

Prilježeno: 13. 12. 2016.
Klasifikacijska oznaka: 643-02/16-12/0007
Uredba: 2111-2016-01-05-16-0010

SVEUČILIŠTE U SPLITU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
Poslijediplomski sveučilišni studij biofizike

PROTOKOL I ZAPISNIK OBRANE DOKTORSKOG RADA

Povjerenstvo ulazi u prostor za obranu, doktorand stoji ispred Povjerenstva. Članovi Povjerenstva i ostali nazočni sjednu, a potom Predsjednik čita:

*Poštovani pristupniče, članovi Povjerenstva, drage kolege i ostali nazočni,
ustanovljujem da će danas 19. 12. 2016. doktorand*

MARJAN KRSTIĆ

na Sveučilištu u Splitu Prirodoslovno-matematičkom fakultetu, s početkom u 10:15 sati braniti svoj doktorski rad s naslovom:

Naslov doktorskog rada:	Hrvatski:	Uloga metalnih nanoklastera u katalizi za pročišćavanje pogonskog plina gorivnih ćelija i spremanje vodika
	Engleski:	Role of metallic nanoclusters in catalysis for fuel cell feed gas purification and hydrogen storage
	Jezik pisanja rada:	Engleski jezik

izrađen pod mentorstvom:

	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

Doktorski rad doktorand će braniti pred Povjerenstvom za obranu doktorskog rada u sastavu:
(ukoliko je obrani prisustvovao zamjenski član, uz podatke zamjenskog člana navedite i podatke člana kojeg zamjenjuje)

Izabrano povjerenstvo za obranu doktorskog rada	Titula, ime i prezime:	Ustanova, država:
	Predsjednik Povjerenstva: prof. dr. sc. Ante Bilušić	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
	2. prof. dr. sc. Franjo Sokolić, član	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
	3. dr. sc. Anita Kriško, član (dr. sc. Mile Ivanda, zamjenski član)	Institut Ruđer Bošković, Zagreb, Hrvatska
	4.	
	5.	

koje je Fakultetsko vijeće Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Splitu imenovalo dana:

28. rujna 2016. g. na 110 sjednici
(upisati broj i datum održavanja sjednice Fakultetskog vijeća)

Doktorski rad prihvatilo je Fakultetsko vijeće Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Splitu dana:

30. studenog 2016. g. na 112 sjednici
(upisati broj i datum održavanja sjednice Fakultetskog vijeća)

a na prijedlog izabranog povjerenstva za ocjenu doktorskog rada u sastavu:

	Titula, ime i prezime:	Ustanova, država:
Sastav povjerenstva za ocjenu doktorskog rada	Predsjednik Povjerenstva: prof. dr. sc. Ante Bilušić	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
	2. prof. dr. sc. Franjo Sokolić, član	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
	3. dr. sc. Anita Kriško, član	Mediteranski institut za istraživanje života, Split, Hrvatska
	4.	
	5.	

Prije obrane iznijet ću životopis predloženika/ce, popis radova i ocjenu rada.

Predsjednik čita životopis doktoranda/doktorandice i popis radova:

MARJAN KRSTIĆ, mag. phys.

Radno iskustvo:

2012 – Vanjski suradnik (asistent), Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Splitu

2011 – mladi istraživač na Interdisciplinarnom centru za naprednu znanost i tehnologiju (ICAST), Sveučilište u Splitu

Obrazovanje:

2011 – doktorski studij, Biofizika, Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Splitu

2008 – 2010 diplomski studij, Inženjerska fizika – mehanički sustavi, Sveučilište u Splitu, Prirodoslovno-matematički fakultet

2005 – 2008 preddiplomski studij, Inženjerska fizika, Sveučilište u Splitu, Prirodoslovno-matematički fakultet

2001 – 2005 Nadbiskupijska klasična gimnazija "Don Frane Bulić", Split

Konferencije, radionice, nagrade:

Sudjelovao je u radu dviju konferencija i dviju radionica te je svoja istraživanja prezentirao u sklopu projekta „Noć istraživača“ 2014. godine.

2007 osvojio je treće mjesto na "Business plan competition 2007" u organizaciji Tempus CREATE Project (CBRC Project and UTT), Hrvatska

Do sada je kao glavni autor i koautor objavio 11 znanstvenih publikacija, redom u časopisima s visokim čimbenikom utjecaja, uključujući i jedan u časopisu Nature Communications.

Predsjednik čita obrazloženje ocjene doktorskog rada:

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 osam znanstvenih radova organiziranih u potpoglavlja odnosno dodatke.

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.

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).

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.

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.

Nakon što je pročitao Izvještaj, Predsjednik daje riječ doktorandu riječima:

*Pozivam doktoranda da pristupi obrani doktorskog rada.
Upozoravam ga da se njegovo izlaganje neće prekidati, a može trajati najviše 45 minuta.*

Nakon izlaganja predsjednik pita doktoranda želi li odgovarati na pitanja odmah ili nakon kraće stanke (10 do 15 minuta).

Odmah ili nakon stanke, predsjednik moli članove Povjerenstva da postave pitanja iz područja istraživanja.

Na kraju predsjednik postavlja pitanja doktorandu (pitanja se prilažu Zapisniku).

Članovi povjerenstva pismeno priopćuju pitanja na koje treba odgovoriti.

Predsjednik je pozvao i ostale nazočne da postave pitanja uz prethodno predstavljanje (pitanja se prilažu Zapisniku).

Nakon što je doktorand odgovorio na postavljena pitanja Predsjednik povjerenstva priopćuje da je postupak obrane završen i moli povjerenstvo da se povuče na vijećanje:

*Ukoliko nema više pitanja, proglašavam obranu doktorskog rada završenom i predlažem da se
Povjerenstvo povuče na vijećanje.*



Nakon vijećanja, članovi Povjerenstva ulaze pri čemu nazočni ustaju i stoje tijekom čitanja odluke.
Predsjednik čita odluku Povjerenstva:

Ovo povjerenstvo nakon javno obranjenog doktorskog rada donijelo je jednoglasno (većinom glasova) (podvući)

ODLUKU

da je

MARJAN KRSTIĆ

obranio svoj doktorski rad.

Povjerenstvo će zamoliti rektora Sveučilišta u Splitu da

MARJANA KRSTIĆA

promovira u najviše akademsko zvanje

DOKTOR/DOKTORICA ZNANOSTI

iz znanstvenoga područja prirodnih znanosti,

znanstvenoga polja fizika

Obrana je završena u 11:25 sati.

U Splitu, 19. prosinca 2016.

Članovi Povjerenstva:

(ime, prezime, potpis članova Povjerenstva za obranu doktorskog rada)

2. **prof. dr. sc. Franjo Sokolić**

3. **dr. sc. Mile Ivanda**

Predsjednik Povjerenstva:

prof. dr. sc. Ante Bilušić

(ime, prezime, potpis Predsjednika Povjerenstva za obranu doktorskog rada)

Prilog:

Pitanja Povjerenstva za obranu doktorskog rada	
2. član: dr. sc. Mile Ivanda	<ul style="list-style-type: none">• Kako se sintetiziraju nanoklasteri i kakva im je stabilnost obzirom na veličinu i na oksidaciju?• Kakve informacije se mogu dobiti IR spektroskopijom, Ramanovom spektroskopijom, UV-VIS apsorpcijskom spektroskopijom na $\text{Ru}_6 + \text{CO} + 4\text{H}_2\text{O}$ sustavima?• Rutenij kao katalizator za eliminaciju CO_2 i CO iz atmosfere – je li se može primijeniti na veliku skalu?
3. član: prof. dr. sc. Franjo Sokolić	<ul style="list-style-type: none">• Zašto je Ru specijalno povoljan za uklanjanje CO?• Kako se može objasniti aktivnost klastera u pretvorbi CO u CO_2 u ovisnosti o dimenziji klastera?• Kako se objašnjava ovisnost energije ionizacije klastera zlata o njihovoj veličini?
Predsjednik Povjerenstva: prof. dr. sc. Ante Bilušić	<ul style="list-style-type: none">• Eksperimenti se u pravilu dobro poklapaju s teorijskim predviđanjima. Ipak, u nekim slučajevima (npr., slika 4 u potpoglavlju IV.2) postoji neslaganje. Možete li objasniti koje procese DFT ne uzima u obzir?• Otkuda energija za prevazilaženje lokalnih energetske barijere pri npr. Metanaciji Ru_6^+ i Ag_2?• Kako povišena temperatura koja se oslobađa pri reakciji utječe na učinkovitost membrane?

Pitanja nazočnih	
prof. dr. sc. Paško Županović (ime i prezime)	<ul style="list-style-type: none">• Koja je teorijska podloga za učinkovitost gorivnih članaka od 70%?
prof. dr. dr. h. c. Vlasta Bonačić-Koutecký (ime i prezime)	<ul style="list-style-type: none">• Zašto je baš zeolit pogodan materijal za korištenje kao podloga za Ru-nanoklastera?

1. Kako se sintetiziraju monoklorirani i kakva im je stabilnost obzrom na veličinu i na oksidaciju.
2. Kakve informacije se mogu dobiti IR spektroskopijom, Ramanovom spektroskopijom, UV-Vis apsorpcijskom spektroskopijom na $\text{Ru}_6 + \text{CO} + 4\text{H}_2$ kloridima.
3. Katalizirao li katalizator za eliminaciju CO_2 i CO iz atmosfere - je li se može primjeniti na veliku skalu.

1% CO - prijedlozi

- metalni katalizatori su u stvari metalokompleksi klorida
- najveća dilema je li ekonomična obzrom na proizvodnju
- unajest, zeolita porozni silicij? ili porozni alumina

Thorsten Bernhardt, Sveni. u Ulmu.

1. Zašto je Ru posebno povoljan za uklanjanje CO?
2. Kako se može objasniti aktivnost klastera u petroli: CO i CO₂ u ovisnosti o dimenziji klastera?
3. Kako se objašnjava ovisnost energije ionizacije klastera zlata o njihovoj veličini?

Pitanja: Bilusie'

- 1) Eksperimenti se u pravilu dobro poklapaju s teorijskim predviđanjima. Ipak, u nekim slučajevima (npr. slika 4 u potpunoj ~~11.2~~ ^{11.2} ~~11.2~~) postoji neslaganje. Možete li objasniti koje procese DFI me utiču u obzir?
- 2) Otkuda energija za prevrtanje lokalnih encijet slab, borijera pri npr. metalaciji Zn^{2+} i Ag_2^+ ?
(koja se oslobađa pri reakciji)
- 3) Kako ~~utječe~~ povišena temperatura, ^{utječe} na učinkovitost membrane?

Pitanja iz publike:

Pošto: - Teorijska podloga za istovjetnost FC od 70%?

Vlasto: - Zašto je Co realit pogodan materijal za katalizaciju kao "kost" za Ru monoklastere?