



# OBAVIJEST

Javna obrana teme doktorskog rada studentice  
poslijediplomskog sveučilišnog studija BIOFIZIKA

## MARTINE PERIĆ BAKULIĆ

održat će se u ponedjeljak, **12. srpnja 2021., u 10.00 sati** na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu Sveučilišta u Splitu (dvorana B3-47), pred članovima Stručnog povjerenstva:

1. prof. dr. sc. Ante Bilušić, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu - predsjednik,
2. doc. dr. sc. Viljemka Bučević Popović, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu - članica,
3. prof. dr. sc. Katarina Vukojević, Medicinski fakultet Sveučilišta u Splitu - članica.

### Mentor i komentor:

1. **prof. dr. dr. h. c. Vlasta Bonačić Koutecky**, Centar izvrsnosti za znanost i tehnologiju – integracija Mediteranske regije (STIM) pri Interdisciplinarnom centru za naprednu tehnologiju i znanost i
2. **prof. dr. sc. Mile Dželalija**, Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu.

## **Naslov: Dizajn novih nanostrukturnih materijala za primjenu u biosenzorici; teorijsko istraživanje optičkih svojstava nano-bio hibrida plemenitih metala**

### **Sažetak:**

Glavni fokus ove doktorske disertacije je na linearnim i nelinearnim optičkim svojstvima različitih bio-nano hibrida plemenitih metala i ligandiranih nanoklastera. Oni pripadaju neskalirajućem režimu veličine u kojem se svaki atom broji ( $\sim 2\text{nm}$ ). Njihova optička svojstva ovisna su o njihovoj strukturi. Ovo će se istraživanje temeljiti na metodama računalne kemije kako bi se stekla saznanja o jedinstvenim svojstvima navedenih sistema. Kombinacija QM/MM metode s prethodno korištenom teorijom funkcionala gustoće (DFT) i njenom vremenski ovisnom inačicom (TD-DFT) omogućuje određivanje strukturnih i optičkih svojstava te povezivanje teorijskih rezultata sa sustavima mjerenima u eksperimentima. Stečena saznanja će se koristiti za dizajn novih nanostrukturiranih materijala u svrhu primjene u biosenzorici i medicinskoj dijagnostici. Standardne tehnike bio-oslikavanja u medicinskoj dijagnostici koriste komercijalno dostupne organske boje i kvantne točke. Bolja osjetljivost može se postići pomoću ligandiranih nanoklastera plemenitih metala i bio-nano hibrida uporabom dvo-fotonske spektroskopije. Njihova dvo-fotonska apsorpcijska svojstva su za nekoliko redova veličine bolja od onih komercijalno dostupnih boja, što omogućuje penetraciju duboko u tkiva. Istražit će se dodatne strategije za podešavanje optičkih svojstava takvih nanomaterijala. Očekuje se da će novi pravci teoretskog istraživanja voditi istraživanje prema biosenzorici superiorne osjetljivosti. Teoretski rezultati uspoređivat će se s eksperimentalnim rezultatima dobivenim od stručnjaka.

## **Title: Design of new nanostructured materials for application in biosensorics; theoretical study of optical properties of noble metal bio-nano hybrids**

### **Abstract:**

The main focus of this doctoral thesis is to address linear and nonlinear optical properties of different noble metal bio-nano hybrids and ligated nanoclusters. They belong to the non-scalable regime in which each atom counts ( $\sim 2\text{nm}$ ). Their optical properties are strongly dependent on their structure. This research will be based on an investigation by computational chemistry methods in order to gain insight into the origins of their unique structural and optical properties. Combination of QM/MM method with previously used Density Functional Theory (DFT) and its time dependent version (TD-DFT) allows the determination of structural and optical properties, bringing the theoretical investigation closer to the real systems measured by the experimentalist. The new insights will be used for the design of new nanostructured materials for application in biosensorics and medical diagnostics. Standard bioimaging techniques in medical diagnostics employ commercially available organic dyes and quantum dots. Better sensitivity can be reached with noble metal ligated nanoclusters and bio-nano hybrids by using the two-photon spectroscopy. Their two photon cross-sections are several order of magnitude larger than cross-sections of commercially available dyes which offers deep tissue penetration. Additional strategies for tuning the optical properties of such nanomaterials will be explored. New routes of theoretical exploration are expected to lead the research towards biosensorics of superior sensitivity. Theoretical results will be compared with experimental results obtained by collaborators that are experts in this field.