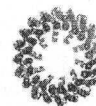


SVEUČILIŠTE U SPLITU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
 Poslijediplomski sveučilišni studij BIOFIZIKA



National PhD Programme with International Participation

Biophysics

www.pmfst.hr/biophysics

IZVJEŠTAJ O OCJENI DOKTORSKOG RADA		
OPĆI PODACI DOKTORANDA/DOKTORANDICE:		
Ime i prezime doktoranda/doktorandice, titula:	Marjan Krstić, mag. phys.	
Nositelj studija:	Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Splitu	
Naziv studija:	Poslijediplomski sveučilišni (doktorski) studij Biofizika	
Matični broj doktoranda/doktorandice:	14/2011	
Naslov doktorskog rada:	<i>Jezik pisanja rada</i>	Engleski jezik
	<i>Hrvatski:</i>	Uloga metalnih nanoklastera u katalizi za pročišćavanje pogonskog plina gorivnih ćelija i spremanje vodika
	<i>Engleski:</i>	Role of metallic nanoclusters in catalysis for fuel cell feed gas purification and hydrogen storage
Područje/polje/grana (ako se doktorski studij izvodi u grani):	Doktor prirodnih znanosti	
MENTOR(I)		
	Titula, ime i prezime:	Ustanova, država:
Prvi mentor:	prof. dr. sc. Paško Županović	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
Drugi mentor:	prof. Dr. Dr. h. c. Vlasta Bonačić-Koutecký	Sveučilište u Splitu
Sjednica Fakultetskog vijeća na kojoj je prihvaćena tema doktorskog rada:	110 sjednica Fakultetskog vijeća PMF-a, Split (28. rujna 2016.)	
Izabrano povjerenstvo za ocjenu doktorskog rada	Titula, ime i prezime:	Ustanova, država:
	1. prof. dr. sc. Ante Bilušić, predsjednik	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
	2. prof. dr. sc. Franjo Sokolić, član	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
	3. dr. sc. Anita Kriško, član	Mediterranski institut za istraživanje života, Split, Hrvatska
	4. dr. sc. Mile Ivanda, zamjenski član	Institut Ruđer Bošković, Zagreb, Hrvatska
5.		
Sjednica Fakultetskog vijeća u okviru koje je imenovano Povjerenstvo:	110 sjednica Fakultetskog vijeća PMF-a, Split (28. rujna 2016.)	

OCJENA DOKTORSKOG RADA

(ocjena mora sadržavati izvorni znanstveni doprinos i novo otkriće)

Doktorska disertacija pristupnika Marjana Krstića pisana je po „skandinavskom modelu“ koji uz prvo, uvodno poglavlje i drugo, poglavlje s opisom strukture i ciljeva disertacije uključuje šest znanstvenih radova organiziranih u dva poglavlja (treće poglavlje sadrži dva, a četvrto četiri rada gdje svaki rad čini jedno potpoglavlje) te posljednje, peto, poglavlje sa zaključcima i perspektivom za daljnja istraživanja. Uz to, rad sadrži i dodatak s dva znanstvena rada kao potpoglavljima-dodacima. Rad je pisan na engleskom jeziku, sadrži 100 stranica, 35 slika, 2 tablice, 2 sheme, 115 bibliografskih jedinica te sljedeće znanstvene radove organizirane u potpoglavlja odnosno dodatke:

- III. poglavlje, potpoglavlje III.1: Sandra M. Lang, ... M. Krstić, Vlasta Bonačić-Koutecký, *Gas-Phase Synthesis and Structure of Wade-Type Ruthenium Carbonyl and Hydrido Carbonyl Clusters*, *Journal Of Physical Chemistry A* **118** (2014) 8356-8359, sa 2 slike i 38 zasebnih bibliografskih jedinica;
- III. poglavlje, potpoglavlje III.2: Sandra M. Lang, Thorsten M. Bernhardt, M. Krstić, Vlasta Bonačić-Koutecký, *The Origin of the Selectivity and Activity of Ruthenium-Cluster Catalysts for Fuel-Cell Feed-Gas Purification: A Gas-Phase Approach*, *Angewandte Chemie-International Edition* **53** (2014) 5467-5471, sa 4 slike i 21 zasebnom bibliografskom jedinicom;
- IV. poglavlje, potpoglavlje IV.1: Marjan Krstić et al., *ESI/MS Investigation of Routes to the Formation of Silver Hydride Nanocluster Dications $[Ag_nH_{n-2}L_m]^{2+}$ and Gas-phase Unimolecular Chemistry of $[Ag_{10}H_8L_6]^{2+}$* , *International Journal of Mass Spectroscopy*, u tisku (2016), s 5 slika, 2 sheme i 34 zasebne bibliografske jedinice;
- IV. poglavlje, potpoglavlje IV.2: Marion Girod, Marjan Krstic et al., *Formation and Characterisation of the Silver Hydride Nanocluster Cation $[Ag_3H_2((Ph_2P)_2CH_2)]^+$ and Its Release of Hydrogen*, *Chemistry-A European Journal* **20** (2014) 16626-16633, sa 6 slika i 28 zasebnih bibliografskih jedinica;
- IV. poglavlje, potpoglavlje IV.3: Athanasios Zavras, George N. Khairallah, Marjan Krstić, et al., *Ligand-induced substrate steering and reshaping of $[Ag_2(H)]^+$ scaffold for selective CO_2 extrusion from formic acid*, *Nature Communications* **7** (2016) 1-8, s 5 slika i 55 zasebnih bibliografskih jedinica;
- IV. poglavlje, potpoglavlje IV.4: Athanasios Zavras, Marjan Krstić, et al., *Selectivity Effects in Bimetallic Catalysis: Role of the Metal Sites in the Decomposition of Formic Acid into H_2 and CO_2 by the Coinage Metal Binuclear Complexes $[dppmMM'(H)]^+$* , na recenziji, sa 3 slike i 18 zasebnih bibliografskih jedinica;
- prilog, potpoglavlje 1: Irene Fleischer, Denisia M. Popolan, Marjan Krstić, et al., *Composition dependent selectivity in the coadsorption of H_2O and CO on pure and binary silver-gold clusters*, *Chemical Physics Letters* **565** (2013) 74-79, sa 4 slike, 1 tablicom i 47 zasebnih bibliografskih jedinica;
- prilog, potpoglavlje 2: Sandra M. Lang, Thorsten M. Bernhardt, M. Krstić, Vlasta Bonačić-Koutecký, *Water activation by small free ruthenium oxide clusters*, *Physical Chemistry Chemical Physics* **16** (2014) 26578-26583, sa 6 slika, 1 tablicom i 36 zasebnih bibliografskih jedinica.

Glavni je cilj rada teorijsko istraživanje svojstava metalnih nanoklastera u smislu njihove upotrebe za pročišćavanje plinova i korištenje kao spremnika vodika u vodikovim gorivnim člancima. Prvo, uvodno poglavlje daje pregled trenutne tehnologije te povijesni pregled korištenja nanoklastera u vodikovim gorivnim člancima, opise dosadašnjih saznanja korištenja rutenijevih nanoklastera za pročišćavanje plinova te nanoklastera srebra, zlata i bakra kao spremnika vodika. Na kraju je dan opis korištenih teorijskih metoda (teorija funkcionala gustoće, računanje energetske disperzije, molekularna dinamika i strukturna karakterizacija) te pratećih eksperimentalnih metoda koje su korištene u suradnim laboratorijima. U drugom su poglavlju prikazani struktura i ciljevi disertacije.

Treće poglavlje opisuje provedena teorijska i eksperimentalna istraživanja korištenja nanoklastera rutenija (Ru_n^+ , $n = 4-6$) u svrhu pročišćavanja plina koji služi kao gorivo vodikovih gorivnih članaka. Rezultati omogućuju strukturnu karakterizaciju plinovite faze rutenijevih karbonilnih i hidrokarbonilnih nanoklastera te izvorišta katalitičke selektivnosti i aktivnosti pojedinih rutenijevih nanoklastera. Potpoglavlje III.1 teorijski pokazuje da je iznimna strukturna stabilnost rutenijevih karbonilnih i hidrokarbonilnih nanoklastera posljedica efektivnog atomskog broja. U potpoglavlju III.2 teorijski je objašnjeno zašto se rutenijevi nanoklasteri vežu uz CO , ali ne i na CO_2 , što je vrlo korisna osobina jer tako ne dolazi do pretvorbe CO_2 u metan. Nadalje, pokazano je da se na njih lagano vežu i atomi vodika, što je i eksperimentalno potvrđeno. Nadalje, teorijski su objašnjeni mehanizmi pretvorbe CO u metan.

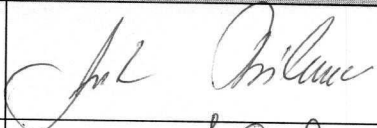
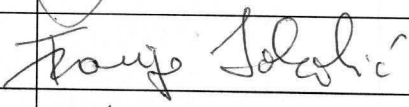
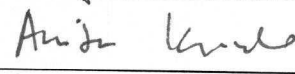
Četvrto poglavlje se bavi upotrebom hidrida nanoklastera srebra, zlata i bakra kao spremnika vodika. Kombinacijom teorijskih računa (teorija funkcionala gustoće i molekularna dinamika) i eksperimenata daje se detaljan uvid u mehanizme koji dovode do oslobađanja vodika uz promjenu strukture srebrenih nanoklastera bez (potpoglavlje IV.1) i sa svjetlosnom pobudom (IV.2). U potonjem slučaju je objašnjeno i uočeno odstupanje teorijskih predviđanja od eksperimentalnih rezultata. Potpoglavlje IV.3 bavi se teorijskim modeliranjem te eksperimentima na ligiranim kationima srebrenog hidrida s ciljem korištenja u katalitičkim reakcijama mravlje kiseline. Dobiveni teorijski i eksperimentalni rezultati slažu se izvrsno. Ova su istraživanja proširena na binuklearne komplekse nanoklastera srebra, zlata i bakra s ciljem optimizacije svojstava otpuštanja vodika (potpoglavlje IV.4). Ponovno se teorijski rezultati izvrsno poklapaju s eksperimentima.

Sažetci doktorskog rada, dani na hrvatskom i engleskom jeziku, precizno ističu njegove glavne rezultate. Navedena literatura je odgovarajuća i iscrpna.

Mišljenje i prijedlog:

Mišljenja smo da doktorska disertacija Marjana Krstića predstavlja originalni znanstveni doprinos i zadovoljava sve uvjete da bude prihvaćena. Poznate znanstvene činjenice su obrazložene jasno i sustavno te popraćeni odgovarajućim izborom znanstvene literature. Rezultati istraživanja, prikazani u obliku sedam objavljenih i jednog znanstvenog članka poslanog na recenziju, jasni su i pregledni, a korištene metode su detaljno opisane u uvodnom (prvom) te sažeto, sukladno pravilima pisanja znanstvenih radova, u trećem i četvrtom poglavlju. Posebno ističemo činjenicu da su teorijska modeliranja načinjena u sklopu ovoga rada potvrđena nizom eksperimenata. Važan rezultat ove disertacije je da se prikazani rezultati mogu primijeniti za pročišćavanje plinova i korištenje kao spremnika vodika u vodikovim gorivnim člancima.

Na temelju navedenoga predlažemo da se predloženi doktorska disertacija prihvati te da pristupnik Marjan Krstić pristupi njenoj obrani.

Izabrano povjerenstvo za ocjenu doktorskog rada	Titula, ime i prezime, ustanova, država:	Potpis:
	1. prof. dr. sc. Ante Bilušić, predsjednik	
	2. prof. dr. sc. Franjo Sokolić, član	
	3. dr. sc. Anita Kriško, član	
	4.	
	5.	

Napomena (po potrebi):

U Splitu, 28. studenog 2016.



SVEUČILISTE U SPLITU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split

IBAN: HR 17 23300031100068831
SWIFT(BIC): SOGE HR22
MATIČNI BROJ: 3199622
OIB: 20858497843

Klasa:643-02/16-13/0004
Ur.broj:2181-204-01-05-16-0008
Split, 30. studenoga 2016. god.

Na temelju odredaba Zakona o znanstvenoj djelatnosti i visokom obrazovanju, Statuta Prirodoslovno – matematičkog fakulteta u Splitu, te prijedloga Povjerenstva za ocjenu i obranu doktorskog rada u sastavu: prof.dr.sc. Ante Bilušić, prof.dr.sc. Franjo Sokolić i doc.dr.sc. Anita Kriško, Fakultetsko vijeće Prirodoslovno-matematičkog fakulteta na 112. sjednici održanoj dana 30. studenoga 2016. godine, jednoglasno je donijelo

ODLUKU

Prihvaća se Izvješće Povjerenstva za ocjenu i obranu doktorskog rada kojim se prihvaća doktorski rad Marjana Krstića, pod naslovom „Uloga metalnih nanoklastera u katalizi za pročišćavanje pogonskog plina gorivih ćelija i spremanje vodika“.

Dekanica

