



Универзитет у Београду
Факултет за физичку хемију

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ФАКУЛТЕТА ЗА ФИЗИЧКУ ХЕМИЈУ

Предмет: Извештај комисије за оцену и одбрану урађене докторске дисертације кандидата мастер физикохемичара Марка Митића

Одлуком Наставно-научног већа Факултета за физичку хемију, са VII редовне седнице одржане 15. јуна 2020. године, именовани смо за чланове комисије за оцену и одбрану урађене докторске дисертације кандидата **мастера физикохемичара Марка Митића**, под насловом: **Проучавање Ренер-Телеровог ефекта у вишеатомским линеарним молекулима применом варијационе методе.**

Израда докторске дисертације под наведеним насловом одобрена је одлуком Наставно-научног већа са I редовне седнице од 11. октобра 2018. године. На основу те одлуке, Веће научних области природних наука Универзитета у Београду је, на својој XIX седници од 25. октобра 2018. године, дало сагласност да се прихвати предложена тема докторске дисертације.

На основу прегледа и анализе докторске дисертације кандидата, комисија подноси Наставно-научном већу Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду следећи

ИЗВЕШТАЈ

A. Приказ садржаја докторске дисертације

Докторска дисертација кандидата Марка Митића, мастер физикохемичара, је написана на 100 страна куцаног текста, у складу са Упутством за обликовање докторске дисертације Универзитета у Београду. Докторска дисертација садржи следећа поглавља:

Увод (шест страна), Основе квантнохемијског рачуна (14 страна), Ренер-Телеров ефекат у линеарним вишеатомским молекулима са произвољним бројем језгара (21 страна), Резултати и дискусија (41 страна), Закључак (три стране), Литература (118 литературних навода, седам страна) и Прилози (седам страна). Кандидат је уз текст докторске дисертације приложио Биографију (једна страна) и изјаве прописане правилима Универзитета у Београду. Докторска дисертација садржи укупно 31 слику (три слике су из постојеће литературе, а 28 слика представљају оригиналне резултате кандидата) и 10 табела (све табеле представљају оригиналне резултате кандидата).

У поглављу **Увод**, које се састоји од три целине, прво је описан Ренер-Телеров ефекат и проблематика истог код вишеатомских линеарних молекула. Представљени су претходни резултати истраживања у овој области. У другом делу описан је предмет и циљ истраживања, као и значај и актуелност проблематике истраживања Ренер-Телеровог ефекта код вишеатомских линеарних молекула. На крају, дат је списак научних радова кандидата који су проистекли из докторске дисертације.

Поглавље **Основе квантнохемијског рачуна** састоји се од девет целина. Ово поглавље садржи основне концепте квантно-хемијских метода које су коришћене у докторској дисертацији. Прве две целине односе се на Шредингерову једначину и Борн-Опенхајмерову апроксимацију. У трећој целини је укратко описана варијациона метода која представља основу за већину квантно-хемијских метода, а такође и метода из наслова докторске дисертације која је примењена за решавање вибронског проблема. Четврти и пети део односе се на Хартри-Фокову методу и појам електронске корелације, редом. У шестој целини описане су једнореферентне методе које су коришћене у докторској дисертацији, конкретно метода спрегнутих кластера. Коришћене вишереферентне методе описане су у седмом делу, конкретно метода самоусаглашеног поља са више конфигурација, *CASSCF* метода и вишереферентна метода интеракције конфигурација. Осма и девета целине односе се на базне скупове коришћене у претходно поменутих методама и на појам експлицитно корелираних метода, редом.

Поглавље **Ренер-Телеров ефекат у линеарним вишеатомским молекулима са произвољним бројем језгара** састоји се из осам целина. У овом поглаву детаљно је описан модел који је коришћен за опис Ренер-Телеровог ефекта. Прва целина односи се на моделни хамилтонијан који је коришћен и све апроксимације које су примењене приликом

извођења израза за моделни хамилтонијан у криволинијским унутрашњим савијајућим координатама. Наредна три дела разматрају форму електронских базних функција (адијабатска, дијабатска и линеарна база) које се могу користити, њихове предности и мане на даљи опис вибронског проблема. У петом делу приказано је извођење параметра трансформације (угао τ) адијабатских у дијабатске функције, као и неадијабатских матричних елемената, у случају молекула са произвољним бројем језгара. Последње три целине односе се на вибрационе базне функције и квантне бројеве, опис варијационог приступа за решавање вибронског проблема, и одређивање неопходних параметара модела из *ab initio* рачуна.

Поглавље **Резултати и дискусија** се састоји из четири дела. У првој целини дат је опис и структура рачунарског програма за варијационо рачунање вибронског спектра у случају молекула са произвољним бројем језгара, линеарном равнотежном геометријом, у Π електронским стањима и произвољне спинске мултиплетности. Програм је написан у програмском језику *Python 3*. Друга целина обухвата приказ резултата и дискусију разматраних четвороатомских молекула у докторској дисертацији, молекули $C_2H_2^+$ и $C_2S_2^-$ у $X^2\Pi_u$ електронским стањима. У трећем и четвртном делу приказани су резултати и дискусија разматраних петоматских (молекула C_5^- у $X^2\Pi_u$ електронском стању) и шестоатомских молекула (молекула C_6^- у $X^2\Pi_u$ електронском стању), редом.

Поглавље **Закључак** сумира резултате и закључке истраживања обухваћених овом докторском дисертацијом. У поглављу **Литература** наведене су цитиране референце по редоследу њиховог појављивања.

Б. Опис резултата докторске дисертације

Предмет истраживања у овој докторској дисертацији је Ренер-Телеров ефекат код молекула са више од три језгра у Π електронским стањима и линеарном равнотежном геометријом. У програмској језику *Python 3* докторанд је написао програм за варијационо рачунање ниско-енергетских вибронских нивоа који се може применити на молекуле са произвољним бројем језгара, линеарном равнотежном геометријом, Π електронским стањима и произвољном спинском мултиплетношћу.

Тестирана је поузданост релативно једноставног модела за третирање Ренер-Телеровог ефекта код четвороатомских молекула, на примеру $X^2\Pi_u$ електронског стања

$C_2H_2^+$ поређењем са експлицитно *ab initio* израчунатим неадијабатским матричним елементима. Додатно, поузданост модела је тестирана и рачунањем ниско-енергетског вибронског спектра молекула $C_2H_2^+$ у $X^2\Pi_u$ електронском стању и резултати су упоређени са доступним експерименталним подацима.

Коришћењем модела за третирање Ренер-Телеровог ефекта код молекула са произвољним бројем језгара, варијационо су израчунати вибронски нивои у $X^2\Pi_u$ електронском стању молекула $C_2S_2^-$. Показано је да постоји релативно јак Ренер-Телеров ефекат код *trans*-савијајућих модова, што доводи до цепања побуђених савијајућих модова на неколико компонената. Са друге стране, Ренер-Телеров ефекат у *cis*-савијајућим модовима је практично занемарљив. Добијени резултати су примењени за асигнацију трака у спектру добијеном ласерски индукованом флуоресценцијом, које раније нису биле асигниране. Даље, израчунато је да је спин-орбитно цепање основног електронског стања на две компоненте око 253 cm^{-1} , што је био разлог за класификацију вибронских нивоа у различите спин-орбитне електронске компоненте, према Хундовом случају а). Како постоји релативно добро слагање израчунатих вибронских нивоа са експерименталним резултатима, опис савијајућих вибрација и добијени вибронски спектар у овој докторској дисертацији може бити од користи даљем експерименталним истраживањима и детекцији овог молекула.

Проучена су пресецања потенцијалних површи петоатомских молекула на примеру C_5^- молекула у $X^2\Pi_u$ електронском стању. За разлику од четвороатомских молекула где се тачке пресека јављају при планарним или непланарним геометријама молекула, у зависности од Ренер-Телер параметара, овде се пресецања потенцијалних површи јављају и при планарним и при непланарним геометријама. Даље, у случају петоатомских молекула или молекула са више језгара, положаје пресека није могуће једноставно одредити као код четвороатомских молекула. Модел за третирање Ренер-Телеровог ефекта примењен је у варијационом формализму први пут за рачунање ниско-енергетско вибронских нивоа петоатомског молекула. Резултати варијационог рачуна упоређени су резултатима пертурбационог рачуна и утврђено је релативно добро слагање. Посебан значај варијационог приступа је тај што се коришћењем претурбационе теорије не могу добити нивои за сваку могућу комбинацију вибрационих квантних бројева, док варијациони приступ омогућава рачунање свих вибронских нивоа од интереса.

Израчунати су ниско-енергетски вибронски нивои молекула C_6^- у $X^2\Pi_u$ електронском стању применом варијационог поступак и модела за третирање Ренер-Телеровог ефекта приказаног у овој докторској дисертацији. Варијационо добијени резултати су у добром слагању са резултатима проистеклих из пертурбационе теорије. Међутим, како пертурбациони приступ омогућава рачунање само одређених комбинација вибрационих квантних бројева, варијациони метод нам даје могућност да израчунамо све вибронске нивое од интереса. Иако је примењени модел релативно једноставан, модел даје релативно добре резултате, ако се ограничимо на ниско-енергетски део вибронског спектра. Третирање Ренер-Телеровог ефекта у молекула са више од три језгра било би веома тешко на већем нивоу софистикације. Међутим, често је случај, гледано са становишта експеримента, да вибронски нивои код молекула са више језгара (од три) укључују само један или два савијајућа мода. У вези са тим, вибронски проблем се ефективно своди на троатомске или четвороатомске врсте.

В. Упоредна анализа резултата докторске дисертације са подацима из литературе

Велики број молекула/радикала од значаја за астрохемију, реакције сагоревања, састав и спектроскопију плазме испољавају Ренер-Телеров ефекат. У вези са тим, добро познавање спектроскопских особина ових молекулских врста је од великог значаја за њихову детекцију у лабораторији, плазмама и интерстеларном простору, што проблематику моделовања Р-Т ефекта у вишеатомским линеарним молекулима чини и данас актуелном [1].

Ренер-Телеров ефекат је теоријски предвиђен код троатомских молекула 1934. године [2], само неколико година након открића закона (квантне теорије) по којима се атоми и молекули понашају. Око 25 година касније, ефекат је и експериментално опажен [3, 4]. Херцберг је 1936. године [5] дао први експериментали доказ о постојању Ренер-Телеровог ефекта код четвороатомских молекула. Теорија Ренер-Телеровог ефекта код молекула који садрже више од три језгра знатно је компликованија у односу на троатомске молекуле. У вези са тим, није изненађујућа чињеница да је први теоријски модел за третирање Ренер-Телеровог ефекта код четвороатомских молекула, од стране Петелина и Киселева [6], појавио скоро 10 година након Херцберговог експерименталног открића.

Две чињенице чине теорију и/или моделовање Р-Т ефекта код троатомских молекула релативно једноставним: (а) молекул приликом савијања задржава одређену симетрију (само долази до снижавања симетрије: $D_{\infty h} / C_{\infty v} \rightarrow C_{2v} / C_S$), што омогућава познавање асимптотских форми електронских таласних функција за две компоненте електронског стања; (б) неадијабатски матрични елементи у матрици хамилтонијана, који узрокују вибронску спрегу, су отежани факторима ка линеарној геометрији, што омогућава да се у доброј апроксимацији израчунају у бази коју чине асимптотске форме електронских таласних функција [7-9]. Код молекула у чији састав улази више од три језгра ситуација је знатно сложенија зато што ни (а) ни (б) не важи. При произвољним геометријама молекула у односу на линеарну, молекул припада тривијалној C_1 групи симетрије тачке и (избегнута) пресецања потенцијалних површи, која проузрокују велике неадијабатске матричне елементе, могу постојати при геометријама молекула које су далеко од линеарне. Дакле, асимптотске форме електронских таласних функција не могу се одредити коришћењем само симетрије, а чак и да су асимптотске функције познате не значи да би се могле користити за израчунавање неадијабатских матричних елемената у матрици хамилтонијана.

Прва *ab initio* студија Ренер-Телеровог ефекта у четвороатомским молекулима објављена је пре 33 године [10] (Перић *et al.*). Приступ који је развијен заснивао се на истим претпоставкама као и оригинални пертурбациони приступ Петелина и Киселева [6], узети су у обзир само језгарни степени слободе који директно доприносе Ренер-Телеровом ефекту. Модел је даље унапређен тако да се могао користити како за Π електронска стања, тако и за Δ стања. Примењен је на рачунање вибронског спектра молекула $C_2H_2^+$ у $X^2\Pi_u$ електронском стању [11], узимајући у обзир поред вибронске спреге и спин-орбитну спрегу [12]. Код четвороатомских молекула (избегнута) пресецања се могу јавити и при планарним и при непланарним геометријама [8, 9]. Позиција ових пресека је одређена нумеричким параметрима који су аналогни Ренеровом параметру ϵ код троатомских молекула, односно ако су познати ови параметри тачке пресека могу се лако одредити [9]. Дакле, код четвороатомских молекула, и молекула са више језгара, Ренер-Телеров ефекат представља комбинацију класичног Ренер-Телеровог ефекта (који се јавља код троатомских молекула) и коничних пресека потенцијалних површи, односно Јан-Телеровог ефекта. Коришћењем модела заснованих на хармонијској апроксимацији,

поменути други ефекат је приликом третирања Ренер-Телеровог ефекта у четвороатомским молекулима сакривен и не може се запазити. Дакле, модел за третирање Ренер-Телеровог ефекта у четвороатомским молекулима је примењиван не узимајући у обзир горе поменуто ситуацију, или у општем случају не знајући за постојање исте. Могло би се поставити питање плаузабилности модела и добијених резултата.

Модел који је прво развио М. Перих је заснован на трансформацији адијабатских електронских таласних функција за две компоненте $X^2\Pi_u$ стања, у одговарајуће дијабатске таласне функције. Кључан параметар у моделу јесте угао трансформације τ који одређује оријентацију просторно-фиксираних "вештачке равни симетрије", са особиним да је једна адијабатска електронска таласна функција инваријантна, док друга мења знак приликом рефлексије у поменутој равни. Угао τ је функција свих језгарних координата. За разлику од досадашњих истраживања где је форма угла τ одређивана индиректно [13, 14], у овој докторској дисертацији је, у циљу провере плаузабилности модела, то по први пут урађено коришћењем експлицитно *ab initio* израчунатих неадијабатских матричних елемената, који одређују форму τ . Показано је да се предвиђања модела за ову величину слажу са *ab initio* резултатима. Додатно, поузданост модела је тестирана и рачунањем ниско-енергетског вибронског спектра молекула $C_2H_2^+$ у $X^2\Pi_u$ електронском стању. Добијена су добра слагања са експерименталним резултатима [15, 16].

Програм који је написао докторанд за варијациони рачун је примењен за варијационо рачунање ниско-енергетског вибронског спектра четвороатомског молекула $SCCS^-$ у $X^2\Pi_u$ електронском стању. Резултати су упоређени са доступним експерименталним резултатима [17] и уочено је добро слагање. Додатно, применом добијених резултата асигниране су траке у спектру добијеном ласерски индукованом флуоресценцијом [17], а које раније нису биле асигниране.

Надаље, у докторској дисертацији први пут је проучавана топологија потенцијалних површи и зависности неадијабатских матричних елемената од координата језгара код молекула са произвољним бројем језгара, а на примеру C_5^- у $X^2\Pi_u$ електронском стању. Запажено је да се пресецања потенцијалних површи код молекула са произвољним бројем језгара јављају и при планарним и при непланарним геометријама, за разлику од четвороатомских молекула где се пресецања јављају или при планарним или при непланарним геометријама [9]. Варијационо је израчунат ниско-енергетски вибронски

спектар и резултати упоређени са резултатима добијеним пертурбационом методом [18], при чему су запажена су добра слагања.

Програм је примењен и за варијационо рачунање ниско-енергетског спектра шестоатомског молекула C_6^- у $X^2\Pi_u$ електронском стању. Добијено је добро слагање са ранијим резултатима који су добијени пертурбационом методом [19].

[1] U. Jacovella, F. Merkt, Spin-orbit interaction and Renner-Teller effect in $HCCCCCH^+$ studied by high-resolution photoelectron spectroscopy, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **105**, 156–192 (2017).

[2] R. Renner, Zur Theorie der Wechselwirkung zwischen Elektronen- und Kernbewegung bei dreiatomigen, stabförmigen Molekülen, *Zeitschrift für Physik*, **92**, 172–193 (1934).

[3] K. Dressler, D. A. Ramsay, Renner Effect in Polyatomic Molecules, *The Journal of Chemical Physics*, **27**, 971–972 (1957).

[4] K. Dressler, D. A. Ramsay, The electronic absorption spectra of NH_2 and ND_2 , *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **251**, 553–602 (1959).

[5] G. Herzberg, Twelfth Spiers Memorial Lecture. Determination of the structures of simple polyatomic molecules and radicals in electronically excited states, *Discussions of the Faraday Society*, **35**, 7 (1963).

[6] A. N. Petelin, A. A. Kiselev, The Renner effect in four-atomic molecules, *International Journal of Quantum Chemistry*, **6**, 701–716 (1972).

[7] M. Perić, S. D. Peyerimhoff, *In The Role of Degenerate States in Chemistry: A Special Volume of Advances in Chemical Physics*, Volume **124** (eds Baer, M. & Billing, G. D.) 583 (John Wiley & Sons, Inc., New York, USA, 2002).

[8] M. Perić, S. Jerosimić, R. Ranković, M. Krmar, J. Radić-Perić, An *ab initio* model for handling the Renner-Teller effect in tetra-atomic molecules. I. Introduction of coordinates and the Hamiltonian, *Chemical Physics*, **330**, 60–72 (2006).

[9] M. Perić, An *ab initio* model for handling the Renner-Teller effect in tetra-atomic molecules. II. Study of the crossing of potential surfaces, *Chemical Physics*, **330**, 73–81 (2006).

[10] M. Perić, S. D. Peyerimhoff, R. J. Buenker, Theoretical study of the U.V. spectrum of acetylene, *Molecular Physics*, **55**, 1129–1145 (1985).

- [11] M. Perić, S. D. Peyerimhoff, *Ab initio* investigation of the Renner–Teller effect in the $X^2\Pi_u$ electronic state of $C_2H_2^+$, *The Journal of Chemical Physics*, **102**, 3685 (1995).
- [12] M. Perić, H. Thümmel, C. M. Marian, S. D. Peyerimhoff, *Ab initio* study of the vibronic and spin–orbit coupling in the $X^2\Pi_u$ state of $C_2H_2^+$, *The Journal of Chemical Physics*, **102**, 7142 (1995).
- [13] M. Perić, B. Ostojić, B. Engels, On a theoretical model for the Renner-Teller effect in tetra-atomic molecules, *The Journal of Chemical Physics*, **105**, 8569–8585 (1996).
- [14] M. Perić, B. Ostojić, J. Radić-Perić, *Ab initio* investigation of the Renner-Teller effect in tetra-atomic molecules, *Physics Report*, **290**, 283–357 (1997).
- [15] S.-J. Tang, Y.-C. Chou, J. J.-M. Lin, Y.-C. Hsu, The bending vibrational levels of the acetylene cation: a case study of the Renner-Teller effect in a molecule with two degenerate bending vibrations, *The Journal of chemical physics*, **125**, 133201 (2006).
- [16] J. Yang, Y. Mo, Renner-teller effect in $C_2H_2^+$ ($X^2\Pi_u$) studied by rotationally resolved zero kinetic energy photoelectron spectroscopy, *Journal of Physical Chemistry A*, **110**, 11001–11009 (2006).
- [17] M. Nakajima, Y. Yoneda, Y. Sumiyoshi, T. Nagata, Y. Endo, Laser-induced fluorescence and fluorescence depletion spectroscopy of $SCCS^-$, *The Journal of Chemical Physics*, **119**, 7805–7813 (2003).
- [18] M. Perić, M. Petković, S. Jerosimić, Renner-Teller effect in five-atomic molecules: *Ab initio* investigation of the spectrum of C_5^- , *Chemical Physics*, **343**, 141–157 (2008).
- [19] M. Perić, R. Ranković, S. Jerosimić, Renner-Teller effect in six-atomic molecules: *Ab initio* investigation of the vibronic spectrum of C_6^- , *Chemical Physics*, **344**, 35–51 (2008).

Г. Научни радови публиковани из резултата докторске дисертације

Кандидат Марко Митић је из резултата докторске дисертације објавио један рад у врхунском међународном часопису (M21), два рада у истакнутим међународним часописима (M22) и два рада у међународним часописима (M23). Кандидат је први аутор на три рада.

Радови у врхунским међународним часописима (M21):

M. Perić, S. Jerosimić, **M. Mitić**, M. Milovanović, R. Ranković, Underlying theory of a model for the Renner-Teller effect in tetra-atomic molecules: $X^2\Pi_u$ electronic state of $C_2H_2^+$, *The Journal of Chemical Physics*, **142**, 174306-14 (2015), doi: [10.1063/1.4919285](https://doi.org/10.1063/1.4919285)

Радови у истакнутим међународним часописима (M22):

M. Mitić, R. Ranković, M. Milovanović, S. Jerosimić, M. Perić, Underlying theory of a model for the Renner-Teller effect in any-atomic linear molecule on example of $X^2\Pi_u$ electronic state of C_5^- , *Chemical Physics*, **464**, 55-68 (2016), doi: [10.1016/j.chemphys.2015.11.002](https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2015.11.002)

M. Mitić, M. Milovanović, R. Ranković, S. Jerosimić, M. Perić, Topological study of nonadiabatic effects in Π electronic states of tetra-atomic molecules, *Molecular Physics*, **116:19-20**, 2671-2685 (2018), doi: [10.1080/00268976.2018.1445876](https://doi.org/10.1080/00268976.2018.1445876)

Радови у међународним часописима (M23):

M. Mitić, M. Milovanović, R. Ranković, S. Jerosimić, M. Perić, Variational calculation of the vibronic spectrum in the $X^2\Pi_u$ electronic state of C_6^- , *Journal of Serbian Chemical Society*, **83 (4)**, 439-448 (2018), doi: [10.2298/JSC171129001M](https://doi.org/10.2298/JSC171129001M)

S. V. Jerosimić, **M. Lj. Mitić**, M. Z. Milovanović, $SCCS^-$ radical: Renner-Teller effect and spin-orbit coupling in the $X^2\Pi_u$ electronic state, *Journal of the Serbian Chemical Society*, **84 (8)**, 801-817 (2019), doi: [10.2298/JSC190401033J](https://doi.org/10.2298/JSC190401033J)

Д. Провера оригиналности докторске дисертације

Оригиналност ове докторске дисертације проверена је на начин прописан Правилником о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду (Гласник Универзитета у Београду, бр. 204/22 06. 2018.) Помоћу програма *iThenticate*, утврђено је да количина подударача текста износи 4 %. Овај степен подударности последица је коришћења типичних израза који се користе у радовима из Ренер-Телеровог ефекта које је публикувао докторанд и који су проистекли из његове дисертације, затим резултати у форми ознака стања и њихових енергија, опште формуле из уводног дела (нпр. Шредингерова једначина, Слејтерова детерминанта, изрази за таласну функцију методе спрегнутих кластера, скраћенице за методе које се користе, базне функције, итд). Што се тиче најважнијег дела дисертације који је дискусија резултата, осим са радовима докторанда, подудараче се среће из делова појединих формула који су општи и за друге феномене, нпр изразе за редуковане масе, парцијалне изводе, матричне елементе хамилтонијана. Подударају се и цитати, лична имена, подаци о

менторима и институцијама, општа места и подаци (изјаве о ауторству и слично), што је у складу са чланом 9. Правилника. Стога, сматрамо да је утврђено да је докторска дисертација кандидата Марка Митића у потпуности оригинална, као и да су у потпуности задовољена академска правила цитирања.

Б. Закључак комисије

На основу изложеног Комисија закључује да резултати кандидата Марка Митића, мастер физикохемичара, приказани у оквиру докторске дисертације представљају оригиналан и значајан допринос области физичке хемије. Комисија позитивно оцењује докторску дисертацију кандидата Марка Митића, мастер физикохемичара, под насловом:

„Проучавање Ренер-Телеровог ефекта у вишеатомским линеарним молекулама применом варијационе методе“

и предлаже Наставно-научном већу Факултета за физичку хемију Универзитета у Београду да докторску дисертацију прихвати и одобри њену јавну одбрану, чиме би били испуњени услови да кандидат стекне звање доктор физичкохемијских наука.

Београд, 06.07.2020.

Комисија

др Станка Јеросимић, ванредни професор
Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду

др Михајло Етински, ванредни професор
Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду

др Маја Груден-Павловић, редовни професор
Хемијски факултет, Универзитет у Београду

др Милан Миловановић, научни сарадник
Факултет за физичку хемију, Универзитет у Београду