

Изборном већу Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду

На I редовној седници Изборног већа Факултета за физичку хемију одржаној 11.10.2017. године одређени смо за чланове Комисије за припрему извештаја о пријављеним кандидатима на Конкурс за избор у звање и заснивање радног односа једног ванредовног професора за ужу научну област **Физичка хемија – квантна хемија**, а за предмете **Статистичка термодинамика** на основним академским студијама Факултета за физичку хемију и **Молекулске симулације у физичкој хемији** на мастер академским студијама Факултета за физичку хемију.

На конкурс објављен у листу “Послови” 18.10.2017. године пријавио се један кандидат, **др Михајло Етински**. На основу приложене и прикупљене документације подносимо следећи

ИЗВЕШТАЈ

А. Биографски подаци

- | | |
|------------------------------|---|
| - Име, средње име и презиме: | Михајло (Родољуб) Етински |
| - Датум и место рођења: | 4.10.1981. Нови Сад |
| - Установа где је запослен: | Факултет за физичку хемију,
Универзитет у Београду |
| - Звање/радно место: | Доцент |
| <u>Основне студије:</u> | Дипломирани физикохемичар |
| - Назив установе: | Факултет за физичку хемију,
Универзитет у Београду |
| - Место и година завршетка: | Београд, 2004. |
| - Просечна оцена: | 9,57 |

Досадашњи избори у наставна и научна звања:

- Наставно звање: **Доцент, 2013.**

Запослења:

- **Асистент приправник на Факултету за физичку хемију од јануара 2005 до новембра 2006.**
- **Асистент на Факултету за физичку хемију од јула 2010.**
- **Од новембра 2006 до јула 2010. године - мировање радног стажа због боравка у Немачкој (израда докторске дисертације).**
- **Доцент на Факултету за физичку хемију од фебруара 2013.**

Боравци у иностранству ради стручног усавршавања:

- пре доктората: 4 месеца - Институт за органску хемију Универзитета у Минстеру, Немачка (2 месеца) и Институт за теоријску хемију Универзитета у Бечу, Аустрија (2 месеца).
- докторат: 3 године и 7 месеци - Институт за теоријску и рачунску хемију, Универзитет Ханрих Хајне, Диселдорф, Немачка.
- **после доктората: 10 месеци** - Институт за теоријску и рачунску хемију, Универзитет Ханрих Хајне, Диселдорф, Немачка (6 месеци) и В'ант Хофов институт, Универзитет у Амстердаму, Холандија (4 месеца).

Завршене научне школе и курсеви:

- 1. The 10th Sostrup Summer School on QUANTUM CHEMISTRY and MOLECULAR PROPERTIES**, Himmelbjergens Natur-og Idrætsefterskole, Danska 29. **јун – 11. јул, 2008.**
2. Workshop “Presenting science – Comprehensive, competent and convincing” Interdisciplinary Graduate and Research Academy Duesseldorf, 16 окт - 17. окт 2009.
- 3. Dynamics in excited states, Workshop on Theoretical Chemistry u Mariapfarr, Austrija 16 феб - 19 феб 2010.**
4. MolSim 2015 Understanding Molecular Simulation, Amsterdam Center for Multiscale Modeling, Универзитет у Амстердаму, Низоземска, 5 јан -16 јан, 2015.

Награде:

Студент генерације Факултета за физичку хемију 2004.

Б. Дисертације

Магистратура:

- Назив установе:

- Место и година завршетка:

- Наслов рада:

Магистар физичкохемијских наука

Факултет за физичку хемију,

Универзитет у Београду

Београд, 2006.

"Оптичка контрола резонантног отицања популације у системима са Н нивоа"

Докторат:

- Назив установе:

- Место и година одбране:

- Наслов дисертације:

Доктор физичкохемијских наука

Природно-математички факултет,

Универзитет Хајнрих Хајне

Диселдорф, Немачка, 2010,

нострификован 2011.

"Comparison between time-dependent and time-independent methods for the calculation of inter-system crossing rates: Application to uracil and its derivatives"

В. Наставна делатност

Кандидат је држао вежбе на Факултету за физичку хемију из следећих курсева: Електрохемија, Физичка хемија 1 и 2 (за студенте Хемијског факултета, смера за заштиту животне околине), Увод у структуру материје, Практикум из математике, Физичка хемија флуида, Квантна хемија, Атомистика, Физичко-хемијски процеси у животној средини за студенте Географског факултета, Статистичка термодинамика.

Од избора у звање доцента Михајло Етински држи курсеве Статистичке термодинамике на основним студијама и Неравнотежне статистичке термодинамике и Теоријске спектроскопије (са још четворо наставника) на докторским студијама. Садржај курса Статистичке термодинамике је допуњен наставним јединицама из реалних система, редукованим функцијама расподеле и рачунарским симулацијама. Такође, кандидат је наставу на том курсу осавременио увођењем рачунарских вежби. Просечна оцена на студентским анкетама за педагошки рад на курсу Статистичке термодинамике од избора у звање доцента је била 4,17.

Током школске 2013/2014. године, Михајло Етински је држао наставу на курсу Физичко-хемијских процеса у животној средини за студенте Географског факултета. У школској 2017/2018. години кандидат је координатор курса Методе и методологије физичкохемијских истраживања на мастер студијама. На том курсу одржао је једно предавање у школским годинама 2016/2017. и 2017/2018. Такође, Михајло Етински је поставио курс Молекулске симулације у физичкој хемији на мастер студијама.

Михајло Етински је као докторанд држао вежбе из Теорије група и Рачунарске хемије на Универзитету Хајнрих Хајне у Диселдорфу. У периоду 4 јан - 15 јан. 2016. је био демонстратор на курсу МолСим 2016 на Универзитету у Амстердаму.

Кандидат је био ментор студентима у изради 4 мастер рада и 7 дипломских радова. Тренутно је ментор једног студента докторских студија. Био је члан комисије за одбрану 5 мастер радова и 7 дипломских радова.

Г. Уџбеници, збирке задатака, практикуми

М. Етински, “Статистичка термодинамика – Збирка задатака”, Универзитет у Београду - Факултет за физичку хемију, Београд, 2017. ИСБН 978-86-82139-66-9.

Д. Научно-истраживачка делатност

Научно-истраживачка делатност кандидата се састоји од примене постојећих и развијања нових метода за теоријско проучавање структуре, динамике и спектра молекула. Коришћене методе се заснивају на *ab initio* приступу, тј. на решавању хемијских проблема без емпиријских апроксимација. Методе које је кандидат развио се односе на проблеме везане за рачунање константи брзина електронских релаксационих процеса у молекулима као и на симулације вибронеке структуре електронских спектра.

Према подацима *Web of Science* базе података, радови кандидата су цитирани 395 пута без аутоцитата и h-индекс једнак је 12 (подаци преузети дана 19. 10. 2017.).

(M 13) Поглавље у тематском зборнику међународног значаја

1. C. M. Marian, J. Föllner, M. Kleinschmidt, M. Etinski, “Intersystem Crossing Processes in TADF Emitters”, in: H. Yersin (Ed.), *Highly Efficient OLEDs, Materials Based on Thermally Activated Delayed Fluorescence*. Wiley VCH (2018) 38 страна; ISBN: 978-3-527-33900-6
<http://eu.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-3527339000.html>

(M 21a) Рад у међународном часопису изузетне вредности

Пре последњег избора

1. M. Etinski, C. Uiberacker, W. Jakubetz, “Counterdiabatic Suppression of Background State Population in Resonance Leaking by Controlling Intermediate Branching“, *J. Chem. Phys.*, 124 (2006) 124110- 124110-7
Импакт фактор за 2006 (IF): 3.166
<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.2180250?journalCode=jcp>

2. M. Busker, M. Nispel, T. Häber, K. Kleinermanns, M. Etinski, T. Fleig, “Electronic and vibrational spectroscopy of 1-methylthymine and its water clusters: the dark state survives hydration“, *Chem. Phys. Chem.*, 9 (2008) 1570-1577
Импакт фактор за 2008 (IF): 3.636
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/cphc.200800111/abstract>

3. M. Seidl, M. Etinski, C. Uiberacker, W. Jakubetz, “Pulse-train control of branching processes: Elimination of background and intruder state population“, *J. Chem. Phys.* 129 (2008) 234305
Импакт фактор за 2006 (IF): 3.166
<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.3041380>

4. M. Etinski, C. M. Marian, “*Ab initio* investigation of the methylation and hydration effects on the electronic spectra of uracil and thymine“, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 12 (2010) 4915-4923
Импакт фактор за 2009 (IF): 4.116
<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2010/cp/b925677f#!divAbstract>

5. M. Etinski, C. M. Marian, “Overruling the energy gap law: Fast triplet formation in 6-azauracil“, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 12 (2010) 15665-15671
Импакт фактор за 2009 (IF): 4.116
<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2010/cp/c0cp00106f/unauth#!divAbstract>

(M 21) Рад у врхунском међународном часопису

1. V. Rai-Constapel, M. Etinski, C. M. Marian, “Photophysics of Xanthone: A Quantum Chemical Perusal”,

J. Phys. Chem. A, 117 (2013) 3935–3944

Импакт фактор за 2012 (IF): 2.771

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp401755j>

2. C. Sousa, C. de Graaf, A. Rudavskiy, R. Broer, J. Tatchen, M. Etinski, C. M. Marian, “Ultrafast deactivation mechanism of the excited singlet in the light-induced spin crossover of $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$ ”,

Chem. Eur. J., 19 (2013) 17541–17551

Импакт фактор за 2013 (IF): 5.696

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.201302992/abstract>

3. M. Etinski, J. Tatchen, C. M. Marian, “Thermal and Solvent Effects on the Triplet Formation in Cinnoline”,

Phys. Chem. Chem. Phys., 16, (2014) 4740-4751

Импакт фактор за 2014 (IF): 4.493

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/cp/c3cp53247j#!divAbstract>

4. M. Etinski, V. Rai-Constapel, C. M. Marian, “Time-dependent approach to spin-vibronic coupling: Implementation and assessment”,

J. Chem Phys., 140, (2014) 114104

Импакт фактор за 2014 (IF): 2.952

<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.4868484?journalCode=jcp>

5. C. M. Marian, M. Etinski, V. Rai-Constapel, “Reverse Intersystem Crossing in Rhodamines by Near-Infrared Laser Excitation”,

J. Phys. Chem. A, 118 (2014) 6985–6990

Импакт фактор за 2014 (IF): 2.693

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp506904v>

6. M. Petković, M. Etinski, “Intramolecular OHO bonding in dibenzoylmethane: symmetry and spectral manifestations”,

RSC Adv., 4 (2014) 38517-38526

Импакт фактор за 2014 (IF): 3.840

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/ra/c4ra05586a#!divAbstract>

7. M. Etinski, M. Petković, M. M. Ristić, C. M. Marian, “Electron–Vibrational Coupling and Fluorescence Spectra of Tetra-, Penta-, and Hexacoordinated Chlorophylls c_1 and c_2 ”,

J. Phys. Chem. B, 119 (2015) 10156-10169

Импакт фактор за 2013 (IF): 3.377

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.5b05079?journalCode=jpcbfk>

8. S. Lobsiger, M. Etinski, S. Blaser, H.-M. Frey, C. Marian, S. Leutwyler, “Intersystem crossing rates of S1 state keto-amino cytosine at low excess energy”,

J. Chem. Phys., 143 (2015) 234301

Импакт фактор за 2015 (IF): 2.894

<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.4937375?journalCode=jcp>

9. M. Petković, M. M. Ristić, M. Etinski, “Stability and Anharmonic N–H Stretching Frequencies of 1-Methylthymine Dimers: Hydrogen Bonding versus π -Stacking”,

J. Phys. Chem. A, 120 (2016) 1536–1544

Импакт фактор за 2014 (IF): 2.693

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpca.5b09946>

10. M. Kojić, M. Petković, M. Etinski, “A new insight into photochemistry of avobenzene in gas phase and acetonitrile from ab initio calculations”,

Phys. Chem. Chem. Phys., 18 (2016) 22168–22178

Импакт фактор за 2016 (IF): 4.123

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2016/cp/c6cp03533g#!divAbstract>

11. Dj. Nakarada, M. Etinski, M. Petković, “Using Density Functional Theory to Study Neutral and Ionized Stacked Thymine Dimers”,

J. Phys. Chem. A, 120 (2016) 7704–7713

Импакт фактор за 2014 (IF): 2.693

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpca.6b06493>

12. M. Etinski, C. Marian, “A theoretical study of low-lying singlet and triplet excited states of quinazoline, quinoxaline and phthalazine: Insight into triplet formation”,

Phys. Chem. Chem. Phys., 19 (2017) 13828–13837

Импакт фактор за 2016 (IF): 4.123

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/cp/c7cp02022h#!divAbstract>

Пре последњег избора

13. M. Parac, M. Etinski, M. Perić, S. Grimme, “A Theoretical Investigation of the Geometries and Binding Energies of Molecular Tweezer and Clip Host-Guest Systems“,

J. Chem. Theory Comput., 1 (2005) 1110 -1118

Импакт фактор за 2006 (IF): 3.627 – 2005 није имао IF

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct050122n?journalCode=jctcce>

14. M. Etinski, T. Fleig, C. M. Marian, “Intersystem crossing and characterization of dark states in the pyrimidine nucleobases uracil, thymine, and 1-methylthymine“,

J. Phys. Chem. A, 113 (2009) 11809-11816

Импакт фактор за 2009 (IF): 2.899

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp902944a>

15. M. Etinski, J. Tatchen, C. M. Marian, "Time-dependent approaches for the calculation of intersystem crossing rates",
J. Chem. Phys. 134 (2011) 154105- 154105-9
Импакт фактор за 2011 (IF): 3.333
<http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.3575582?journalCode=jcp>

(M22) Рад у истакнутом међународном часопису

1. M. Etinski, M. Petković, M. M. Ristić, "A quantum-chemical study of the chlorophyll phosphorescence spectrum: electron-vibrational coupling and coordination effects",
Chem. Phys. Lett., 647 (2016) 139–144
Импакт фактор за 2016 (IF): 1.815
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000926141600066X>

Пре последњег избора

2. K. Schaper, M. Etinski, T. Fleig, "Theoretical Investigation of the Excited States of 2-Nitrobenzyl and 4,5-Methylenedioxy-2-nitrobenzyl Caging Groups",
Photochemistry and Photobiology, 85 (2009) 1075-1081
Импакт фактор за 2008 (IF): 2.287
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/j.1751-1097.2009.00560.x/abstract>

3. L. Pohler, M. Kleinschmidt, M. Etinski, C. M. Marian, "In Search of the Dark State of 5-Methyl-2-Hydroxypyrimidine Using a Numerical DFT/MRCI Gradient",
Mol. Phys., 110 (2012) 2429–2438
Импакт фактор за 2012 (IF): 1.670
<http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2012.695030>

(M 23) Рад у међународном часопису

1. M. M. Petković, M. R. Etinski, M. M. Ristić, "Proučavanje structure i vibracionih svojstava ciklobutan pirimidin dimera",
Hem. Ind. 67 (2013) 203–207
Импакт фактор за 2013 (IF): 0.562
<http://scindeks-clanci.ceon.rs/data/pdf/0367-598X/2013/0367-598X1302203P.pdf>

2. M. Etinski, "Effect of temperature on rate of the spin-forbidden transition in uracil and thymine",
J. Serb. Chem. Soc. 78 (2013) 65–73
Импакт фактор за 2013 (IF): 0.889
<http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.961.5269&rep=rep1&type=pdf>

3. M. Etinski, M. Petković, M. M. Ristić, “A study of the low-lying singlet and triplet electronic states of chlorophyll a and b”,

J. Serb. Chem. Soc. 78 (2013) 1775–1787

Импакт фактор за 2013 (IF): 0.889

http://www.shd.org.rs/JSCS/Vol78/No11/11_5788_4532.pdf

4. M. Kojić, M. Petković, M. Etinski, “Unrevealing mechanism of avobenzone’s thermal tautomerization by means of quantum chemical computations”,

J. Serb. Chem. Soc., 81 (2016) 1393–1406

Импакт фактор за 2016 (IF): 0.822

<http://www.shd-pub.org.rs/index.php/JSCS/article/view/3072>

5. M. Etinski, M. Ristić, M. Petković, “Quantum chemical study on phenethylamines reveals new cation structures”,

Comp. Theor. Chem., 1114 (2017) 47–54

Импакт фактор за 2016 (IF): 1.549

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X17302621>

Пре последњег избора

6. M. Etinski, “Role of Duschinsky rotation in intersystem crossing: a case study of uracil“,

J. Serb. Chem. Soc. 76 (2011) 1649–1660

Импакт фактор за 2011 (IF): 0.879

http://www.shd.org.rs/JSCS/Vol76/No12/06_5166_4237.pdf

7. M. Etinski, “Investigation of the spin-forbidden process in thymine“,

Hem. Ind., 66 (2012) 165–170

Импакт фактор за 2012 (IF): 0.463

http://www.ache.org.rs/HI/2012/No2/02_3381_2012.pdf

8. M. M. Ristić, M. Petković, M. Etinski, “Quantum-chemical investigation of the 1-methylthymine dimer photoproduct: pyrimidine-(6-4)-pyrimidone adduct”,

J. Serb. Chem. Soc., 77 (2012) 1037–1045

Импакт фактор за 2012 (IF): 0.912

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2017/cp/c7cp05320g#!divAbstract>

(M33) Саопштења са међународних скупова штампана у целини

1. M. Petković, M. M. Ristić and M. Etinski, “Theoretical analysis of the thymine-cytosin cyclopurymidine dimer”, *Physical Chemistry 2012*, Beograd, Srbija, *Proceedings, Vol. I* (2012) 109-111

(M 34) Саопштење са међународног скупа штампано у изводу

1. A. Rudavskiy, R. Broer, M. Etinski, C. de Graaf, R. N. A. Havenith, C. M. Marian, C. Sousa, J. Tatchen, "Analysis of the spin crossover mechanism in Fe(II) complexes", 247th National Spring Meeting of the American-Chemical-Society (ACS), Dallas, Texas, USA, 16-20. 3. 2014
2. M. Petković, M. Etinski, "Dibenzoylmethane – geometry optimization to determine the stable structure", 50th Symposium for Theoretical Chemistry, Vienna, Austria, 14-18. 9. 2014. (Book of abstracts, br. str. P49)
3. M. Etinski, C. M. Marian, "A time-dependent method for computation of rates and spectra of large molecules:", 50th Symposium for Theoretical Chemistry, Vienna, Austria, 14-18. 9. 2014. (Book of abstracts, br. str. P50)
4. M. Etinski, R. C. Puthenkalathil, B. Ensing, "Thermodynamic aspects of the electrocatalysis of proton reduction by diiron benzenedithiolate carbonyl complex", WATOC 2017 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemistry, Munich, Germany, 27.8-1.9 2017. (Book of abstracts, br. str. P03-7)

Пре последњег избора

5. M. Etinski, T. Fleig, "Quantum Chemical Investigation of the Vertical and Adiabatic Excitation Spectra of 1-Methylthymine and 1-Methylthymine-Water Complexes"; International Symposium "Molecular Response to electronic excitation", SFB 663, 16-18. 4. 2007. Bad Muenstereifel (Book of abstracts, br. str. P35)
6. M. Etinski, Timo Fleig, "A Theoretical Investigation on the Influence of the Microhydration on the Vertical and Adiabatic Spectrum of 1-Methylthymine"; 43rd Symposium for Theoretical Chemistry, Saarbruecken, Germany, 16-20. 9. 2007. (Conference book, br. str. P36)
7. M. Etinski, C. M. Marian, T. Fleig, "On the formation of triplet states in uracil and 6-azauracil"; 45th Symposium for Theoretical Chemistry, Neuss am Rhein, Germany, 8-12. 9. 2009. (Book of abstracts, br. str. P28)
8. A. Funk, M. Etinski, T. Fleig, M. Gerhards, "Theoretical investigation of the proton transfer coordinates of 3-hydroxyflavone in the electronic ground and excited states"; 45th Symposium for Theoretical Chemistry, Neuss am Rhein, Germany, 8-12. 9. 2009. (Book of abstracts, br. str. P37)
9. M. Etinski, C. M. Marian, "Theoretical investigation of the dark electronic state in uracil, thymine and its derivatives"; CECP 2010 Central European Conference on Photochemistry, Bad Hofgastein, Austria, February 7 to 11, 2010, (Book of abstracts, br. str. 121)
10. A. Funk, M. Etinski, T. Fleig, M. Gerhards, "Potential-energy surfaces and coupled vibrations of the proton transfer coordinates of 3-hydroxyflavone in the electronic ground and excited states"; 46th Symposium for Theoretical Chemistry, Muenster, Germany, 26-30. 9. 2010. (Book of abstracts, br. str. P54)

(M62) Предавања по позиву са националних скупова штампана у изводу:

1. M. Etinski, “Time-dependent approach to the calculation of the intersystem crossing rates by vibronic spin-orbit coupling”, 3rd National Conference on Electronic, Atomic Molecular and Photonic Physics Belgrade, Serbia, August 25th, 2013 (Book of abstracts br. str. 10)

Предавање по позиву на иностраним универзитетима:

1. M. Etinski, “Spectroscopy meets theory: from vibronic to vibrational transitions”, John van Geuns lectures, Van 't Hoff Institute for Molecular Sciences, University of Amsterdam 18.9.2015.

2. M. Etinski, “AIMD vibrational spectra of hydrogen bonded and stacked systems”, Van 't Hoff Institute for Molecular Sciences, University of Amsterdam 30.6.2017.

Кратак опис радова категорије M21a-M23

У раду M21a-1 је представљен принцип за контролу трансфера популације проузрокованог мултифотонским ексцитацијама. Појава популације у нежељеним стањима феноменолошки је објашњена утицајем дијабатских пертурбација. Такви нежељени трансфери популације сузбијени су употребом додатног електромагнетног поља. За моделни систем са пет нивоа, показано је да се појава популације у нежељеном стању може потпуно сузбити коришћењем претходно оптимизованог поља.

У раду M21a-2 проучавана је електронска релаксација 1-метилтимиона и 1-метилурацила под ниским притиском. Посебно је разматран утицај микрохидратације на времена електронске релаксације. У сагласности са претходним истраживањима показано је да се пиримидинске базе релаксирају у дугоживеће тамно електронско стање. Утврђено је да време живота тог електронског стања не зависи значајно од микрохидратације. Такође, дато је теоријско објашњење електронске релаксације пиримидинских база.

У раду M21a-3 проучавана је могућност употребе низа пулсева за контролу преноса популација енергетских нивоа у молекулу. Као средство контроле преноса популација коришћена је фазна разлика или временско кашњење између пулсева. Ефикасност различитих метода је тестирана нумерички.

У раду M21a-4 проучаван је утицај метилације и хидратације на електронске спектре урацила и тимиона. Померај енергетских нивоа зависи од полагаја метил групе и карактера прелаза. Померај $n\pi^*$ стања не зависи од метилације али хидратација значајно повећава њихову енергију. Померај $\pi\pi^*$ стања зависи од полагаја метил групе док хидратација у мањој мери утиче на енергију тих стања.

У раду M21a-5 је проучаван механизам настанка најнижег триплетног стања 6-азаурацила. Користећи квантно-хемијске методе добијене су енергије синглетних и триплетних електронских стања. Нађени су пресеци електронских површина који доводе до ултрабрзог преноса популације са S_2 стања на S_1 . Утврђено је да S_1 стање делује као

прелазно стање за стварање најнижег триплетног стања. На основу прорачуна, установљено је да се триплетно стање ствара за око 125 ps у изолованом мелекулу и за око 30 ps за молекул у ацетонитрилу.

У раду M21-1 разматрана су побуђена електронска стања ксантона и њихови релаксациони механизми у вакууму, ацетонитрилу, метанолу и води. Утврђено је да фотофизика овог једињења зависи од поларности и протичности растварача. Нађено је да се флуоросценција не јавља у вакууму и поларним апротичним растварачима, а високи принос флуоросценције у води је објашњен помоћу модела одложене флуоресценције.

У раду M21-2 је теоријски проучаван механизам спинског прелаза у комплексном једињењу гвожђа тако што су одређена електронска стања која учествују у том процесу и константе брзине процеса. Спински прелаз је обухватао пренос популације са ниског на високо спинско стање. Неколико различитих нових механизма прелаза је предложено у раду. Добијени резултати су се добро слагали са доступним експерименталним резултатима.

У раду M21-3 су разматрана побуђена електронска стања 1,2-дизанафталена и њихова релаксација. Такође је представљена имплементација алгорита за рачунање константи брзина електронских релаксационих процеса у случају када је почетно електронско стање у топлотној равнотежи са резервоаром. Утврђено је да механизам настајања триплетног стања у изучаваном једињењу зависи од температуре. На ниским температурама процес је орбитално забрањен, док се на вишим температурама отвара додатни релаксациони канал што значајно повећава брзину интерсистемског прелаза.

У раду M21-4 је приказан нови метод за рачунање електронских релаксационих константи и вибронских спектра у случају када Кондонова апросимација не важи. Метод се заснива на Херцберг-Телеровом развоју матричних елемената који учествују у електронском прелазу. Показано је да константа брзине у том случају има доприносе од три члана. Сваки члан је детаљно описан. Метод је тестиран на већ познатим случајевима и нађено је одлично слагање са претходним резултатима.

У раду M21-5 су проучавани механизми електронске релаксације који могу довести до повећања флуоресценције у родамину. Посебна пажња је посвећена дугоживећем триплетном стању. Показано је да је брзина интерсистемског прелаза са другог триплетног стања на прво синглетно стање довољно велика да би прелаз био остварљив.

У раду M21-6 проучавана је структура и вибрациони спектри дибензоилметана, молекула који има интрамолекулску водоничну везу. Показано је да постоје два конформера у гасној фази, један са асиметричном и други са симетричном структуром водоничне везе. Водонична веза је додатно проучавана теоријом атома у молекулима и дискутоване су разлике у структури водоничних веза конформера.

У раду M21-7 разматрани су флуоресцентни спектри хлорофила c1 и c2. Спектри су симулирани користећи мултимодну хармонијску апроксимацију. Најзначајнији прелази у спектрима су асигнирани. Добијени спектри су поређени са доступним експерименталним спектрима. Такође, утицај лигана на спектре је дискутован.

У раду M21-8 је проучавана електронска релаксација кето-амино таутомера цитозина у гасној фази. Нађено је да се најнижи вибрациони ниво у првом побуђеном синглетном електронском стању релаксира помоћу унутрашње конверзије и интерсистемског прелаза. Израчуната брзина интерсистемског прелаза је упоређена са експерименталном вредношћу и дискутовани су фактори који утичу на њену вредност.

У раду M21-9 проучавана је стабилност димера 1-метилтимиона. Разматрани су димери везани водоничним везама, наслагани димери и димери у облику слова Т. Такође, проучавана је анхармонијска спрега која укључује истезање N–H везе. Израчунати вибрациони спектри су поређени са експерименталним и разлике су продискутоване.

У раду M21-10 су проучаване особине изомера авобензона у основном и побуђеним електронским стањима у гасној фази и ацетонитрилу. Предложено је неколико електронских релаксационих механизма који укључују ротацију око двоструке угњеник-угњеник везе и ротацију хидроксилне групе. Такође су дискутовани релаксациони механизми који могу довести до стварања других изомера.

У раду M21-11 су проучаване особине наслаганих димера тимиона и њихових катјона помоћу теорије функционала електронске густине. Нађено је да је димеризација тимиона могућа на ниским температурама, али на високим температурама она је мало вероватна због ентропијских доприноса димеризацији. Особине електронске густине димера су проучаване теоријом атома у молекулима. Критичне тачке електронске густине у интермолекулском простору су идентификоване и њихове особине су дискутоване.

У раду M21-12 су разматране особине квинозолина, квиноксалина и фталазина у основном и побуђеним електронским стањима. Нађено је да су особине побуђених стања квинозолина и квиноксалина сличне док се особине фталазина разликују. Активни интересистемски прелази у квинозолину и квиноксалину укључују прелаз са првог побуђеног синглетног стања на најниже триплетно стање док у случају фталазина то је прелаз са првог побуђеног синглетног стања на друго триплетно стање.

У раду M21-13 испитиване су геометрије и енергије везивања одређених домаћин-гост система. У ту сврху коришћена је теорија функционала густине емпиријски коригована за дисперзне интерекције (DFT-D) у комбинацији са BLYP функционалом. Показано је да се добијени резултати добро слажу са експерименталним геометријама док поређење енергија везивања није било могуће извести због утицаја растварача на експериментално одређене вредности. Такође, добијени резултати упоређени су са резултатима добијеним *ab initio* MP2 методом. Разлагањем енергије интеракције, утврђено је да на стабилност комплекса пресудну улогу има електростатичка и дисперзна интеракција. Коришћени метод је предложен као корисно средство за одређивање структура комплекса у супрамолекулској хемији.

У раду M21-14 проучавана су побуђена електронска стања урацила, тимиона и 1-метилтимиона. Такође, израчунате су константе интересистемских прелаза на најниже триплетно стање. Потврђено је да се најниже триплетно стање ствара преко најнижег побуђеног синглетног стања. Дугоживеће тамно електронско стање нађено у експериментима под ниским притисцима је асигнирано као најниже триплетно стање.

У раду M21-15 су изведене три формуле за рачунање константи интересистемских прелаза користећи временски зависан метод. Прва формула је добијена користећи потпуну временски зависну корелациону функцију за хармонијске осцилаторе, друга формула је добијена развијањем прве у кумулантни развој до другог реда и трећа формула је добијена примењивањем апроксимације кратког времена на другу формулу. Формуле су тестиране на четири примера: на интересистемски прелаз у молекулима тимиона, феналенона, флавона и порфирина. Добијени резултати су упоређени са онима добијеним временски независним методама. Нађено је да је слагање резултата одлично. Предложена метода је препоручена за рачунање константи прелаза у случајевима када је густина стања крајњих вибронских нивоа велика.

У раду M22-1 су проучаване особине најнижег триплетног стања хлорофила *a*, *b* и *d* као и њихови фосфоресцентни спектри. Нађено је добро слагање израчунатих триплетних енергија са експерименталним вредностима. Такође, нађени су модови који зависе од координације хлорофила.

У раду M22-2 су теоријски испитивана побуђена синглетна и триплетна електронска стања о-нитробензил-ацетата и 4,5-метилендиокси супституисаног о-нитробензил ацетата. Различита фотохемијска реактивност и спектралне особине тих једињења су објашњене преко различитих удела преноса наелектрисања (*charge transfer*) у побуђеним електронским стањима. Најниже триплетно стање првог једињења настаје локалним прелазом из *n* у π^* орбиталу нитро групе. Због значајног радикалног карактера, то стање је реактивно. Најниже триплетно стање другог једињења настаје нелокалним преносом наелектрисања и стога је његова реактивност значајно смањена.

У раду M22-3 је испитавана електронска релаксација S_1 стања у тамно електронско стање молекула 5-метил-2-хидроксипиримидина помоћу квантно хемијских мултиконфигурационих метода. Утврђено је да је тамно стање триплетне спинске мултиплетности и израчунате су константе брзине његовог стварања. Такође, у раду је описана имплементација рачунања нумеричког градијента енергије рачунате DFT/MRCI методом и имплементација алгорита за налажење пресека електронских површина различите спинске мултиплетности.

У раду M23-1 су проучаване особине и структура главног фотохемијског производа димеризације 1-метилтимиона. Утврђено је да постоје два изомера и њихова стабилност је разматрана у вакууму и тешкој води. Такође је асигниран њихов вибрациони спектар.

У раду M23-2 израчунате брзине интерсистемског прелаза у урацилу и тимину за случај када су молекули у равнотежи са топлотним резервоаром. Коришћен је модел мултимодне хармонијске апроксимације. Нађено је да додатна вибрациона енергија у синглетном стању смањује брзину интерсистемског прелаза. То смањење је било значајније за урацил.

У раду M23-3 су проучаване особине хлорофила *a* и *b* у основном и побуђеним електронским стањима помоћу теорије функционала електронске густине. Израчуната времена флуоресценције су се добро слагала са експерименталним вредностима. Такође су разматрана катјонска стања и њихове особине су дискутоване.

У раду M23-4 су проучавани изомери авобензона у основном и побуђеном стању. Два механизма таутомеризације у основном стању су предложена и њихове особине су дискутоване. Посебно су детаљно описане прелазне структуре током изомеризације авобензона.

У раду M23-5 су проучаване особине фенилетиламина у основном и катјонском стањима помоћу теорије функционала електронске густине. Нађена је нова структура у катјонском стању која је претходно била непозната. Стабилност тог изомера је продискутована заједно са могућношћу њене експерименталне детекције. Такође је разматран утицај дисперзије на стабилност различитих изомера.

У раду M23-6 испитавана је зависност утицаја ротације нормалних модова електронских стања на квалитативне вредности константе брзине интерсистемског прелаза у урацилу. Такође проучавана је зависност константе брзине од разлике адијабатских енергија почетног и крајњег електронског стања. Нађено је да за разлике адијабатских енергија које су испод 6000 cm^{-1} неопходно је узети у обзир ротацију нормалних модова за добијање квантитативних резултата.

У раду M23-7 је проучавана зависност утицаја разлике адијабатских енергија почетног и крајњег електронског стања на константу брзине интерсистемског прелаза у тимину добијене користећи временски зависан метод. Константа брзине је рачуната користећи Кондонову апроксимацију за матрични елемент спин-орбитног оператора и хармонијску апроксимацију за кретање језгара. Нађено је да константа брзине квантитативно зависи од адијабатске енергије као и од тога да ли је урачуната ротација нормалних модова.

У раду M23-8 су проучаване особине пиримидин-пиримидон фотопроизвода два 1-метилтимина. Три конформера тог молекула су оптимизована и њихове геометрије су поређене. Такође су поређени њихови вибрациони спектри. Најзначајни разлике у спектрима потичу од интрамолекулских водоничних веза.

Научни пројекти:

Национални пројекти:

1. Структура, термодинамичке и електрохемијске особине материјала за конверзију енергије и нове технологије, финансиран од стране Министарства за науку и заштиту животне средине, пројекат број 142047, Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду. 2006 - 2010 - учесник

2. Molecular response to electronic excitation, (Sonderforschungsbereich 663), Институт за теоријску и рачунску хемију, Хајнрих-Хајне универзитет, Диселдорф, Немачка (немачки национални пројекат) 2006 - 2010 - учесник

3. **Пројекат бр. ОИ-172040:** [Структура и динамика молекулских система у основним и побуђеним електронским стањима](#), финансиран од стране Министарства образовања и науке Републике Србије. 2011 – 2017 – руководиоца од 2014.

Recenzije radova у научним часописима

Кандидат је рецензирао радове за следеће научне часописе: J. Serb. Chem. Soc., MATCH Commun. Math. Comput. Chem., Phys. Chem. Lett., J. Phys Chem A, New Journal of Chemistry. Такође, рецензиран је један научни пројекат за швајцарску националну научну фондацију (SNF).

Међународна сарадња

Михајло Етински је остварио међународну сарадњу са научним групама у Амстердаму (проф. Б. Енсинг) и Диселдорфу (проф. К. Мариан) што је документовано заједничким радовима и саопштењима.

Ђ. Остале активности

Кандидат одлично говори енглески, а служи се и француским и немачким језиком. Члан је Друштва физикохемичара Србије и Српског хемијског друштва. Учествовао је у ваннаставним активностима и популаризацији науке које организује Факултет за физичку хемију као што су Фестивали науке, сајмови образовања, "Наука око нас". Такође је учествовао у прикупљању материјала за монографију „110 година физичке хемије“, издате од стране Факултета за физичку хемију, Универзитета у Београду, 2013.

Е. Закључци и препоруке комисије за припрему извештаја о пријављеним кандидатима

На основу изложених података се види да доцент др **Михајло Етински** испуњава све услове из члана 74 Закона о високом образовању, члана 11 Правилника о минималним условима за избор наставника на Универзитету које је утврдио Национални просветни савет, члана 124 Статута Универзитета у Београду, члана 13 Правилника о минималним условима за стицање звања наставника на Универзитету у Београду, члана 124 Статута Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду, као и члан 11 из Правилника за избор наставника и сарадника Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду за избор у звање и на радно место **ванредни професор**. Пошто доцент др Михајло Етински конкурише у звање ванредног професора без реизбора у доцентско звање, он по Правилнику за избор наставника и сарадника Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду треба да задовољи двостуко веће критеријуме од уобичајених везане за наставне и научне активности. Увидом у приложену биографију и библиографију потврђујемо да Михајло Етински испуњава и те додатне критеријуме. Односно, др Михајло Етински има докторат физикохемијских наука, објавио је збирку задатака за курс из Статистичке термодинамике на основим студијама, а вредност његовог наставног и педагошког рада од последњег избора у звање износи 42,1 (потребно $20 \times 2 = 40$). Поред тога, објавио је 1 поглавље у монографији међународног значаја, 31 научни рад (потребно $15 \times 2 = 30$ радова; 5 радова је штампано у међународним часописима изузетних вредности, 15 радова у врхунским међународним часописима – 12 после избора, 3 рада у истакнутим међународним часописима – 1 после последњег избора, 8 радова у међународним часописима – 5 после последњег избора). Такође има једно саопштење са међународног скупа штампано у целини после избора, 10 саопштења са међународних скупова штампаних у изводу – 4 после избора, једно предавање по позиву са скупа националног значаја штампано у изводу после избора. Цитираност научних радова кандидата без аутоцитата је 395, h-индекс једнак је 12. Одржао је два предавања по позиву на иностраним Универзитетима. Михајло Етински је био ментор у изради 4 мастер рада и 7 дипломских радова, као и члан комисија у одбрани 5 мастер радова и 7 дипломских радова. Тренутно је ментор једног докторанда. Кандидат је руководиоца националног научног пројекта и има успостављену међународну сарадњу.

Полазећи од анализе целокупне наставне и научно-истраживачке активности др Михајла Етинског, обима и квалитета његовог досадашњег рада, предлагемо Изборном већу Факултета за физичку хемију и Већу научних области природних наука Универзитета

у Београду да изаберу **др Михајла Етинског** у звање и на радно место **вандредни професор** за ужу научну област **Физичка хемија – квантна хемија** а за предмете **Статистичка термодинамика** на основним академским студијама и **Молекулске симулације у физичкој хемији** на мастер академским студијама Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду.

У Београду, 27.11.2017. године.

КОМИСИЈА РЕФЕРЕНАТА

др Миљенко Перић,
проф. емеритус, редовни члан САНУ
Универзитет у Београду - Факултет за физичку хемију

др Љиљана Колар-Анић,
проф. емеритус, Универзитет у Београду - Факултет за физичку хемију

др Милена Петковић,
ван. проф., Универзитет у Београду - Факултет за физичку хемију

др Станка Јеросимић,
ван. проф., Универзитет у Београду - Факултет за физичку хемију

др Горан Попарић,
ван. проф., Универзитет у Београду – Физички факултет

Индикатори наставничке, научне и стручне компетентности и успешности као и рада у академској и широј заједници према Правилнику за избор наставника и сарадника Факултета за физичку хемију

Табела вредности индикатора наставне и педагошке компетентности др Михајла Етинског

Назив и ознака групе	Укупно	Од претходног избора
П11 Оцена наставне активности	5	5
П21 Кандидат је у потпуности припремио наставни програм предмета	5	5
П22 Кандидат је модификовао постојећи наставни програм предмета	2	2
П23 Осавремењивање наставе и наставних средстава	2	2
П32 Објављен помоћни уџбеник, практикум или збирка задатака	5	5
П47 Ментор одбрањеног (мастер) рада	$2 \times 4 = 8$	$2 \times 4 = 8$
П48 Члан комисије одбрањеног (мастер) рада	$0,5 \times 5 = 2,5$	$0,5 \times 5 = 2,5$
П49 Ментор одбрањеног дипломског рада	$1,5 \times 7 = 10,5$	$1,5 \times 7 = 10,5$
П50 Члан комисије одбрањеног дипломског рада	$0,3 \times 7 = 2,1$	$0,3 \times 7 = 2,1$
Укупно	42,1	42,1

Табела вредности индикатора научне компетентности др Михајла Етинског

Назив и ознака групе	Укупно	Од претходног избора
М13 Монографска студија/поглавље у књизи М11	7	7
М21а Рад у врхунском међународном часопису	$10 \times 5 = 50$	/
М21 Рад у врхунском међународном часопису	$8 \times 15 = 120$	$8 \times 12 = 96$
М22 Рад у истакнутом међународном часопису	$5 \times 3 = 15$	$5 \times 1 = 5$
М23 Рад у међународном часопису	$3 \times 8 = 24$	$3 \times 5 = 15$
М33 Саопштење са међународног скупа штампано у целини	1	1
М34 Саопштење са међународног скупа штампано у изводу	$0,5 \times 10 = 5$	$0,5 \times 4 = 2$
М62 Предавање по позиву са скупа националног значаја штампано у изводу	1	1
М71 Одбрањена докторска дисертација	6	
М72 Одбрањена магистарска теза	3	
С102 Руковођење националним научним пројектом	5	5
С105 Учешће у пројектима финансираним од стране надлежног Министарства	$1 \times 2 = 2$	$1 \times 1 = 1$
М21а+ М21+ М22+ М23	209	116
М33+М34+М62	7	4
Укупно	239	133

Табела минимално потребних и остварених поена др Михајла Етинског за стицање универзитетског звања **вандредни професор** према критеријуму **Већа научних области природних наука Универзитета у Београду и Факултета за физичку хемију**

Потребно	Остварено
2×15 радова (2×3 M21+ 2×3 M22)	31 рад (5M21a +15 M21+ 3 M22 + 8 M23)
2×3 саопштења на научним скуповима од последњег избора	6
уџбеник или збирка задатака	збирка задатака
међународна сарадња	остварена
вредност педагошког и наставног рада > 2×20	42,1
менторство дипломских и мастер радова и бар једне докторске дисертације	менторство 7 дипломских, 4 мастер рада, ментор једног докторанда
цитираност > 50	395 (h-индекс=12)
додатни услови: барем два	рецензент у водећим међународним научним часописима; рецензент међународних научних пројеката; председник или члан комисија за израду завршних радова на академским основним, мастер студијама; руководилац и сарадник на домаћим научним пројектима; поседује комуникационе способности; студијски боравци у иностранству; чланство у органу професионалног удружења; предавања по позиву на универзитетима у иностранству