

**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		
<b>OPĆI PODACI DOKTORANDA/DOKTORANDICE:</b>		
Ime i prezime doktoranda/doktorandice, titula:	Željka Sanader, mag. phys.	
Nositelj studija:	Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Splitu	
Naziv studija:	Poslijediplomski sveučilišni (doktorski) studij Biofizika	
Matični broj doktoranda/doktorandice:	15/2011	
Naslov dokorskog rada:	<i>Jezik pisanja rada</i>	Engleski jezik
	<i>Hrvatski:</i>	Optička svojstva nanoklastera plemenitih metala unutar hibridnih sustava i njihova primjena u biosenzorici
	<i>Engleski:</i>	Optical properties of noble metal nanocluster hybrids and their potential for biosensing
Područje/polje/grana (ako se doktorski studij izvodi u grani):	Doktorica prirodnih znanosti	
<b>MENTOR(I)</b>		
	<b>Titula, ime i prezime:</b>	<b>Ustanova, država:</b>
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 dokorskog rada:	28. rujna 2016. g. na 110 sjednici Fakultetskog vijeća PMF-a, Split	
Izabrano povjerenstvo za ocjenu dokorskog rada	<b>Titula, ime i prezime:</b>	<b>Ustanova, država:</b>
	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:	28. rujna 2016. g. na 110 sjednici Fakultetskog vijeća PMF-a, Split	



### OCJENA DOKTORSKOG RADA

(ocjena mora sadržavati izvorni znanstveni doprinos i novo otkriće)

Doktorska disertacija pristupnice Željke Sanader pisana je po „skandinavskom modelu“ koji uz prvo, uvodno poglavlje uključuje pet znanstvenih radova (svaki je rad jedno poglavlje) te posljednje, sedmo, poglavlje sa zaključcima i perspektivom za daljnja istraživanja. Uz to, rad sadrži i dva dodatka s dva znanstvena rada kao posebnim poglavljima-dodacima. Rad je pisan na engleskom jeziku, sadrži 85 stranica, 33 slike, 4 tablice, 2 sheme, 115 bibliografskih jedinica te sljedeće znanstvene radove organizirane u poglavlja odnosno dodatke:

- 2. poglavlje: Željka Sanader et al., *Cation induced electrochromism in 2,4-dinitrophenylhydrazine (DNPH): Tuning optical properties of aromatic rings*, Chemical Physics Letters **570** (2013) 22-25, s 3 slike i 37 zasebnih bibliografskih jedinica;
- 3. poglavlje: Željka Sanader et al., *The nature of electronic excitations at the metal-bioorganic interface illustrated on histidine-silver hybrids*, Physical Chemistry Chemical Physics **16** (2014) 1257-1261, s 5 slika i 45 zasebnih bibliografskih jedinica;
- 4. poglavlje: Isabelle Russier-Antoine, ... Željka Sanader et al., *Tuning Ag-29 nanocluster light emission from red to blue with one and two-photon excitation*, Nanoscale **8** (2016) 2892-2898, sa 4 slike i 37 zasebnih bibliografskih jedinica;
- 5. poglavlje: Željka Sanader et al., *Two-photon absorption of ligand-protected Ag-15 nanoclusters. Towards a new class of nonlinear optics nanomaterials*, Physical Chemistry Chemical Physics **18** (2016) 12404-12408, s 3 slike i 27 zasebnih bibliografskih jedinica;
- 6. poglavlje: Isabelle Russier-Antoine, ... Željka Sanader et al., *Ligand-Core NLO-phores: a combined experimental and theoretical approach of the two-photon absorption and two-photon excited emission properties of small ligated silver nanoclusters*, Nanoscale, poslano na recenziju, sa 6 slika, 1 tablicom i 45 zasebnih bibliografskih jedinica;
- Dodatak A: Bruno Bellina, ... Željka Sanader et al., *Formation and characterization of thioglycolic acid-silver cluster complexes*, Dalton Transactions **42** (2013) 8328-8333, s 8 slika i 25 zasebnih bibliografskih jedinica;
- Dodatak B: Marion Girod, Željka Sanader et al., *UV Photodissociation of Proline-containing Peptide Ions: Insights from Molecular Dynamics*, Journal of the American Society For Mass Spectrometry **26** (2015) 432-443, sa 6 slika, 3 tablice, 2 sheme i 44 zasebne bibliografske jedinice.

Glavni je cilj rada teorijsko objašnjenje linearnih i nelinearnih optičkih svojstava hibridnih sustava malih metalnih nanoklastera te njihovom potencijalnom primjenom za bioslikavanje i biosenzoriku. Prvo, uvodno poglavlje najprije daje opis koncepta nanoklastera kao biosenzora i načina bioslikavanja da bi se potom opisale metode proizvodnje uzoraka te njihove eksperimentalne i teorijske karakterizacije. Potom slijede dva potpoglavlja s detaljnim opisima mehanizama linearnih i nelinearnih optičkih karakteristika nanoklastera te naposljetku opis upotrijebljenih teorijskih metoda (teorija funkcionala gustoće i njena vremenski ovisna varijanta).

U drugom i trećem poglavlju prikazani su rezultati linearnih optičkih svojstava aromatskih prstena i hibrida histidina sa srebrom. Utjecaj različitih iona je u drugom poglavlju modeliran za slučaj 2,4-DNPH koji se javlja u dva izomera. Pokazano je da su optički spektri obaju izomera, radi Starkova efekta, slični te da je 2,4-DNPH kandidat za dokazivanje prisustva naboja koji se nalazi u blizini proteina. Tema trećeg poglavlja je izučavanje povećanja detekcije koncentracije i svojstava histidina, vrlo važne amino-kiseline čija neravnoteža ukazuje na mogućnost različitih bolesti. Pokazano je da se nanoklasteri srebra poglavito vežu uz amino i karboksilne grupe histidina. Nadalje, određene su glavne vrste elektronskih ekscitacija u hibridima srebra i histidina. Svojstvima srebrenih nanoklastera se bavi i dodatak, i to na način da su istraživana svojstva apsorpcijskih spektara nanoklastera zaštićenima ligandima tioglikolne kiseline. Teorijski modeli su testirani eksperimentima, što je rezultiralo protokolima za kontroliranu proizvodnju liganada metalnih nanoklastera s dobro definiranim brojem elektrona vezanih uz jezgru nanoklastera.

U četvrtom, petom i šestom poglavlju nudi se važan doprinos razumijevanju inače vrlo izraženih nelinearnih optičkih svojstava metalnih nanoklastera na primjerima ligiranih nanoklastera Ag<sub>15</sub> i Ag<sub>29</sub>. Proračuni napravljeni za nanoklastere Ag<sub>29</sub> ligiranih dihidrolipoinskom kiselinom pokazuju kvalitativno slaganje s eksperimentima načinjenim u području UV-VIS-NIR te ukazuju na važnost dvofotonske apsorpcije. S ciljem detaljnije analize parametara koji utječu na udarni presjek dvofotonske apsorpcije ligiranih srebrenih nanoklastera, izučavan je sustav Ag<sub>15</sub>SH<sub>11</sub>.



**SVEUČILIŠTE U SPLITU**  
**PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET**  
**Poslijediplomski sveučilišni studij BIOFIZIKA**



National PhD Programme with International Participation  
**Biophysics**  
www.pmfst.hr/biophysics

Proračuni, koji se slažu s eksperimentalnim rezultatima, ukazuju da je veliki udarni presjek dvofotonske apsorpcije posljedica rezonantnih efekata valne duljine jednofotonskog prijelaza stanja  $S_1$  i valnih duljina dvaju upadnih fotona. Ova su istraživanja potaknula daljnja teorijska istraživanja nanoklastera srebra ( $Ag_{11}$ ,  $Ag_{15}$  i  $Ag_{31}$ ), koja su pokazala da rezonantni efekti između jedno- i dvo-fotonskih apsorpcijskih učinaka dovode do generiranja velikog prijelaznog dipolnog momenta koji je svojstven sustavima s nejednolikom raspodjelom elektrona u nanoklasteru.

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 Željke Sanader 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 šest objavljenih i jednog znanstvenog članka poslanog na recenziju, su jasni i pregledni, a korištene metode detaljno su opisane u uvodnom (prvom) te sažeto, sukladno pravilima pisanja znanstvenih radova, u kasnijim poglavljima (od drugog do šestog). Posebno ističemo činjenicu da se teorijska modeliranja načinjena u sklopu ovoga rada potvrđena nizom eksperimenata. Važan rezultat ove disertacije je da se prikazani rezultati mogu primijeniti u unapređenju korištenja metalnih nanoklastera kao biosenzorske i tehnike bioslikavanja.

Na temelju navedenoga predlažemo da se predložena doktorska disertacija prihvati te da pristupnica Željka Sanader 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.



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


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

Klasa:643-02/16-13/0003  
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 Željke Sanader, pod naslovom „Optička svojstva nanoklastera plemenitih metala unutar hibridnih sustava i njihova primjena u biosenzorici“.

Dekanica  
  
prof. dr. sc. Jaska Puizina  
