

Универзитет у Крагујевцу
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Број: 6/436
13. 12. 2024. године
Крагујевац

На основу члана 82 став 2 Закона о науци и истраживањима и члана 114 став 2, 152 став 1 и 158 Статута Факултета по поднетом извештају комисије ради спровођења поступка за избор у научно звање број 03-38/50-1 од 13.12.2024. године, Декан Факултета дана 13. 12. 2024. године, донео је следећу

О Д Л У К У

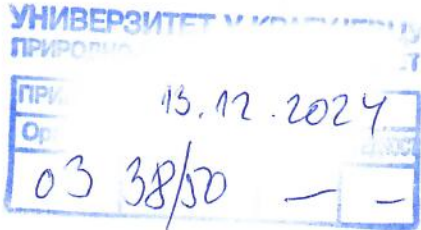
Ставља се на увид јавности у трајању од 30 дана објављивањем у PDF формату на интернет страници Факултета електронска верзија Извештаја комисије о утврђивању предлога за избор кандидата **др Слађане Ђорђевић** у научно звање **Научни сарадник**.

За реализацију ове одлуке задужују се Продекан за наставу и техничко-информатичка служба Факултета.

Д Е К А Н а

Проф. др Марија Станић

- Д-но:
- продекану за наставу,
 - ННВ-у Факултета,
 - архиви



МОЛБА ДЕКАНУ

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА УНИВЕРЗИТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

Предмет: Извештај Комисије за спровођење поступка за избор кандидаткиње др Слађане Ђорђевић у звање **научни сарадник** у Институту за хемију за научну област **Хемијске науке**.

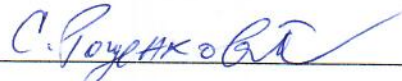
Поштована,

достављам Вам Извештај комисије за избор у звање **научни сарадник** за научну област **Хемијске науке**.

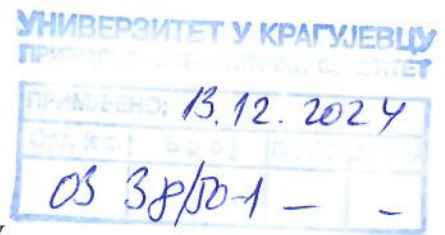
Молим Вас да проследите овај Извештај у даљу процедуру.

У Крагујевцу
13. 12. 2024. године

Подносилац молбе



др Славко Раденковић, ванредни професор
Природно-математички факултет
Универзитет у Крагујевцу
Научна област: Хемијске науке
Ужа научна област: Физичка хемија
председник Комисије



НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ ФАКУЛТЕТА
УНИВЕРЗИТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

Одлуком Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу бр. 820/VII-2, на седници одржаној 4. децембра 2024. године, одређени смо за чланове Комисије за припрему извештаја о испуњености услова др **Слађане Ђорђевић** за стицање звања **научни сарадник**, за научну област Хемијске науке. На основу увида у приложену документацију, сагласно критеријумима за стицање научних звања утврђеним Правилником о стицању истраживачких и научних звања надлежног Министарства („Службени гласник РС“, број 159/2020 и 014/2023), а у складу са Законом о науци и истраживањима („Службени гласник РС“, бр. 49/2019), Комисија подноси Наставно-научном већу Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу следећи

ИЗВЕШТАЈ

А. Биографски подаци

Слађана Ђорђевић тренутно је запослена као асистенткиња на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу. Рођена је 4. јуна 1993. године у Приштини. Основну школу је завршила у Крушевцу. Након тога је завршила Гимназију, друштвено-језички смер, са одличним успехом. Школске 2012/13. године уписала је основне академске студије, студијски програм Хемија, модул Хемичар за истраживање и развој на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу. Током школске 2013/14. године изабрана је за најбољег студента хемије. Основне академске студије је завршила 27. септембра 2016. године са просечном оценом 9,71. Мастер академске студије на Природно-математичком факултету Универзитета у Крагујевцу уписала је школске 2016/17. године под менторством проф. др Славка Раденковића. Мастер академске студије је завршила 6. јула 2017. године, са просечном оценом 10. Докторске академске студије на Природно-математичком факултету у Крагујевцу уписала је школске 2017/2018. године. Слађана Ђорђевић је 25. априла 2024. године одбранила докторску дисертацију под насловом „Теоријско испитивање електронске

структуре и магнетних особина кластера бора“, под менторством др Славка Раденковића, ванредног професора Природно-математичког факултета у Крагујевцу. Добитница је стипендије Фонда за младе таленте Републике Србије за 800 најбољих студената завршних година основних академских студија за школску 2015/16. годину и за 400 најбољих студената завршних година мастер академских студија за школску 2016/17. годину. Носилац је Специјалног признања које додељује Српско хемијско друштво за остварен успех током основних академских студија. Добитница је Светосавске награде коју додељује град Крушевац за изузетан успех током завршне године основних академских студија.

Слађана Ђорђевић је ангажована у настави, у извођењу вежби из предмета Физичка хемија 1, Физичка хемија 2, Увод у хемоинформатику, Увод у молекулско моделирање, Питон у хемији, Хемоинформатика, Молекулско моделирање 1 и Молекулско моделирање 2, где је показала изузетан смисао за наставно-педагошку активност. До сада је четири пута награђивана као најбоље оцењени асистент на основу резултата студентске анкете.

Координаторка је групе ентузијаста који се баве промоцијом хемије као науке, те је стога редовна учесница „Фестивала науке“, „Ноћи истраживача“, „Ноћи музеја“, „Отворена врата ПМФ-а“ и многих других манифестација и активности. Тренутно је координаторка пројекта „Наука на даскама“, који финансира Центар за промоцију науке.

Слађана Ђорђевић је члан више тимова билатералних пројеката: два билатерална пројекта са Републиком Словенијом у периоду 2020-2022 („Graph theoretical approaches to molecular nanostructures“, руководилац са српске стране др Славко Раденковић, и „Modern trends in chemical graph theory“, руководилац са српске стране др Драган Стевановић) и билатерални пројекат са Републиком Кином у периоду 2021-2023 („Bonding in bioinorganic systems – A valence bond approach“, руководилац са српске стране др Славко Раденковић). У склопу билатералног пројекта са Републиком Словенијом остварила је кратку посету Универзитету у Марибору, у периоду од 9. до 12. фебруара 2022. године, као и посету у оквиру пројекта са Републиком Кином у периоду од 13. до 21. новембра 2023. године. Члан је пројектног тима „Empowering Chemistry Students to Discover Noncovalent Interactions via the Cambridge Structural Database – CSD4NCI Workshop“ под руководством др Душана Маленова са Хемијског факултета у Београду, који финансира Кембрички центар кристалографских података (CCDC).

Члан је Српског хемијског друштва и Извршног одбора Клуба младих хемичара. Поред матерњег, говори и енглески језик, а служи се и италијанским, француским и немачким језиком.

Б. Библиографија

Др Слађана Ђорђевић се бави научно-истраживачким радом из области теоријске хемије. Предмет њених истраживања је испитивање електронске структуре и магнетних особина молекула. Поред тога, бави се и применом савремених метода теорије валентне везе у анализи природе хемијског везивања. До сада је објавила 25 научних радова у међународним часописима (седам категорије **M21**, дванаест категорије **M22**, три категорије **M23** и три категорије **M24**), као и 3 научна рада у истакнутим националним часописима. Одржала је једно предавање по позиву на међународном скупу, уз још десет саопштења на научним скуповима.

Докторска дисертација (M71)

Др Слађана Ђорђевић
„Теоријско испитивање електронске структуре и магнетних особина кластера бора“
Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Крагујевац, 2024. године
(6 бодова)

Списак научних радова

1. Научни радови објављени у врхунским међународним часописима (M21)

- 1.1. Slavko Radenković, **Sladana Đorđević**, Marijana Nikolendžić
Tuning the HOMO-LUMO gap of polycyclic conjugated molecules using benzo-annulation strategy
Chemical Physics Letters **856** (2024) 141686.
DOI: [10.1016/j.cplett.2024.141686](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2024.141686)
ISSN: 0009-2614
IF = 2,8 за 2023. годину; 9/35: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;
(8 бодова)
- 1.2. Slavko Radenković, **Sladana Đorđević**
Effect of benzo-annulation on magnetically induced current density
Chemical Physics Letters **815** (2023) 140370.
DOI: [10.1016/j.cplett.2023.140370](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2023.140370)
ISSN: 0009-2614
IF = 2,8 за 2023. годину; 9/35: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;

(8 бодова)

- 1.3. **Sladana Đorđević**, Miquel Solà, Slavko Radenković
Aromaticity of Singlet and Triplet Boron Disk-like Clusters: A Test for Electron Counting Aromaticity Rules
Inorganic Chemistry (2022) 61(26) 10116-10125
DOI: [10.1021/acs.inorgchem.2c01197](https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c01197)
ISSN: 0020-1669
IF = 4,6 за 2022. годину; 5/42: област: Chemistry, Inorganic & Nuclear;
(8 бодова)
- 1.4. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Electronic structure, stability, and aromaticity of M_2B_6 (M = Mg, Ca, Sr, and Ba): an interplay between spin pairing and electron delocalization
Physical Chemistry Chemical Physics **24** (2022) 5833-5841.
DOI: [10.1039/D1CP04791D](https://doi.org/10.1039/D1CP04791D)
ISSN: 1463-9076
IF = 3,3 за 2022. годину; 9/35: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;
(8 бодова)
- 1.5. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Spatial and Electronic Structures of BeB_8 and MgB_8 : How far Does the Analogy Go?
ChemPhysChem (2022) 23 e202200070.
DOI: [10.1002/cphc.202200070](https://doi.org/10.1002/cphc.202200070)
ISSN: 1439-4235
IF = 3,102 за 2020. годину; 11/37: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;
(8 бодова)
- 1.6. Slavko Radenković, **Sladana Đorđević**
Relating nucleus independent chemical shifts with integrated current density strengths
Physical Chemistry Chemical Physics **23** (2021) 11240-11250.
DOI: [10.1039/d1cp00784j](https://doi.org/10.1039/d1cp00784j)
ISSN: 1463-9076
IF = 3,945 за 2021. годину; 9/36: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;
(8 бодова)
- 1.7. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Magnetically induced current density in triple-layered beryllium–boron clusters
Physical Chemistry Chemical Physics **21** (2019) 7105-7114.
DOI: [10.1039/C9CP00541B](https://doi.org/10.1039/C9CP00541B)
ISSN: 1463-9076
IF = 3,43 за 2019. годину; 8/37: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;
(8 бодова)

2. Радови објављени у истакнутим међународним часописима (M22):

- 2.1. Francesco F. Summa, Riccardo Zanasi, **Slađana Đorđević**, Slavko Radenković, Guglielmo Monaco
On the unusual global aromaticity of two cyclopenta-ring-fused oligo(m-phenylenes)
ChemPhysChem **25** (2024) e202400342
DOI: [10.1002/cphc.202400342](https://doi.org/10.1002/cphc.202400342)
ISSN: 1439-4235
IF = 2,3 за 2023. годину; 15/35: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;
(5 бодова)
- 2.2. Slavko Radenković, **Slađana Đorđević**
Effect of benzo-annulation on triplet state energies in polycyclic conjugated hydrocarbons
Chemistry A European Journal **30** (2024) e202400361.
DOI: [10.1002/chem.202400361](https://doi.org/10.1002/chem.202400361)
ISSN: 0947-6539
IF = 3,9 за 2023. годину; 68/175: област: Chemistry, Multidisciplinary;
(5 бодова)
- 2.3. Izudin Redžepović, **Slađana Đorđević**, Simon Brezovnik, Niko Tratnik, Petra Žigert Pleteršek, Boris Furtula, Slavko Radenković
Partition of topological indices of benzenoid hydrocarbons into ring contributions
International Journal of Quantum Chemistry (2023) 123, 12, e27108.
DOI: [10.1002/qua.27108](https://doi.org/10.1002/qua.27108)
ISSN: 0020-7608
IF = 2,3 за 2023. годину; 15/35: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;
(5 бодова, нормирано 3,57)
- 2.4. Katarina Postolović, Biljana Ljujić, Marina Miletić Kovačević, **Slađana Đorđević**, Sandra Nikolić, Suzana Živanović, Zorka Stanić
Optimization, characterization, and evaluation of carrageenan/alginate/poloxamer/curcumin hydrogel film as a functional wound dressing material
Materials Today Communications (2022) 31 103528
DOI: [10.1016/j.mtcomm.2022.103528](https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2022.103528)
ISSN: 2352-4928
IF = 3,8 за 2022. годину; 153/344: област Materials Science, Multidisciplinary;
(5 бодова)
- 2.5. **Slađana Đorđević**, Slavko Radenković, Sason Shaik, Benoît Braïda
On the Nature of the Bonding in Coinage Metal Halides
Molecules (2022) 27(2) 490
DOI: [10.3390/molecules27020490](https://doi.org/10.3390/molecules27020490)
ISSN: 1420-3049
IF = 4,6 за 2022. годину; 63/178: Chemistry, Multidisciplinary;
(5 бодова)
- 2.6. Slavko Radenković, Izudin Redžepović, **Slađana Đorđević**, Boris Furtula, Niko Tratnik, Petra Žigert Pleteršek
Relating vibrational energy with Kekulé- and Clar-structure-based parameters

International Journal of Quantum Chemistry (2022) 122, 7, e26867

DOI: [10.1002/qua.26867](https://doi.org/10.1002/qua.26867)

ISSN: 0020-7608

IF = 2,2 за 2022. годину; 20/35: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;
(5 бодова, нормирано 4,17)

- 2.7. Jelena Balović, Dušan Ćočić, **Slađana Đorđević**, Slavko Radenković, Rudi van Eldik, Ralph Puchta
A theoretical mechanistic study of $[K\subset[2.2.2]]^+$ enantiomerization
Journal of Physical Organic Chemistry (2022) 35(2), e4289
DOI: [10.1002/poc.4289](https://doi.org/10.1002/poc.4289)
ISSN: 0894-3230
IF = 2,155 за 2021. годину; 34/57: област: Chemistry, Organic;
(5 бодова, нормирано 4,17)
- 2.8. **Slađana Đorđević**, Slavko Radenković
Singlet and triplet states of the sandwich-type Be_2B_6 and $Be_2B_7^+$ clusters. A test for electron counting rules of aromaticity
New Journal of Chemistry **44** (2020) 19780-19788.
DOI: [10.1039/D0NJ04643D](https://doi.org/10.1039/D0NJ04643D)
ISSN: 1144-0546
IF = 3,591 за 2020. годину; 75/178: област: Chemistry, Multidisciplinary;
(5 бодова)
- 2.9. Marija Antić, **Slađana Đorđević**, Boris Furtula, Slavko Radenković
Magnetically induced current density in nonplanar fully benzenoid hydrocarbons
Journal of Physical Chemistry A **124**, 2 (2020) 371-378.
DOI: [10.1021/acs.jpca.9b10352](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.9b10352)
ISSN: 1089-5639
IF = 2,781 за 2020. годину; 14/37: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;
(5 бодова)
- 2.10. Ivan Gutman, Slavko Radenković, **Slađana Đorđević**, Igor Milovanović, Emina Milovanović,
Extending the McClelland formula for total π -electron energy
Journal of Mathematical Chemistry **55** (2017) 1934-1940.
DOI: [10.1007/s10910-017-0772-6](https://doi.org/10.1007/s10910-017-0772-6)
ISSN: 0259-9791
IF = 1,882 за 2017. годину; 93/171: област: Chemistry, Multidisciplinary;
(5 бодова)
- 2.11. Ivan Gutman, Slavko Radenković, **Slađana Đorđević**, Igor Milovanović, Emina Milovanović
Total π -electron and HOMO energy
Chemical Physics Letters **649** (2016) 148-150.
DOI: [10.1016/j.cplett.2016.02.051](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2016.02.051)
ISSN: 0009-2614
IF = 1,815 за 2016. годину; 18/36: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;

(5 бодова)

- 2.12. Slavko Radenković, Ivan Gutman, **Sladana Đorđević**
Strain in strain-free benzenoid hydrocarbons: The case of phenanthrene
Chemical Physics Letters **625** (2015) 69-72.
DOI: [10.1016/j.cplett.2015.02.039](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2015.02.039)
ISSN: 0009-2614
IF = 1,860 за 2015. годину; 19/35: област: Physics, Atomic, Molecular & Chemical;
(5 бодова)

3. Радови објављени у међународним часописима (M23):

- 3.1. Ralph Puchta, **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković, Haijun Jiao, Nico J. R. Van Eikema Hommes
25 years of NICS -much more than nothing!
Journal of Serbian Chemical Society (2022) 87 (12) 1439-1446
DOI: [10.2298/JSC211203057P%20](https://doi.org/10.2298/JSC211203057P%20)
ISSN: 0352-5139
IF = 1,0 за 2022. годину; 155/178: област: Chemistry, Multidisciplinary;
(3 бода)
- 3.2. Jelena Đurđević Nikolić, **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Heteroatom effects on aromaticity of five-membered rings in acenaphthylene analogs
Journal of Molecular Modeling **26** (2020) 275
DOI: [10.1007/s00894-020-04543-w](https://doi.org/10.1007/s00894-020-04543-w)
ISSN: 1610-2940
IF = 1,810 за 2020. годину; 125/178: област: Chemistry, Multidisciplinary;
(3 бода)
- 3.3. Slavko Radenković, Marija Antić, **Sladana Đorđević**, Benoît Braïda,
 π -electron content of rings in polycyclic conjugated compounds – A valence bond based measure of local aromaticity,
Computational and Theoretical Chemistry **1116** (2017) 163-173.
DOI: [10.1016/j.comptc.2017.01.028](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2017.01.028)
ISSN: 2210-271X
IF = 1,443 за 2017. годину; 111/147: област: Chemistry, Physical;
(3 бода)

4. Радови објављени у националном часопису међународног значаја (M24):

- 4.1. **Sladana Đorđević**, Jovana Rakonjac, Slavko Radenković
Magnetically induced current densities in phenylenes in the ground and lowest lying triplet excited states
Kragujevac Journal of Science **46** (2024) 000-008.
DOI: [10.5937/KgJSci2400014D](https://doi.org/10.5937/KgJSci2400014D)
(2 бода)

- 4.2 **Sladana Đorđević**, Dušan Ćočić, Muntadar A. H. Al-Yassiri, Slavko Radenković, Ralph Puchta
Electronic structure and aromaticity of [12]infinite. A DFT study
Kragujevac Journal of Science **45** (2023) 29-40.
DOI: [10.5937/KgJSci2345029D](https://doi.org/10.5937/KgJSci2345029D)
ISSN: 1450-9636
(2 бода)
- 4.3 **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
The B₂ Structural Motif as a Tool for Modulating Ring Currents in Monocyclic Li Clusters
Chemistry **3** (2021) 1063-1073.
DOI: [10.3390/chemistry3030077](https://doi.org/10.3390/chemistry3030077)
ISSN: 2624-8549
(2 бода)

5. Научни радови објављени у истакнутим националним часописима (M52)

- 5.1. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković, Ralph Puchta, Haijun Jiao, Nico J. R. Van Eikema Hommes
25 godina indeksa aromatičnosti NIKS
Hemijski pregled god. **63** br. 1 (2022) 12-16.
ISSN: 0440-6826
(2 бода, нормирано 1,25)
- 5.2. Svetlana Marković, **Sladana Đorđević**, Izudin Redžepović, Žiko Milanović
Simuliranje hemijskih spektara pomoću softvera za molekulska modeliranje
Hemijski pregled god. **60** br. 4 (2019) 90-95.
ISSN: 0440-6826
(2 бода, нормирано 1,43)
- 5.3. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Vezivanje pomakom naelektrisanja – novi tip hemijske veze
Hemijski pregled god. **59** br. 3 (2018) 8-12.
ISSN: 0440-6826
(2 бода)

6. Предавање по позиву са међународног скупа штампано у изводу (M32)

- 6.1. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Ring currents in *periodo*-hydrocarbons
5th Workshop on Magnetically induced molecular Currents, Chiemsee, Munich, Germany, September 9-13 2024, 32.
doi: <https://doi.org/10.6084/m9.figshare.26490193>
(1,5 бода)

7. Саопштења са међународног скупа штампана у изводу (M34)

- 7.1. Slavko Radenković, **Sladana Đorđević**
Effect of benzo-annulation on local aromaticity: to what extent do different aspects of aromaticity agree?
4th workshop on MAGnetically Induced Currents in molecules – MAGIC 2022, Peterhouse, Cambridge, United Kingdom, 11-15 September 2022. godine
https://magic2022.ch.cam.ac.uk/files/All_abstracts_in_delivery_order.pdf
(0,5 бодова)
- 7.2. **Sladana Đorđević**, Miquel Solà, Slavko Radenković
Disk aromaticity in singlet and triplet boron clusters. A current density point of view
4th workshop on MAGnetically Induced Currents in molecules – MAGIC 2022, Peterhouse, Cambridge, United Kingdom, 11-15 September 2022. godine
https://magic2022.ch.cam.ac.uk/files/All_abstracts_in_delivery_order.pdf
(0,5 бодова)

8. Саопштења са скупова од националног значаја штампана у целини (M63)

- 8.1. Igor Đurović, **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Aromaticity of Roesky's ketone
XXIII Savetovanje o biotehnologiji sa međunarodnim učešćem, Čačak, 9 – 10. mart 2018. godine, 421-426.
ISBN: 978-86-87611-55-9
(1 бод)

9. Саопштења са скупова од националног значаја штампана у изводу (M64)

- 9.1. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Magnetic properties of *periodo*-bicyclic hydrocarbons
Deseta konferencija mladih hemičara Srbije, Beograd, 26. oktobar 2024. godine, 16. TCC OP 04.
ISBN: 978-86-7132-087-0
(0,2 бода)
- 9.2. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Revealing structural dependence of the triplet state excitation energies in conjugated molecules
60. Savetovanje Srpskog hemijskog društva, Niš, 8. i 9. jun 2024. godine, 30. US-2.
ISBN: 978-86-7132-086-3
(0,2 бода)
- 9.3. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Cylindrical aromaticity in ferrocene and its analogues

59. Savetovanje Srpskog hemijskog društva, Novi Sad, 1. i 2. jun 2023. godine, 110. TH-1, US-8.
ISBN: 978-86-7132-081-8

(0,2 бода)

9.4. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Magnetic properties of *altan*-[n]annulenes
Osma konferencija mladih hemičara Srbije, Beograd, 29. oktobar 2022. godine, 19. TC OP 02.
ISBN: 978-86-7132-080-1

(0,2 бода)

9.5. **Sladana Đorđević**, Miquel Solà, Slavko Radenković
Magnetically induced current densities in singlet and triplet disk-like boron clusters
58. Savetovanje Srpskog hemijskog društva, Beograd, 9. i 10. juni 2022. godine, 150. TH-1, US-5.
ISBN: 978-86-7132-079-5

(0,2 бода)

9.6. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Modulating the magnetically induced current density in monocyclic Li clusters
57. Savetovanje Srpskog hemijskog društva, Kragujevac, 18. i 19. juni 2021. godine, 100. TH-U-5.
ISBN: 978-86-7132-077-1

(0,2 бода)

9.7. **Sladana Đorđević**, Slavko Radenković
Valence bond study of intramolecular hydrogen bonding in malonildialdehyde
Šesta konferencija mladih hemičara Srbije, Beograd, 27. oktobar 2018. godine, 107. TH03 PE 2.
ISBN: 978-86-7132-072-6

(0,2 бода)

V. Приказ радова

1. Приказ докторске дисертације

Детаљан приказ резултата из докторске дисертације дат је у оквиру радова под бројевима 1.3, 1.4, 1.5, 1.7 и 2.8.

2. Приказ научних радова

Приказ радова из категорије M21

Рад 1.1. Утицај бензо-анелације на НОМО-LUMO сепарацију испитиван је у серији бензо-деривата антрацена и акридина. Показано је да ангуларна бензо-анелација повећава вредност НОМО-LUMO сепарације, док је линеарна бензо-анелација смањује у поређењу са неанелираним матичним молекулима. Развијен је једноставан квантитативни модел који може прецизно предвидети вредности НОМО-LUMO

сепарације користећи само бројеве ангуларно и линеарно анелираних бензенових прстенова.

Рад 1.2. У овом истраживању испитиван је утицај бензо-анелације на густине магнетно индукованих струја. Густине магнетно индукованих струја су израчунате коришћењем STOCD-DZ методе на B3LYP/6-311G(d,p) нивоу теорије. Утврђено је да бензо-анелација у ангуларној (односно линеарној) позицији у односу на централне прстенове проучаваних деривата антрацена и акридина смањује (односно повећава) интензитет струја π -електрона индукованих око централног прстена. Ове правилности су даље анализирани недавно уведенем PFI методом.

Рад 1.3. Кластери бора су полиедарске структуре које садрже бор и имају јединствене карактеристике и својства. Један од најинтересантнијих облика који кластери бора имају су диск кластери бора. У овим кластерима подела молекулских орбитала је слична оној која је изведена из једноставног модела честице на диску. У овом моделу, молекулске орбитале долазе у паровима осим за $m = 0$. Диск кластери бора у свом основном синглетном стању. Могло би се очекивати да ароматични диск кластери бора у синглетном стању, када приме или ослободе два електрона, такође могу бити ароматични у најнижем триплетном стању. За анализу ароматичног карактера диск кластера бора примењене су густине магнетно индукованих струја и јачине струје дате везе. Наши резултати показују да, са изузетком триплета ${}^3B_{1g}$, диск кластери бора прате Хикелово и Бердово правила ако се узму у обзир различите молекулске орбитале груписане по симетрији. Такође, откривено је да су молекули који су у свом основном стању триплетни молекули ароматични.

Рад 1.4. У претходним истраживањима је показано да је комплекс Be_2B_6 у свом основном стању триплетни молекул кога одликује двострука ароматичност. У овом раду испитана је стабилност, електронска структура и ароматичност хомологне серије M_2B_6 ($M = Mg, Ca, Sr$ и Ba) и упоређена са кластером Be_2B_6 . На CCSD(T)/def2-TZVP//B3LYP/def2-TZVP нивоу теорије утврђено је да су ови молекули стабилнији у синглетном него у триплетном стању. За процену ароматичног карактера проучаваних комплекса коришћене су густине магнетно индукованих струја и мултицентрични делокализациони индекс (MCI). Обе методе указују да су M_2B_6 ($M = Mg, Ca, Sr$ и Ba) π ароматични и σ неароматични у основном синглетном стању, а двоструко ароматични у триплетном стању. Показано је да се правила ароматичности заснована на броју електрона не могу користити за исправно предвиђање ароматичности и релативне стабилности испитиваних молекула у различитим спинским стањима.

Рад 1.5. Бор гради кластере различите геометрије и електронске структуре са Be и Mg, иако се ова два елемента налазе у истој групи. У овом раду показано је да се и BeB_8 и MgB_8 у свом основном синглетном стању граде структуру облика кишобрана. Поред тога, упоређивани су стабилност, електронска структура и ароматичност ових молекула. Густине магнетно индукованих струја показују да су BeB_8 и MgB_8 двоструки ароматични системи: π и σ електрони индукују јаке дијатропне струје. Густине струје индуковане у проучаваним комплексима су веома сличног интензитета, али са различитом просторном дистрибуцијом. Разлике у обрасцима густине струје примењене за BeB_8 и MgB_8 произилазе из саме природе интеракција везивања између атома метала и B_8 фрагмента, што је показано кроз анализу декомпозиције енергије.

Рад 1.6. NICS индекси се најчешће користе у анализи магнетне ароматичности. Густине магнетно индукованих струја, с друге стране, су кључни концепт у дефинисању магнетне ароматичности. Утврђено је да су јачине струја веома користан алат у студијама ароматичности. Постоји широко прихваћена идеја да правилно одабран

индекс заснован на NICS може pružiti информације о јачини и правцу густине струје у испитиваном молекулу. У овом раду је извршено детаљно нумеричко испитивање зависности јачине струја посматране везе и најчешће коришћених NICS индекса за сет од 43 моноциклична ароматична молекула. На основу статистичке анализе података испитивана је корелација између јачине струје везе као и π и σ компоненти, с једне стране, и изотропне NICS ($NICS_{iso}$ и $NICS_{\pi,iso}$) и zz -компоненте NICS тензора ($NICS_{zz}$ и $NICS_{\pi,zz}$), с друге стране. Утврђено је да између јачине струје везе $NICS_{\pi,zz}(1)$ и π -електрона постоји веома добра линеарна корелација. Сасвим изненађујуће, откривено је да $NICS_{iso}(1)$ и $NICS_{zz}(1)$ нису у корелацији са јачином π струја. С друге стране, пронађена је прилично добра линеарна корелација између $NICS_{zz}(1)$ и укупне јачине струје везе.

Рад 1.7. У овом раду су за испитивање ароматичног карактера два Ве-В кластера, $Be_6B_{10}^{2-}$ (1) и $Be_6B_{11}^-$ (2). Густине струје су израчунате помоћу STOCD-DZ методе. У претходним студијама је показано да кластери 1 и 2 имају структуру у којој је централни прстен B_{10}/B_{11} у сендвичу између два Be_3 прстена. Прорачунима густине струја испитиваних Ве-В кластера откривена је њихова двоструко ароматична природа, која произилази из присуства два ортогонална, циклично делокализована електронска подсистема унутар ових молекула. Утврђено је да је образац расподеле густине струје у овим Ве-В кластерима аналоган оном у моноцикличном C_{10} кластеру, који је прототип двоструко ароматичног система. Ова студија је показала да анализа заснована на густини струје пружа много више информација о ароматичној природи проучаваних молекула него она заснована на NICS индексу.

Приказ радова из категорије M22

Рад 2.1. У недавном истраживању објављена је синтеза **8MC** и **10MC**, два хомолога олиго(*m*-фениленских) макроциклична система (*m*MC) спојених циклопентанским прстеном, од којих се сваки понаша као анулен-унутар-анулена (AWA). Ово је био изненађујући резултат, јер је понашање AWA типа ретко. Оба молекула имају делимичан полирадикални карактер, појачан потрагом за обнављањем неког ароматичног карактера бензенских прстенова. Међутим, та рестаурација враћа извесну спрегу између два анулена. Заиста, геометрија и магнетно индуковане струје указују на то да, иако **8MC** има AWA карактер, то није случај са већим **10MC**. Ограничења стратегије дизајна AWA молекула треба узети у обзир у будућим покушајима припреме нових великих коронена.

Рад 2.2. У низу ранијих студија, откривено је да је ефекат бензо-анелације користан алат за подешавање ароматичности у полицикличним конјугованим једињењима. У овом раду проучавана је (анти)ароматичност бензо-анелираних деривата три конјугована угљоводоника (антрацен, флуорантен и бифенилен) у њиховом најнижем синглетном (S_0) и триплетном (T_1) стању помоћу енергетског ефекта (ef), модела хармонијског осцилатора ароматичности (НОМА), мултицентричног делокализационог индекса (MCI), густине магнетно индукованих струја (MICD) и NICS индекса. Показано је да је бензо-анелација ефекат заснован на топологији који се може користити за модификовање енергије T_1 стања ($E(T_1)$). Установљен је квантитативни модел којим може да се прецизно предвиди $E(T_1)$ само на основу броја угаоно, линеарно и геминално анелираних бензенских прстенова. Поред тога, показано је да $E(T_1)$ може бити директно повезан са (анти)ароматичним карактером централног прстена у проучаваним молекулима у њиховом S_0 стању.

Рад 2.3. У овом раду представљена је једноставна метода за партиционисање тополошких индекса равних графова заснованих на bond-additive and atoms-pair-additive у збиру доприноса унутрашњих страна графова. Предложена метода се примењује за декомпозицију неколико тополошких индекса (Винер, хипер-Винер, Трач-Станкевич-Зефиоров, Балабан и Сегедински индекси) у доприносе прстена за серију бензеноидних система. Утврђено је да коришћена шема поделе прстенова даје тачну процену доминантних модова цикличне конјугације у проучаваним бензеноидним угљоводоницима. Стога се предложена метода може користити као алтернатива за индексе ароматичности засноване на квантној хемији, који су знатно рачунарски захтевнији.

Рад 2.4. Куркумин припада групи вишенаменских лекова који могу побољшати процес зарастања рана. У овом раду су припремљени филмови на бази природних полисахарида – к-карагенана и алгината – са додатком синтетичког полимера полуксамера 407 како би се ови носачи користили за инкапсулацију куркумина и даљу примену у зарастању рана. Оптимизован је процес припреме филма (састав филма, однос компоненти и време умрежавања). Куркумин, као модел лека, уграђен је у оптималне филмове. Структура, морфологија, термичка својства и степен кристалности оптималних филмова одређивани су применом инфрацрвене спектроскопије, скенирајуће електронске микроскопије, термогравиметријске анализе и методе дифракције рендгенских зрака. Ослобађање куркумина из филмова *in vitro* је праћено током 24 часа, при чему је постигнуто његово кумулативно ослобађање, са максималном стопом ослобађања од 87,64%. Настанак комплекса на бази карагенана, алгината и полуксамера и интеракција ових комплекса са куркумином проучавани су теоријским моделима, АИМ и NBO анализом. Такође је испитан утицај припремљених филмова на виталност ћелија. Утврђено је да филмови са уграђеним куркумином убрзавају зарастање рана, како у условима *in vitro* тако и *in vivo*, што указује на њихов потенцијал као нових трансдермалних система за зарастање рана.

Рад 2.5. У овом раду анализира се природа хемијске везе у халогенидима метала 11. групе коришћењем *ab initio* теорије валентне везе (VB). Показано је да у овим везама постоји велики карактер везивања са помаком наелектрисања, који води до великог Паулијевог одбијања које настаје из интеракције између везивног пара са *d* орбиталом метала. У халогенидима злата постоји везивање помаком наелектрисања (CSB), у халогенидима бакра јавља се поларно-ковалентна веза, док су халогениди сребра гранични случајеви. Међу различитим халогенима, највећи CSB карактер је пронађен за флуор, који доживљава највећи Паулијев притисак из свог слободног електронског пара. Поред тога, све ове везе показују секундарни, али незанемарљив карактер π -везе, који је такође квантификован у VB прорачунима.

Рад 2.6. За све могуће катакондензоване Кекулеове молекуле који имају четири, пет и шест хексагона, молекулске вибрационе енергије су израчунате у оквиру хармонијске апроксимације на нивоима теорије HF, B3LYP и M06-2X у комбинацији са 6-311G(d,p) базисним скупом. Утврђено је да су добијене енергије вибрација линеарна функција броја Кекулеових структура *K* за скуп изомерних молекула. Коришћењем недавног уведеног генерализованог Жанг-Жанговог полинома, показано је да се молекулске вибрационе енергије могу повезати са параметрима заснованим на Кларовим структурама. Добијене приближне формуле могу прецизно да репродукују вибрационе енергије са просечном апсолутном грешком мањом од 1 kJ mol^{-1} . Поред тога, ове формуле могу пружити додатне детаље о структурној зависности енергија молекулских вибрација.

Рад 2.7. Прорачунами помоћу функционала густине на три различита нивоа теорије (B3LYP/LANL2DZp, B3LYP-GD3/LANL2DZp, и ω B97XD/def2-TZVP) примењени су за конструисање пута енантиомеризације и за рачун енергетске баријере за промену симетрије за различите конформере Лехновог макробцикличног полиетар криптатног комплекса $[K \subset [2.2.2]]^+$. Промене у конформацији испитиваног комплекса разматране су кроз енергетске и геометријске критеријуме, при чему промене у структурама прате тренд енергија активације које забрањују ахиралне путеве. Испитивани криптантанд $[K \subset [2.2.2]] D_3$ симетрије показује енантиомеризацију кроз потпуно хиралну петостепену путању са два локална минимума (C_2 и C_2') и три C_1 прелазна стања која се завршавају у D_3' -симетричном криптандом $[K \subset [2.2.2]]^+$, који је слика у огледалу почетне структуре. Потенцијална ахирална прелазна стања су стационарне тачке вишег реда са минимумом двоструко веће енергије од потпуно хиралне путање. Ова студија недвосмислено објашњава Лехнове NMR податке, који показују флуksiјалност проучаваног комплекса. Добијени резултати су додатно рационализовани помоћу анализе декомпозиције енергије (EDA) и NBO анализом за катјон метала и домаћина у различитим конформацијама.

Рад 2.8. Двоструки ароматични карактер комплекса Be_2B_6 и $Be_2B_7^+$ у њиховим триплетним и синглетним стањима испитан је помоћу густина магнетно индукованих струја, које су израчунате на B3LYP/def2-TZVP нивоу теорије коришћењем STOCD-DZ методе. Проучавани комплекси показују двоструку ароматичност (π ароматичност и σ ароматичност) у својим триплетним стањима. Пронађене ароматичне карактеристике су у складу са предвиђањима заснованим на Хикеловом и Бердовом правилу, која се могу посебно применити за циклично делокализоване електронске подсистеме затворене љуске и отворене љуске у испитиваним молекулима. Коришћењем ових правила заснованих на броју електрона, добијене правилности се могу генерализовати на све комплексе $Be_2B_x^{x-6}$ који имају планарни x -члани прстен бора у сендвичу између два атома Be.

Рад 2.9. Испитивани су ефекти планарности молекула на локалну ароматичност у неколико серија свебензеноидних угљоводоника. Утврђено је да Кларове формуле могу пружити тачне информације о локалној дистрибуцији ароматичности чак и у непланарним свебензеноидним системима. У овом раду испитан је утицај планарности молекула на густине магнетно индукованих струја за исте скупове молекула. Ефекти планарности су рационализовани испитивањем порекла индукованих густина струје кроз виртуелне прелазе између попуњених и празних молекулских орбитала.

Рад 2.10. МекКлејландова формула, заснована на горњој граници $\sqrt{2mn}$ може да репродукује преко 99,5% укупне π -електронске енергије (E_π) конјугованих угљоводоника у којима се налази n атома угљеника и m угљеник-угљеник веза. Недостатак ове формуле су предвиђања исте E_π енергије за изомере. У овом раду приказано је како овај недостатак превазићи кроз проширење МекКлејландове формуле. Помоћу једног од ових проширења, E_π је повезана са енергијом највише попуњене молекулске орбитале, а грешка ове формуле је смањена за више од 50% у односу на стандардну МекКлејландову апроксимацију.

Рад 2.11. У овом истраживању нађена је релација између укупне енергије π -електрона E_π и НОМО енергије $E_{НОМО}$, која важи у оквиру НМО апроксимације. Чини се да је ово прва веза између E_π и $E_{НОМО}$ икада успостављена. Ова формула омогућава много тачнију процену E_π алтернативно конјугованих угљоводоника од оне засноване на МекКлејландовој формули и другим приближним изразима (n, m) типа.

Рад 2.12. Бензеноидни молекули који садрже заливе традиционално се сматрају „strain-free“. Ипак, одбијање између два Н-атома у заливу утиче на дужину угљеник-угљеник веза које се налазе у суседству. Развијена је метода за процену енергије која, у случају фенантрена, износи око 7 kJ mol^{-1} .

Приказ радова из категорије M23

Рад 3.1. Чувени индекс ароматичности NICS (хемијски помак независан од језгра) уведен је пре 25 година. Аутори су искористили ову годишњицу за кратку, и донекле личну ретроспективу употребе овог индекса.

Рад 3.2. У серији деривата N- и P-аценафтилена темељно је поручаван образац цикличне конјугације коришћењем неколико различитих индекса ароматичности: енергетски ефекат (ef), мултицентричне делокализациони индекс (MCI), модел хармонијског осцилатора ароматичности (НОМА) и NICS индекс. Резоновање засновано на Кекулеовим структурама предвиђа да неће бити цикличне конјугације у „празним“ петочланим прстеновима који садрже хетероатоме у проучаваним молекулима. Утврђено је да према вредностима ef, MCI и НОМА на степен цикличне конјугације у петочланим прстеновима снажно утичу број и међусобни распоред хексагоналних прстенова. Поред тога, откривено је да је код неких од испитиваних молекула интензитет цикличне конјугације у „празним“ пентагонима чак јачи од интензитета неких хексагоналних прстенова унутар истог молекула. Добијени резултати побијају оно што би се очекивало на основу „хемијске интуиције“, која је обично снажно укореењена у Кекулеовим структурама.

Рад 3.3. 2004. године Рандић и Балабан су користили Кекулеове структуре за процену садржаја π -електрона (ЕС) у прстеновима у бензеноидним угљоводоницима. У овом раду показано је како *ab initio* прорачуни валентне везе (VB) засновани на скупу Кекулеових структура датог полицикличног конјугованог молекула могу да се користе за добијање тачнијих π -електронских садржаја прстенова (VB-ЕС) као правих израчунатих тежина Кекулеових структура, уместо да се постулира да све Кекулеове структуре имају једнаку тежину као у ЕС формули. У случају бензеноидних угљоводоника вредности VB-ЕС и ЕС су веома блиске. Главна разлика је пронађена за линеарне полиацене, за које, за разлику од ЕС, VB-ЕС вредности предвиђају да су унутрашњи прстенови ароматичнији од терминалних прстенова. Оригинална ЕС метода такође има недостатак што се не може применити на хетероцикличне конјуговане молекуле. Показано је да се VB-ЕС метода може користити за процену локалне ароматичности у аза дериватима нафталена. Израчунате вредности VB-ЕС упоређене су са неколико других индекса ароматичности, и то: енергетским ефектом (ef), индексом хармонског осцилаторног модела ароматичности (НОМА), шестоцентричним делокализационим индексом (SCI) и NICS индексом. Најбоља корелација је пронађена између VB-ЕС и SCI, што имплицира да ова два индекса носе сличне информације о локалној ароматичности.

Приказ радова из категорије M24

Рад 4.1. Густине магнетно индукованих струја у најнижем синглетном и триплетном стању серије молекула фенилена су испитивана на B3LYP/lan12DZ нивоу теорије. Претходна истраживања су показала да фенилени у основном синглетном стању показују струје са супротстављеним карактером: дијатропне струје унутар шесточланих прстенова и паратропне струје унутар четворочланих прстенова. Међутим, у првом побуђеном триплетном стању бифенилена долази до драстичне промене ароматичности у односу на основно стање. У триплетном стању овог молекула јављају се интензивне

дијатропне глобалне струје. У овом раду утврђено је да виши чланови породице фенилена не показују тако драстичне промене у ароматичности у првом побуђеном триплетном стању.

Рад 4.2. Електронска структура и ароматичност молекула [12]инфинитена (**1**) и његово формирање путем Малоријеве реакције проучавани су коришћењем теорије функционалне густине (DFT). Испитана реакција се заснива на поступном процесу циклизације. NICS индекси коришћени су за процену ароматичног карактера хемијских врста укључених у испитиване реакције. Поред тога, NICS-scan, 2D и 3D мултидимензионални скенови магнетне заштите такође су коришћени за испитивање ароматичности **1**. Утврђено је да је формирање **1** ендотермни процес, као резултат супротстављених стабилизационих ефеката ароматичности и дестабилизационих ефеката дисторзије планарности пронађених у молекулима укљученим у разматрану реакцију.

Рад 4.3. Густине магнетно индукованих струја, израчунате STOCD-DZ методом на M06-2X/def2-TZVP нивоу теорије, коришћене су за проучавање ароматичности у Li_3B_2^- и Li_4B_2 . Утврђено је да Li_3/Li_4 прстенови у Li_3B_2^- и Li_4B_2 изузетно подсећају на моноцикличне Li_3^+ и Li_4^{2+} кластере. За разлику од матичних Li_3^+ и Li_4^{2+} система код којих постоје слабе глобалне струје, у кластерима Li_3B_2^- и Li_4B_2 индукују се јаке дијатропне струје. У овом раду је показано како се структурне модификације индуковане увођењем B_2 јединице могу користити за модулацију густине струја у цикличним кластерима литијума.

Г. Цитираност

На основу базе Scopus (дана 11.12.2024.), научни радови др Слађане Ђорђевић цитирани су до сада **124** пута не рачунајући аутоцитате. Хиршов индекс (*h*) кандидаткиње износи 7. Списак цитата дат је у Прилогу.

Д. Квалитет научног рада

1. Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовању и формирању научних кадрова

1.1. Педагошки рад

Др Слађана Ђорђевић запослена је као асистенткиња, те активно учествује у раду са студентима Хемије на Институту за хемију Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу. Ангажована је у настави у извођењу вежби из предмета Физичка хемија 1, Физичка хемија 2, Увод у хемоинформатику, Увод у молекулско моделирање, Молекулско моделирање 1, Молекулско моделирање 2, Питон у хемији, Хемоинформатика. До сада је четири пута награђивана као најбоље оцењени асистент на основу резултата студентске анкете.

1.2. Остале активности

Др Слађана Ђорђевић активно учествује у презентацији и промоцији Природно-математичког факултета у средњим школама. Координаторка је групе ентузијаста који се баве промоцијом хемије као науке па је и редовна учесница „Фестивала науке“, „Ноћи истраживача“, „Ноћи музеја“, „Отворена врата ПМФ-а“ и многих других манифестација и активности. Један је од идејних твораца и извођача представе „Новогодишња хемијска чаролија“. Тренутно је координаторка пројекта „Наука на даскама“ који финансира Центар за промоцију науке.

2. Организација научног рада

Др Слађана Ђорђевић била је ангажована као истраживач приправник од 2018. године на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије под називом „Теорија графова и математичко програмирање са применама у хемији и рачунарству“ (Евиденциони број 174033). Током 2021. изабран је у звање истраживач сарадник, а 2022. године у звање асистента.

Др Слађана Ђорђевић је члан више тимова билатералних пројеката:

- пројекат научно-технолошке сарадње између Републике Србије и Републике Словеније за период 2020-2022: „Graph theoretical approaches to molecular nanostructures“, руководилац са српске стране др Славко Раденковић;
- пројекат научно-технолошке сарадње између Републике Србије и Републике Словеније за период 2020-2022: „Modern trends in chemical graph theory“, руководилац са српске стране др Драган Стевановић;
- Пројекат научно-технолошке сарадње између Републике Србије и Републике Кине за период 2021-2023. године: „Bonding in bioinorganic systems – A valence bond approach“, руководилац са српске стране др Славко Раденковић.

У склопу билатералног пројекта са Републиком Словенијом остварила је кратку посету Универзитету у Марибору, у периоду од 9. до 12. фебруара 2022. године, а у оквиру пројекта са Републиком Кином у периоду од 13. до 21. новембра 2023. године. Члан је пројектног тима „Empowering Chemistry Students to Discover Noncovalent Interactions via the Cambridge Structural Database – CSD4NCI Workshop“ под руководством др Душана Маленова са Хемијског факултета у Београду, који финансира Кембрички центар кристалографских података (CCDC).

3. Активност у научним и научно стручним друштвима

3.1. Рецензије научних радова

Др Слађана Ђорђевић је рецензирала више научних радова за часописе *Computational and theoretical chemistry*, *International Journal of Molecular Sciences*, *Open Chemistry*.

3.2. Активност у научним друштвима

Др Слађана Ђорђевић је дугогодишњи члан Српског хемијског друштва и Клуба младих хемичара Србије. Од децембра 2022. године члан је Извршног одбора Клуба младих хемичара. У претходним годинама, била је активан члан Организационог одбора конференција. Реч је о 57. и 58. Саветовању Српског хемијског друштва и X конференцији Биохемијског друштва Србије. Као знак признања за организацију 57. Саветовања СХД добитница је Захвалнице Српског хемијског друштва.

4. Самосталност кандидата

У научно-истраживачком раду др Слађана Ђорђевић је показала висок степен самосталности током осмишљавања, дизајна, реализације и предлагања решења истраживачких задатака, а затим и у фазама припреме и публикавања резултата. Први је аутор четири рада категорије М21, два рада категорије М22, три рада категорије М24 и два рада категорије М52.

Ђ. Мишљење Комисије

Научни допринос др Слађане Ђорђевић огледа се у изузетно квалитетном и оригиналном теоријском истраживању електронске структуре и магнетних својстава кластера бора. Њена докторска дисертација под насловом "Теоријско испитивање електронске структуре и магнетних особина кластера бора", спроведена под менторством проф. др Славка Раденковића, доноси значајан напредак у разумевању ових сложених наноструктура.

Поред теоријских истраживања у области електронске структуре и магнетних својстава кластера бора, др Слађана Ђорђевић је дала значајан научни допринос у неколико других области хемије. Њена истраживања обухватају проучавање ароматичности и електронских својстава полицикличних конјугованих једињења, тополошких индекса и њихове примене у хемији, као и развој функционалних материјала.

Др Слађана Ђорђевић до сада је објавила седам радова из категорије М21, дванаест радова из категорије М22, три рада из категорије М23, три рада из категорије М24, три рада из категорије М52, једно предавање по позиву на међународној конференцији штампано у изводу М32, два саопштења на међународним научним скуповима штампана у изводу М34, једно саопштење са скупа националног значаја штампано у целини М63 и седам саопштења на националним научним конференцијама штампана у изводу М64. Имајући у виду целокупне научне резултате и досадашње публиковане радове др Слађане Ђорђевић, њену компетентност за избор у звање научни сарадник за научну област хемија карактерише укупна вредност коефицијента М 147,9, док нормирани М коефицијент износи 143,49.

На основу детаљне анализе радова и постигнутих резултата др Слађане Ђорђевић, асистентиње на Институту за хемију Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу, Комисија је закључила да се ради о кандидаткињи која у потпуности испуњава услове за избор у звање научни сарадник.

Ознака групе	Укупан број радова	Вредност индикатора	Укупна вредност (нормирано)
M21	7	8	56
M22	12	5	60 (56,91)
M23	3	3	9
M24	3	2	6 (4,68)
M32	1	1,5	1,5
M34	2	0,5	1
M52	3	2	6
M63	1	1	1
M64	7	0,2	1,4
M70	1	6	6
Укупно			147,9 (143,49)

КРИТЕРИЈУМИ ЗА ИЗБОР У НАУЧНО ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК

Потребан услов	Остварено (нормирано)
Укупно: 16	Укупно: 147,9 (143,49)
$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} \geq 10$	$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} = 132,5 (129,41)$
$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} \geq 5$	$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} = 131 (127,91)$

Е. Закључак

На основу анализе приложене документације, може се закључити да је др Слађана Ђорђевић досадашњим научно-истраживачким радом дала значајан допринос научној области Хемија. Одбранила је докторску дисертацију из уже научне области Физичка хемија и до сада је објавила: седам радова из категорије **M21**, дванаест радова из категорије **M22**, три рада из категорије **M23**, три рада из категорије **M24**, три рада из категорије **M52**, једно предавање по позиву на међународној конференцији штампано у изводу **M32**, два саопштења на међународним научним скуповима штампана у изводу **M34**, једно саопштење са скупа националног значаја штампано у целини **M63** и седам саопштења на националним научним конференцијама штампана у изводу **M64**.

Имајући у виду целокупне научне резултате и досадашње публиковане радове др Слађане Ђорђевић, њену компетентност за избор у звање научни сарадник за научну област хемија карактерише укупна вредност коефицијента **M 147,9** док нормирани **M** коефицијент износи **143,49**. Др Слађана Ђорђевић је показала способност за самостално бављење научноистраживачким радом у области теоријске хемије, сваком проблему приступа савесно и успешно, влада методологијом истраживања која је праћена модерним истраживачким методама. Поред тога, др Слађана Ђорђевић стечено знање преноси на студенте и млађе колеге, будући да је ангажована у извођењу вежби на основним и мастер академским студијама хемије на Природно-математичком факултету.

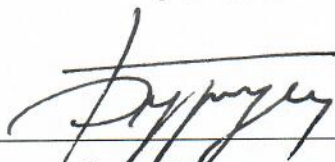
На основу претходно изнетих чињеница, а у складу са Законом о науци и истраживањима („Службени гласник РС”, бр. 49/19) и Правилником о стицању истраживачких и научних звања („Службени гласник РС”, бр. 159/2020 и 14/2023) може се закључити да је др Слађана Ђорђевић испунила све услове за избор у звање научни сарадник за научну област Хемијске науке. Сходно томе, Комисија са задовољством предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу да прихвати предлог за избор кандидаткиње **др Слађане Ђорђевић** у научно звање **научни сарадник** за научну област Хемијске науке и упути га надлежном матичном научном одбору Министарства науке, технолошког развоја и иновација Републике Србије.

У Крагујевцу,
13. 12. 2024. године

КОМИСИЈА



др Славко Раденковић, ванредни професор
Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу
Научна област: Хемијске науке
Ужа научна област: Физичка хемија
- председник Комисије -



др Борис Фуртула, редовни професор
Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу
Научна област: Хемијске науке
Ужа научна област: Физичка хемија



др Душан Маленов, доцент и виши научни сарадник
Универзитет у Београду – Хемијски факултет
Научна област: Хемијске науке
Ужа научна област: Општа и неорганска хемија

Назив факултета који подноси захтев:
Природно-математички факултет
Универзитет у Крагујевцу
Радоја Домановића 12
34000 Крагујевац

РЕЗИМЕ ИЗВЕШТАЈА О КАНДИДАТУ ЗА СТИЦАЊЕ НАУЧНОГ ЗВАЊА

I Општи подаци о кандидату

Име и презиме: **Слађана Ђорђевић**
Година рођења: **04.06.1993.**
ЈМБГ: **0406993919825**

Назив институције у којој је кандидат стално запослен:

Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу

Дипломирао: година: **2017.** факултет: **ПМФ Крагујевац**

Докторирао: година: **2024.** факултет: **ПМФ Крагујевац**

Постојеће научно звање: /

Научно звање које се тражи: **Научни сарадник**

Област науке у којој се тражи звање: **Природно-математичке науке**

Грана науке у којој се тражи звање: **Хемијске науке**

Научна дисциплина у којој се тражи звање: **Физичка хемија**

Назив научног матичног одбора којем се захтев упућује: **Матични одбор за хемију**

II Датум избора-реизбора у научно звање:

Научни сарадник: **Први избор**

Виши научни сарадник:

III Научно-истраживачки резултати (прилог 1 и 2 правилника):

1. Монографије, монографске студије, тематски зборници, лексикографске и картографске публикације међународног значаја (уз доношење на увид) (M10):

	број	вредност	укупни поени/*нормирани поени
M11 =	/		
M12 =	/		
M13 =	/		
M14 =	/		
M15 =	/		
M16 =	/		
M17 =	/		
M18 =	/		

2. Радови објављени у научним часописима међународног значаја, научна критика, уређење часписа (M20):

	број	вредност	укупни поени/*нормирани поени
M21a =	/		
M21 =	7	8	56/*56
M22 =	12	5	60/*56,91
M23 =	3	3	9/*9
M24 =	3	2	6/*4,68
M25 =	/		
M26 =	/		
M27 =	/		
M28a =	/		
M28б =	/		
M29a =	/		
M29б =	/		
M29в =	/		

3. Зборници са међународних научних скупова (M30):

	број	вредност	укупни поени/*нормирани поени
M31 =	/		
M32 =	1	1,5	1,5/*1,5
M33 =	/		
M34 =	2	0,5	1/*1
M35 =	/		
M36 =	/		

4. Монографије националног значаја (M40):

	број	вредност	укупни поени/*нормирани поени
M41 =	/		
M42 =	/		
M43 =	/		
M44 =	/		
M45 =	/		
M46 =	/		
M47 =	/		
M48 =	/		
M49 =	/		

5. Радови у часописи националног значаја (M50):

	број	вредност	укупни поени/*нормирани поени
M51 =	/		
M52 =	3	2	6/*6
M53 =	/		
M54 =	/		
M55 =	/		
M56 =	/		
M57 =	/		

6. Предвања по позиву на скуповим националног значаја (M60):

	број	вредност	укупни поени/*нормирани поени
M61 =	/		
M62 =	/		
M63 =	1	1	1/*1
M64 =	7	0,2	1,4/*1,4
M65 =	/		
M66 =	/		
M67 =	/		
M68 =	/		
M69 =	/		

7. Одбрањена докторска дијертација (M70):

	број	вредност	укупни поени/*нормирани поени
M70 =	1	6	6/*6

8. Техничка и развојна решења (M80)

	број	вредност	укупни поени/*нормирани поени
M81 =	/		
M82 =	/		
M83 =	/		
M84 =	/		
M85 =	/		

9. Патенти, ауторске изложбе, тестови (M90):

	број	вредност	укупни поени/*нормирани поени
M91 =	/		
M92 =	/		
M93 =	/		
M94 =	/		
M95 =	/		
M96 =	/		
M97 =	/		

M98= /
M99= /

IV Квалитативна оцена научног доприноса (прилог 1 правилника):

1. Показатељи успеха у научној раду:

(Награде и признања за научни рад додељене од стране релевантних научних институција и друштава; уводна предавања на научним конференцијама и друга предавања по позиву; чланства у одборима међународних научних конференција; чланства у одборима научних друштава; чланства у уређивачким одборима часописа, уређивање монографија, рецензије научних радова и пројеката)

1.1. Предавање по позиву

Др Слађана Ђорђевић је на конференцији 5th Workshop on Magnetically induced molecular Currents одржаној у септембру 2024. године на језеру Кимзе, у близини Минхена, у Немачкој одржала је предавање по позиву.

1.2. Чланства у одборима научних друштава

Др Слађана Ђорђевић је дугогодишњи члан Српског хемијског друштва и Клуба младих хемичара Србије. Од децембра 2023. године члан је Извршног одбора Клуба младих хемичара.

1.3. Рецензије научних радова

Др Слађана Ђорђевић је рецензирала више научних радова за часописе *Computational and theoretical chemistry*, *International Journal of Molecular Sciences*, *Open Chemistry*.

2. Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовању и формирању научних кадрова:

(Допринос развоју науке у земљи; менторство при изради мастер, магистарских и докторских радова, руковођење специјалистичким радовима; педагошки рад; међународна сарадња; организација научних скупова)

2.1. Допринос развоју науке у земљи

Др Слађана Ђорђевић до сада је објавила седам радова из категорије **M21**, дванаест радова из категорије **M22**, три рада из категорије **M23**, три рада из категорије **M24**, три рада из категорије **M52**, једно предавање по позиву на међународној конференцији штампано у изводу **M32**, два саопштења на међународним научним скуповима штампана у изводу **M34**, једно саопштење са скупова националног значаја штампана у целини **M63** и седам саопштења на националним научним конференцијама штампана у изводу **M64**.

2.2. Педагошки рад

Др Слађана Ђорђевић запослена је као асистент па активно учествује у раду са студентима Хемије на Институту за хемију Природно-математичког факултета

Универзитета у Крагујевцу. Ангажована је у настави, у извођењу вежби из предмета Физичка хемија 1, Физичка хемија 2, Увод у хемоинформатику, Увод у молекулско моделирање, Молекулско моделирање 1, Молекулско моделирање 2, Увод у питон, Хемоинформатика. До сада је четири пута награђивана као најбоље оцењени асистент на основу резултата студентске анкете.

2.3. Међународна сарадња

Др Слађана Ђорђевић је члан више тимова билатералних пројеката: два пројекта са Републиком Словенијом (период 2020-2022) и једног пројекта са Републиком Кином (период 2021-2023). У склопу ових билатералних пројеката остварена је кратка посета Универзитету у Марибору, у периоду од 9. до 12. фебруара 2022 године, и Универзитету у Шиамену у периоду од 13. до 21. новембра 2023. године.

2.4. Организација научних скупова

У претходним годинама, била је активан члан Организационог одбора конференција. Реч је о 57. и 58. Саветовању Српског хемијског друштва и X конференцији Биохемијског друштва Србије. Као знак признања за организацију 57. Саветовања СХД добитница је Захвалнице Српског хемијског друштва.

3. Организација научног рада:

(Руковођење пројектима, потпројектима и задацима; технолошки пројекти, патенти, иновације и резултати примењени у пракси; руковођење научним и стручним друштвима; значајне активности у комисијама и телима Министарства за науку и технолошки развој и телима других министарстава везаних за научну делатност; руковођење научним институтцијама)

3.1. Руковођење пројектним задацима

Др Слађана Ђорђевић била је ангажована као истраживач приправник од 2018. године на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије под називом „Теорија графова и математичко програмирање са применама у хемији и рачунарству” (Евиденциони број 174033). Током 2021. изабрана је у звање истраживач сарадник а након тога исте године у звање асистента. Др Слађана Ђорђевић је члан више тимова билатералних пројеката:

- пројекат научно-технолошке сарадње између Републике Србије и Републике Словеније за период 2020-2022: „Graph theoretical approaches to molecular nanostructures“ руководилац са српске стране др Славко Раденковић;
- пројекат научно-технолошке сарадње између Републике Србије и Републике Словеније за период 2020-2022: „Modern trends in chemical graph theory“ руководилац са српске стране др Драган Стевановић;
- пројекат научно-технолошке сарадње између Републике Србије и Републике Кине за период 2021-2023. године: „Bonding in bioinorganic

systems - A valence bond approach“ руководилац са српске стране др Славко Раденковић.

Члан је пројектног тима др Душана Маленова под називом „Empowering Chemistry Students to Discover Noncovalent Interactions via the Cambridge Structural Database – CSD4NCI Workshop“ који финансира CCDC. Координаторка је пројекта „Наука на даскама“ који финансира Центар за промоцију науке.

4. Квалитет научних резултата:

(Утицајност; параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатових радова; ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора; степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и инхостранству; допринос кандидата реализацији коауторских радова; значај радова)

4.1. Параметри квалитета часописа у којима су радови објављени: значај, утицајност и цитираност радова

У научно-истраживачком раду, др Слађана Ђорђевић је до сада објавила седам радова из категорије **M21**, дванаест радова из категорије **M22**, три рада из категорије **M23**, три рада из категорије **M24**, три рада из категорије **M52**, једно предавање по позиву на међународној конференцији штампано у изводу **M32**, два саопштења на међународним научним скуповима штампана у изводу **M34**, једно саопштење са скупова националног значаја штампана у целини **M63** и седам саопштења на националним научним конференцијама штампана у изводу **M64**. Укупна вредност коефицијента **M** за до сада постигнуте резултате износи **147,9** док нормирани **M** фактор износи **143,49**. Њене научне публикације су цитиране **124** пута, искључујући самоцитате (*h*-индекс **7**, извор: *Scopus*).

4.2. Нормирање броја поена према броју коаутора

Сходно критеријумима Правилника о стицању истраживачких и научних знања, већина радова кандидаткиње др Слађане Ђорђевић не подлежу нормирању. Нормирани су једино радови **2.3**, **2.6** и **2.7** из категорије **M22**, и радови **5.1** и **5.2** из категорије **M52**.

4.3. Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и инхостранству; допринос кандидата реализацији коауторских радова

Др Слађана Ђорђевић показује висок степен самосталности у научно-истраживачком раду. Учествовала је у свим фазама реализације истраживања која су резултовала публикацијама на којима је коаутор. Поред објављених радова, кандидаткиња је учествовала на великом броју научних скупова, на којима је своје резултате углавном представљала у виду усмених саопштења.

V Испуњеност минималних квантитативних захтева за стицање научног звања научни сарадник

Др Слађана Ђорђевић се први пут бира у научно звање **научни сарадник** за област **Хемијске науке**. Приказ минималних захтева за избор у звање научни сарадник дато је у табели, као и број остварених поена кандидаткиње. Из наведених података следи да др Слађана Ђорђевић испуњава све квантитативне услове за избор у звање **научни сарадник**.

Потребан услов	Остварено (нормирано)
Укупно: 16	Укупно: 147,9 (143,49)
$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} \geq 10$	$M_{10}+M_{20}+M_{31}+M_{32}+M_{33}+M_{41}+M_{42} = 132,5 (129,41)$
$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} \geq 5$	$M_{11}+M_{12}+M_{21}+M_{22}+M_{23}+M_{24} = 131 (127,91)$

VI Оцена комисије о научном доприносу кандидата са образложењем

Научни допринос др Слађане Ђорђевић огледа се у изузетно квалитетном и оригиналном теоријском истраживању електронске структуре и магнетних својстава кластера бора. Њена докторска дисертација под насловом "Теоријско испитивање електронске структуре и магнетних особина кластера бора", спроведена под менторством проф. др Славка Раденковића, доноси значајан напредак у разумевању ових сложених наноструктура.

Поред теоријских истраживања у области електронске структуре и магнетних својстава кластера бора, др Слађана Ђорђевић је дала значајан научни допринос у неколико других области хемије. Њена истраживања обухватају проучавање ароматичности и електронских својстава полицикличних конјугованих једињења, тополошких индекса и њихове примене у хемији, као и развој функционалних материјала.

Др Слађана Ђорђевић до сада је објавила седам радова из категорије **M21**, дванаест радова из категорије **M22**, три рада из категорије **M23**, три рада из категорије **M24**, три рада из категорије **M52**, једно предавање по позиву на међународној конференцији штампано у изводу **M32**, два саопштења на међународним научним скуповима штампана у изводу **M34**, једно саопштење са скупова националног значаја штампана у целини **M63** и седам саопштења на националним научним конференцијама штампана у изводу **M64**. Имајући у виду целокупне научне резултате и досадашње публиковане радове др Слађане Ђорђевић, њену компетентност за избор у звање **научни сарадник** за научну област Хемијске науке карактерише укупна вредност коефицијента **M 147,9** док нормирани **M** фактор износи **143,49**.

На основу детаљне анализе радова и постигнутих резултата др Слађане Ђорђевић, асистентиње на Институту за хемију Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу, Комисија је закључила да се ради о кандидаткињи која у потпуности испуњава услове за избор у звање научни сарадник.

Ознака групе	Укупан број радова	Вредност индикатора	Укупна вредност (нормирано)
M21	7	8	56
M22	12	5	60 (56,91)
M23	3	3	9
M24	3	2	6 (4,68)
M32	1	1,5	1,5
M34	2	0,5	1
M52	3	2	6
M63	1	1	1
M64	7	0,2	1,4
M70	1	6	6
Укупно			147,9 (143,49)

VII Закључак

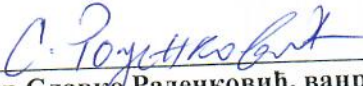
На основу анализе приложене документације, може се закључити да је др Слађана Ђорђевић досадашњим научно-истраживачким радом дала значајан допринос научној области Хемија. Одбранила је докторску дисертацију из уже научне области Физичка хемија и до сада је објавила: седам радова из категорије **M21**, дванаест радова из категорије **M22**, три рада из категорије **M23**, три рада из категорије **M24**, три рада из категорије **M52**, једно предавање по позиву на међународној конференцији штампано у изводу **M32**, два саопштења на међународним научним скуповима штампана у изводу **M34**, једно саопштење са скупова националног значаја штампана у целини **M63** и седам саопштења на националним научним конференцијама штампана у изводу **M64**.

Имајући у виду целокупне научне резултате и досадашње публиковане радове др Слађане Ђорђевић, њену компетентност за избор у звање **научни сарадник** за научну област Хемијске науке карактерише укупна вредност коефицијента **M 147,9** док нормирани **M** фактор износи **143,49**. Др Слађана Ђорђевић је показала способност за самостално бављење научноистраживачким радом у области теоријске хемије, сваком проблему приступа савесно и успешно, влада методологијом истраживања која је праћена модерним истраживачким методама. Поред тога, др Слађана Ђорђевић стечено знање преноси на студенте и млађе колеге, будући да је ангажована у извођењу вежби на Основним и Мастер академским студијама хемије на Природно-математичком факултету.

На основу претходно изнетих чињеница, а у складу са Законом о науци и истраживањима („Службени гласник РС”, бр. 49/19) и Правилником о стицању истраживачких и научних звања („Службени гласник РС”, бр. 159/2020 и 14/2023) може се закључити да је др Слађана Ђорђевић, испунила све услове за избор у звање **научни сарадник** за научну област **Хемијске науке**. Сходно томе, Комисија са задовољством предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу да прихвати предлог за избор кандидаткиња др Слађане Ђорђевић у научно звање **научни сарадник** за научну област **Хемијске науке** и упути га надлежној комисији Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије.

У Крагујевцу,
13.12.2024. године

Председник Комисије


др Славко Раденковић, ванредни професор
Природно-математички факултет
Универзитет у Крагујевцу
Научна област: Хемијске науке
Ужа научна област: Физичка хемија