



SVEUČILIŠTE U SPLITU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
RUĐERA BOŠKOVIĆA 33, 21000 SPLIT

IBAN: HR6124070001100580549
SWIFT(BIC): OTPVHR2X
MATIČNI BROJ: 3199622
OIB: 20858497843

Poslijediplomski sveučilišni studij
BIOFIZIKA
<http://split.pmfst.unist.hr/biofizika>



KLASA: 643-02/21-13/0002
URBROJ: 2181-204-03-02-22-0009
Split, 13. srpnja 2022.

O B A V I J E S T

Javna obrana doktorskog rada studentice poslijediplomskog
sveučilišnog studija BIOFIZIKA

MARTINE PERIĆ BAKULIĆ, mag. phys.

pod naslovom

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

održat će se **u petak, 22. srpnja 2022., u 11:00 sati** na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Splitu (amfiteatar A-01), pred članovima Stručnog povjerenstva:

- 1. prof. dr. sc. Ante Bilušić** (Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu) – predsjednik,
- 2. prof. dr. sc. Katarina Vukojević** (Medicinski fakultet Sveučilišta u Splitu) – članica,
- 3. doc. dr. sc. Viljemka Bučević-Popović** (Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu) – članica.
- 4. izv. prof. dr. sc. Larisa Zoranić** (Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Splitu) – zamjenska članica.

Mentorica i komentor:

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

Pozivaju se svi zainteresirani da prisustvuju obrani doktorskog rada.



SVEUČILIŠTE U SPLITU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
RUĐERA BOŠKOVIĆA 33, 21000 SPLIT

IBAN: HR6124070001100580549
SWIFT(BIC): OTPVHR2X
MATIČNI BROJ: 3199622
OIB: 20858497843

Poslijediplomski sveučilišni studij
BIOFIZIKA
<http://split.pmfst.unist.hr/biofizika>



Naslov:

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

Sažetak:

Težište ovog doktorskog rada počiva na linearnim i nelinearnim optičkim svojstvima nanoklastera plemenitih metala koji pripadaju neskaliirajućim sustavima (~ 2 nm). Mogu biti ugrađeni u biološki okoliš kao bio-nano hibridi ili zaštićeni biomolekulama kao ligandirani nanoklasteri. U usporedbi sa standardnim tehnikama bio-oslikavanja u medicinskoj dijagnostici (organske boje i kvantne točke) bolja osjetljivost može se postići kombinacijom dvofotonske spektroskopije i bio-nano sustava plemenitih metala. Istraživanje predstavljeno u ovom doktorskog radu temelji se na metodama računalne kvantne kemije. Kombinacija QM/MM metode s teorijom funkcionala gustoće (DFT) i njezinom vremenski ovisnom inačicom (TD-DFT) omogućuje određivanje strukturnih i optičkih svojstava za bio-nano hibride (trimer srebra interkaliran u DNK i supramolekularni sklopovi zlata i cisteina dopirani s jednim atomom srebra) te ligandirane nanoklastere ($\text{Au}_{10}\text{SG}_{10}$, $\text{Au}_{12}\text{Zwitterions}_4$, i $\text{Au}_{15}\text{SG}_{13}$). Istraživanje u ovom doktorskog radu pokazalo je da njihova jedinstvena optička svojstva (intenzivna fluorescencija kod bio-nano hibrida te značajan kapacitet u bio-označavanju kod ligandiranih nanoklastera) imaju potencijal za primjenu u bio-oslikavanju i medicinskoj dijagnostici. Očekuje se da će novi pravci teorijskog istraživanja voditi istraživanja prema biosenzorici visoke osjetljivosti. Teorijski rezultati će se usporediti s eksperimentalnim rezultatima dobivenim od strane eksperimentalnih stručnjaka

Title:

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

Abstract:

The focus of this doctoral thesis is to address the linear and nonlinear optical properties of noble metal nanoclusters (NCs) belonging to the non-scalable regime (~ 2 nm). They can be embedded in the biological environment as bio-nano hybrids or protected with biomolecules as liganded NCs. Compared to standard bioimaging techniques (organic dyes and quantum dots) better sensitivity can be reached with the combination of two-photon spectroscopy and noble metal bio-nano systems. The research presented in this doctoral thesis is based on an investigation by computational chemistry methods. The combination of the QM/MM method with Density Functional Theory (DFT) and its time-dependent version (TD-DFT) allows the determination of structural and optical properties for bio-nano hybrids (silver trimer intercalated in DNA and silver doped gold-cysteine supramolecular assemblies) and liganded NCs ($\text{Au}_{10}\text{SG}_{10}$, $\text{Au}_{12}\text{Zwitterions}_4$, and $\text{Au}_{15}\text{SG}_{13}$ NCs). Research in this doctoral thesis demonstrated that their unique optical properties (huge fluorescence for investigated bio-nano hybrids and bio-labeling capacity of liganded NCs) have the potential for applications in bioimaging and medical diagnostics. 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 expert collaborators.