së CQD me shtresa nitrofenile të cilat priret të jap rezultate akoma më të larta adsorbitive. Rezultatet eksperimentale janë bazuar në teknikën spektrofotometrike UV-VIS. Karakterizimi i të gjitha produkteve të sintezave duke filluar nga pikat kuantike të karbonit, krija diazonium tetrafluoroborat e nitrobenzenit, pikat kuantike të karbonit të modifikuara me shtresa nitrofenile janë realizuar përmes teknikave spektroskopike UV-VIS dhe FTIR. Pjesa eksperimentale bazohet në vlerësimin e adsorbimit të indikatorit Metil Violet në CQD dhe CQD të modifikuar me shtresa grupesh nitrofenile në mjedisin ujor acidik dhe bazik. Pasi Metil Violet është indikator, struktura kimike e të cilit | |

ndërron varësisht nga intervali i pH-së, të gjitha matjet eksperimentale janë realizuar në pH=2 dhe pH=9, pH këto që i konsistojnë strukturave kimike stabile të indikatorit përkatës. Kalkulimet teorike janë realizuar përmes: metodës stokastike (Monte Carlo) dhe Teorisë së Funkcionalit të Densitetit të Varur në Kohë (TD-DFT). Ndërtimi i gjeometrive si dhe optimizimi i strukturave fillestare për sistemet e përfshira në hulumtim realizohet përmes Mekanikës Molekulare (MM). Nga teknika Monte Carlo janë përfutur të dhëna të aspektit kualitativ përfshirë pozitat e favorshme për interaksione dhe diagramet e shpërndarjes së energjisë për të dy sistemet në interaksion. Spektrat e fotoabsorbimit për: CQD, CQD të funksionalizuar, Metil Violet, sistemin CQD + Metil Violet si dhe atë CQD-PhNO₂ + Metil Violet janë realizuar përmes TDDFTB/DZ duke përdorur funksionalin RPBE. AMS (SCM – GUI 2021.1) është përdorur për vizualizimin e orbitaleve HOMO-LUMO të llogaritura për të gjitha sistemet. Njëherit këto kalkulime tregojnë edhe interaksionet prezente në sistem si dhe vlerat e energjive totale.

Prishtinë, 27-12-2023

Komisioni:

1.  _____
/ Prof. Avni BERISHA – mentor/
2.  _____
/ Prof. Makfere SADIKU – mentor/
3.  _____
/ Prof. Jetomn HALILI – anëtar/

P.S. Numri i faqeve shtohet sipas nevojës.