

Испитнији сајасан
Марина Ђендић

УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

МВРБО 29.11.2017.

НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКОГ
ФАКУЛТЕТА У КРАГУЈЕВЦУ

На седници Наставно-научног већа Природно-математичког факултета у Крагујевцу одржаној **25.10.2017.** године (одлука број: 770/XIII-2) одређени смо у Комисију за писање извештаја о испуњености услова др Марине Ђендић за стицање звања *научни сарадник*, за научну област Хемија. На основу приложене документације о научно-истраживачком раду кандидата, сагласно критеријумима за стицање научних звања, утврђеним *Правилником о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научно-истраживачких резултата истраживача* надлежног Министарства, а у складу са *Законом о научноистраживачкој делатности* („Службени гласник РС”, бр. 110/05 и 50/06-исправка), подносимо Наставно-научном већу следећи

ИЗВЕШТАЈ

A. Биографски подаци

Марина Ђендић рођена је 04. 03. 1985. године у Крагујевцу. Основну школу и средњу Прву техничку завршила је у Крагујевцу. На Природно-математички факултет у Крагујевцу, група Хемија, смер заштита животне средине, уписала се 2004/05. године, где је и дипломирала, октобра 2008. године, са просечном оценом 9.09. Дипломски рад под називом *“Синтеза и карактеризација комплекса бакра(II) са несиметричним пентадентатним диамино-трикарбоксилатним лигандима едза-типа”* одбранила је октобра 2008. године код професора др Зорана Д. Матовића са оценом 10. Докторске студије, смер Неорганска хемија, на Природно-математичком факултету у Крагујевцу уписала је школске 2008/09. У периоду од јануара до марта 2012. године Марина Ђендић боравила је на Универзитету у Варику у Великој Британији у групи професора Роберт Дита. Докторску дисертацију под насловом *„Хелатационе особине лиганада ЕДТА-типа у односу на бакар(II) - могућа примена код неуротоксичних поремећаја”* одбранила је 07.07.2017. године на Природно-математичком факултету у Крагујевцу.

Као одличан студент, од јануара 2009. године била је стипендиста Министарства за науку и технолошки развој Републике Србије, а по истом основу од 2011. године има статус запосленог на Природно-математичком факултету у Крагујевцу уз финансирање из Фонда финансирања најбољих студената за остваривање задатака на пројектима Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије. Изабрана је у звање истраживач-приправник (Одлука бр. 250/V-1) 08. априла 2009. године, а (Одлука бр. 50/VI-4) 17. јануара 2013. године у звање истраживач-сарадник на Природно-математичком факултету у

Крагујевцу. У звање истраживач-сарадник на Природно-математичком факултету у Крагујевцу је реизабрана 09. марта 2016. године (Одлука бр. 280/VIII-1). Ангажована је на пројекту ИИИ 41010 који финансира Министарство науке од 01. 01. 2011. као истраживач-сарадник на пројекту Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије (НИО-Природно-математички факултет, Крагујевац):

- a. Пројекат бр. 142013 „БИОАКТИВНИ КОМПЛЕКСИ Р И Д ЈОНА МЕТАЛА СА ЛИГАНДИМА ФАРМАКОТЕРАПИЈСКОГ ЗНАЧАЈА” (период ангажовања 2008-2011; руководилац проф. др Предраг Ђурђевић).
- б. Пројекат бр. ИИИ41010 „ПРЕКЛИНИЧКА ИСПИТИВАЊА БИОАКТИВНИХ СУПСТАНЦИ” (период ангажовања 2011-; руководилац др Снежана Марковић).

У звање асистента на Природно-математичком факултету у Крагујевцу изабрана је 01.06.2017. године.

До сада је објавила пет научних радова у познатим часописима међународног значаја (два рада из категорије M21 и три рада из категорије M22) и по четири саопштења на међународним и националним научним конференцијама штампаним у изводу (M34 и M64).

Др Марина Ђендић активно учествује у раду са студентима и до сада је водила вежбе из предмета Општа хемија, Основи хемије, Индустриски загађивачи и Норме у заштити животне средине на основним студијама хемије и биологије у Институту за хемију, Природно-математичког факултета у Крагујевцу. Такође, ангажована је на вежбама из предмета Методе санације хемијских акцидената и Опасне материје и управљање опасним отпадом на мастер студијама хемије.

Б. Библиографија

Др Марина Ђендић се активно бави научно-истраживачким радом у области бионеорганске хемије. Предмет њених истраживања јесу: испитивање структурних карактеристика синтетисаних АПК киселина и аналогних комплекса бакра(II) најсавременијим експерименталним и теоријским методама. Испитивања АПК хелатирајућих лиганада са N₂O₄ хромофором и аналогних комплекса бакра(II), испитивање интеракције АПК киселина са протеинима као и испитивање *in vitro/in vivo* активности АПК киселина. Овај део истраживања ће помоћи у бољем разумевању интеракција између АПК хелата и бакра(II) као конституента биолошки значајних молекула у циљу њихове примене у лечењу неуролошких болести.

1. Докторска дисертација (М71)

Марина Ђендић „Хелатационе особине лиганада ЕДТА-типа у односу на бакар(II) - могућа примена код неуротоксичних поремећаја ”

Природно-математички факултет, Универзитет у Крагујевцу, Крагујевац, 2017.

2. Списак научних радова

2.1. Научни радови публиковани у врхунским часописима међународног значаја (M21):

- 2.1.1.** Zoran D. Matović, Vesna D. Miletić, **Marina Ćendić**, Auke Meetsma, Petra J. van Koningsbruggen, Robert J. Deeth "Synthetic, Crystallographic and Computational Study of Copper(II) Complexes of Ethylenediaminetetracarboxylate Ligands" *Inorganic Chemistry*, 52 (3), 1238-1247 (2013) ISSN: 0020-1669
- 2.1.2.** Marina Ćendić, Zoran D. Matović and Robert J. Deeth "Molecular Modeling for Cu(II)-Aminopolycarboxylate Complexes: Structures, Conformational Energies and Ligand Binding Affinities" *Journal of Computational Chemistry*, 34 (31), 2687–2696 (2013) Online ISSN: 1096-987X

2.2. Научни радови објављени у међународним часописима (M22):

- 2.2.1.** Marina Ćendić, Robert J. Deeth, Auke Meetsma, Eugenio Garribba, Daniele Sanna, Zoran D. Matović "Chelating properties of EDTA-type ligands containing six-membered backbone ring toward copper ion: Structure, EPR and TD-DFT evaluation" *Polyhedron*, 124, 215-228 (2017) ISSN: 0277-5387
- 2.2.2.** Svetlana Belošević, Marina Ćendić, Zoran D. Matović, Auke Meetsma "Crystal structure, configurational and DFT-NEDA analysis of nickel(II) complexes with pentadentate ed3a-type ligands" *Polyhedron*, 50, 473-480 (2013) ISSN: 0277-5387
- 2.2.3.** Svetlana Belošević, Marina Ćendić, Maja Đukić, Miorad Vasojević, Auke Meetsma, Zoran D. Matović "Crystal structure, configurational and density functional theory analysis of nickel(II) complexes with pentadentate 1,3-pd3a-type ligands" *Inorganica Chimica Acta*, 399, 146-153 (2013) ISSN: 0020-1693

3. Списак научних саопштења на међународним и националним конференцијама

3.1. Саопштења на међународним научним конференцијама штампана у изводу (M34):

3.1.1. Z.D. Matović, V.D. Miletić, E.M. Mrkalić, **M.S. Ćendić**, G. Bogdanović, V. Kojić

"Molecular Modeling, Structure and Antitumor Activity of Pd(II) complexes with carboxylate derivates of oxalic and malonic acid diamides"

10th European Biological Inorganic Chemistry Conference, 2010, Thessaloniki, Greece, p51 (Poster presentation PO-167)

3.1.2. Žižić J, Ćurčić M, Obradović A, Mrkalić E, Matović Z, **Ćendić M**, Djurdjević P, Živić D, Marković S.

"Evaluation of antiproliferative activity of new palladium complexes and mechanism of cell death on HCT-116 and MDA-MB-231 cell lines"

Scientific Conference with International Participation "Preclinical Testing of Active Substances and Cancer Research", Kragujevac 2011, p13. ISBN 978-86-7760-064-8

3.1.3. Zoran D. Matović, **Marina S. Ćendić**, Maja B. Đukić, Svetlana K. Belošević, Auke Meetsma, Petra J. van Koningsbruggen

"Synthesis and characterization of Nickel(II) complex with unsymmetrical pentadentate, H₃pd3a ligand"

FIRST INTERNATIONAL CONFERENCE OF YOUNG CHEMISTS OF SERBIA, 2012, Belgrade, Serbia, p56 ISBN 978-86-7132-050-4

3.1.4. **Marina Ćendić**, Maja B. Đukić, Emina M. Mrkalić, Marija S. Jeremić, Zoran D. Matović

"Upravljanje komunalnim i industrijskim otpadom na teritoriji grada Kragujevca"

THE 6TH SYMPOSIUM CHEMISTRY AND ENVIRONMENTAL PROTECTION – ENVIROCHEM 2013 Vršac, Serbia

3.2. Саопштења на националним научним конференцијама штампана у изводу (М64):

3.2.1. **Marina Ćendić**, Emina Mrkalić, dr Zoran Matović, mr Vesna Matović, dr Vesna Miletić, "Globalno zagrevanje i lokalni ekološki akcioni plan grada Kragujevca",

5. Nacionalna konferencija o kvalitetu života, 2010, Kragujevac

3.2.2. Matović, V. Miletić, **M. Ćendić**, E. Mrkalić, P. van Koningsbruggen, A. Meetsma, "Structure and DFT analyse of complex $[Ni(H_2O)_6][Ni(ed3a)(H_2O)]_2 \cdot 2H_2O$ ",

XVII Konferencija srpskog kristalografskog društva, 2010, Ivanjica

3.2.3. M. B. Đukić^a, **M. Ćendić^a**, Z. D. Matović^a, S. K. Belošević^b, O. Klisurić^c

"CRYSTAL STRUCTURE AND ANALYSIS OF COMPLEX TRANS(O₆)
[Ba(H₂O)₄][Ni(pddadp)]·4H₂O"

21st CONFERENCE OF THE SERBIAN CRYSTALLOGRAPHIC SOCIETY, 2014.
Užice, Serbia

3.2.4. M. B. Đukić^a, **M. Ćendić^a**, Z. D. Matović^a, O. Klisurić^b

"SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND CRYSTAL STRUCTURE OF
COMPLEX [Ru(η^6 -*p*-cymene)Cl₂(5-MAPyCN-ITZ)]·H₂O"

XXII Конференција СКД – 22nd Conference of the SCS, 2015. Smederevo, Serbia

В. Приказ радова

1. Приказ докторске дисертације

У оквиру ове дисертације синтетисани су и охарактерисани комплекси бакра(II) са АПК киселинама. Извршена је њихова структурна карактеризација као и интеракције АПК лиганада са биолошки значајним молекулима попут Atox1 као и биолошка испитивања *u in vivo* и *in vitro* условима и коначно, на основу експерименталног и теоријског рада предложен је

механизам дејства АПК киселина. Добијени резултати су приказани следећим редоследом: У оквиру ове дисертације синтетисани су лиганди АПК типа (Е-АПК и П-АПК типа N2O4 хромофоре) као и одговарајући комплекси бакра(II). Структуре два комплекса $\text{Ba}[\text{Cu}(1,3\text{-pd3ap})\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и $\text{Ba}[\text{Cu}(1,3\text{-pddadp})\cdot 8\text{H}_2\text{O}$ потврђене су рендгенском структурном анализом. Комплекс $\text{Ba}[\text{Cu}(1,3\text{-pd3ap})\cdot 6\text{H}_2\text{O}$ кристалише као пентакоординован и поседује тригонално бипирамидалну геометрију док $\text{Ba}[\text{Cu}(1,3\text{-pddadp})\cdot 8\text{H}_2\text{O}$ комплекс поседује октаедарску *trans*(O_6) геометрију. Очекивано IR, UV и EPR спектри награђених комплекса су у складу са рендгенском верификацијом. У овом раду показано је да су симетрични хелати са мешовитим карбоксилатним ланцима (H_4eddadp и $\text{H}_4\text{1,3-pddadp}$) бољи за октаедарску координацију бакарног јона. На овај начин они значајно редукују могућност образовања тернарних комплекса. Ово својство заједно са високим $[\text{CuL}]^{2-}$ константама стабилности чине их добним кандидатима за селективне хелатирајуће лекове против акумулације бакра у ћелијама цитоплазме или крвне плавме живих организама. Показано је да различити катјони могу утицати на различито понашање образованих комплекса. Присуство двовалентних катјона (Ba^{2+}) доводи до образовања мање растворних $[\text{CuL}]^{2-}$ агрегата супротно од једновалентних катјона (Na^+) који теже више ка растворљивијим облицима. Апсорpcionи, инфра-црвени и EPR спектри $[\text{CuL}]^{n-}$ комплекса представљају карактеристичне особине и овде су икоришћени за њихову идентификацију. Нађено је да се апсорpcionи спектар може лако моделирати и предвидети коришћењем компјутерске хемије. Ова чињеница је заузврат дала могућност да се прати моделирање реакција биолошких система описујући хелат-бакар-субстратни систем. Да би се конструисала боља зависност структура/активност везе и тако дизајнирала побољшана једињења у овом раду развијен је брз, емпиријски молекулско-механички приступ. С обзиром на јаку Jahn-Teller-ову дисторзију типичну за d^9 Cu(II) комплексе, конвенционални MM метод је неадекватан. Јаки d електронски ефекти се морају експлицитно узети у обзир што се постиже комбиновањем MM-а са генералним, третманом стабилизационе енергије лигандног поља повезане са електронима отворене d љуске. LFMM је успешно примењен на низ проблема у координационој, бионеорганској и чак органометалној хемији и овде је проширен за Cu-АПК системе. Поље сила је параметризовано коришћењем излазних документа DFT-оптимизованих структура за CuN_2O_4 координациону средину. Укључивање COSMO-а значи да резултујући LFMM параметри потпуно укључују изотропску солватациону корекцију. Добијени резултати су типични за 4+2 тетрагонално издужене структуре али пентакоординовани комплекси показују веће варијације. Релативне LFMM енергетске разлике и експерименталне $\log\beta$ вредности за испитивану серију лиганада су добре. Израчуната енергија везивања очигледно опада како се број пропионских прстенова повећава указујући на чињеницу да су петочлани хелатни прстенови погоднији у односу на шесточлане. Испитивањем LFMM FF у случају АПК киселина и сродних система урађен је у циљу

истраживања афинитета везивања лиганада за бакар чиме се могу предложити потенцијални кандидати у третману неуротоксичних поремећаја. Ова дисертација обухватила је редистрибуцију бакра у албино експерименталним животињама од стране неколико АПК хелата: H₄1,2-pdta, H₄1,3-pdta, H₄eddadp и H₄1,3-pddadp. Киселине H₄1,2-pdta и H₄1,3-pdta показују добру електрохемијску стабилност. Спектрофотометријске студије су показале да су K_D константе тернарних бакарних комплекса у добром складу у односу на K_D константе макромолекула које имају добар афинитет према бакру(I). Међутим, константе стабилности зависе од екстра- и интра-ћелијског окружења. Ово значи да се високе K_d вредности у случају АПК хелата, вероватно не би могле очекивати у живом организму. Биолошка активност ових јединења у *in vitro* условима испитана је применом МТТ теста цитотоксичности на РВМNC и MRC-5 ћелијским линијама. Експериментално добијени *in vitro* резултати су у сагласности са теоријским и указују да АПК киселине не показују цитотоксичност. За *in vivo* услове коришћени су Wistar албино *rattus*-и. Експерименти *in vivo* су укључили: а) одређивање трансаминаза у серуму; б) процена СР концентрације у серуму и јетри; с) одређивање бакра, гвожђа, цинка и других концентрација метала у јетри. На основу резултата, могу се разликовати две групе хелата: 1) H₄1,2-pdta и H₄1,3-pdta лиганди који вероватно представљају конкуретне хелатирајуће агенсе у клиничкој терапији неуротоксичних поремећаја; 2) H₄eddadp и H₄1,3-pddadp лиганди који показују високу селективност према бакру али узрокују нагомилавање бакра у јетри и са фармаколошке стране могли би се користити као додаци постојећим лековима (ДПА и Триен) поспешујући хелатацију бакра. У циљу коначног дефинисања механизма дејства синтетисаних комплекса бакра(II) примењене су рачунарске симулационе методе, докинг симулација и молекулска динамика. Теоријским експериментима молекулске динамике на системима који поред испитиваних хелата садрже и добро познати Hah1 транспортер бакра (у различитим конформационим и структурним облицима) потврђено је да изражени афинитет према бакру поседују хелати са мешовитим карбоксилатним прстеновима. Коришћењем исте компјутерске методологије показано је такође да у одређеном смислу токсичност симетричних хелата са мешовитим прстеновима може бити узрокована водоничним везама између хелата и нарочитих амино-киселинских остатака (Thr59) које доводе до конформационих промена Lys60 одговорног за иницијализацију трансфера бакра унутар ћелијског садржаја.

2. Приказ научних радова

2.1. Приказ радова из категорије M21

Рад 2.1.1. Бакар (II) комплекси хексадентатних edta киселина H_4eda3p и $H_4eddadp$ (H_4eda3p = етилендиамин- N,N' -ацетатна- N,N' -три-3-пропионска киселина; $H_4eddadp$ = етилендиамин- N,N' -диацетатна- N,N' -ди-3-пропионска киселина) су синтетисани. Октаедарска $trans(O_6)$ геометрија (два пропионска лиганда су у аксијалном положају) је верификована кристалографски за $Ba[Cu(eda3p)] \cdot 8H_2O$ комплекс, док је за комплекс $Ba[Cu(eddadp)] \cdot 8H_2O$ усвојена $trans(O_5)$ геометрија (два аксијална ацетатна прстена) на основу израчунавања теорије функционала густине и поређења IR и UV-vis спектралних података. Експериментални и компјутерски структурни подаци који су у корелацији са бакар(II) хелатним комплексима су узети ради бољег разумевања изомеризма и одступања од регуларне октаедарске геометрије. У равни O-Cu-N хелатни углови показују најмању девијацију од идеалне октаедарске вредности 90° , и иако је најмање напрезање, за eddadp комплекс са два екваторијална β -пропионска прстена. Линеарна зависност између тетрагоналности и броја петочланих хелатних прстенова је утврђена. Такође је приказана и NBO анализа за серију комплекса.

Рад 2.1.2. Молекулска механика лигандиног поља (LFMM) поље силе (FF) је развијена за d^9 бакар(II) комплексе аминополикарбоксилатних лиганада. Радни сет је добијен теоријом функционала густине (DFT) геометријских оптимизација 14 комплекса који обухвата потенцијалне хексадентатне N_2O_4 , тетрасупституисане етандиаминске (ed), и пропандиамиске прстенове са комбинацијама ацетатних и пропионских ланаца. FF је валидиран за 13 експерименталних рендгенских структура укључујући хексадентатне N_2O_4 доноре где су азотни донори cis и bis-тридентанти ONO лиганди који генерише комплексе са $trans$ азотним донорима. Стохастичка конформациона истраживања за $[Cu\{ed(acetate)_n(propionate)_{4-n}\}]^{(2-)}$, $n = 0-4$, су урађена и конформери најнижих енергијасу реоптимизовани DFT-јем. У сваком случају, оба DFT и LFMM предвиђају исти енергетски најнижи конформер и структуре и енергије енергетски виших конформера су у задовољавајућем складу. Релативне интеракционе енергије за $n = 0, 2$, и 4 израчунате молекулском механиком су у корелацији са експерименталним $\log \beta$ везујућим афинитетима. Предвиђене $\log \beta$ вредности за $n = 1$ и 3 сугеришу за овај сет комплекса опадање $\log \beta$ како број пропионских прстенова расте.

2.2. Приказ радова из категорије M22

Рад 2.2.1. Пентадентанти лиганди O–O–N–N–O-типа H₃ed3a, H₃1,2-pd3a, H₃eda2p и H₃ed3p (H₃ed3a = етилендиамин-N,N,N'-тристирћетна киселина; H₃1,2-pd3a = 1,2-пропандиамин-N,N,N'- трисирћетна киселина; H₃eda2p = етилендиамин-N-ацетато-N,N'-ди-3-пропиоснка киселина и H₃ed3p = етилендиамин-N,N,N'-три-3-пропионска киселина) и одговарајући нови никал(II) комплекси су синтетисани и охарактерисани. H₃ed3a, H₃1,2-pd3a, H₃eda2p и H₃ed3p лиганди се координују за никал(II) јон преко пет донорских атома (три депротонована карбоксилатна атома и два аминска азота) фаворизујући октаедарску геометрију у свим случајевима Ni(II) комплекса. Шесто место у октаедру заузима молекул воде. Шестокоординована октаедарска геометрија, је верификована кристалографски за [Ni(H₂O)₆][Ni(ed3a)(H₂O)]₂·2H₂O комплекс. Структурни подаци који су у корелацији са сличним хелатним Ni(II) комплексима су приказани са циљем детаљне конфигурационе анализе. Инфрацрвени и електронски апсорpcionи спектри комплекса су дискутовани у поређењу са сродним комплексима познатих геометрија. Молекулска механика и теорија функционала густине (DFT) су коришћене ради моделирања најстабилнијег геометријског изомера. Резултати DFT израчунавања су упоређени са X-рендгенским подацима. Природна енергетска декомпозициона анализа (NEDA) је урађена за LNi···OH₂ јединицу.

Рад 2.2.2. Пентадентанти лиганди O–O–N–N–O-типа H₃1,3-pd3a и H₃1,3-pd2ap (H₃1,3-pd3a = 1,3-пропандиамин-N,N,N'-тристирћетне киселине; H₃1,3-pd2ap = 1,3-пропандиамин-N,N'-дисирћетна-N-3-пропионска киселина) и нови одговарајући никал(II) комплекси су синтетисани и охарактерисани. H₃1,3-pd3a и H₃1,3-pd2ap лиганди координују за никал(II) јон преко пет донорских атома (три депротонована карбоксилатна атома и два аминска азота) фаворизујући октаедарску геометрију у свим случајевима Ni(II) комплекса. Шесто место у октаедру заузима молекул воде. А Шестокоординована октаедарска геометрија, је верификована кристалографски за K[Ni(1,3-pd3a)(H₂O)]·3H₂O комплекс. Структурни подаци који су у корелацији са сличним хелатним Ni(II) комплексима су приказани са циљем детаљне конфигурационе анализе. Инфрацрвени и електронски апсорpcionи спектри комплекса су дискутовани у поређењу са сродним комплексима познатих геометрија. Молекулска механика и теорија функционала густине (DFT) су коришћене ради моделирања најстабилнијег геометријског изомера. Резултати DFT израчунавања су упоређени са X-рендгенским подацима. Природна енергетска декомпозициона анализа (NEDA) је урађена за LNi···OH₂ јединицу.

Рад 2.2.3. Лиганди P-APC (EDTA-лиганди аминополикарбоксилатног типа са 1,3-пропандиаминским прстеном) H₄pdta, H₄pd3ap, H₄pddadp и H₄pdtp (H₄pdta = 1,3-пропандиамин-N,N,N',N'-тетрасирћетна киселина; H₄pd3ap = 1,3-пропандиамин-N,N,N'-трисирћетна-N'-3-пропионска киселина; H₄pddadp = 1,3-пропандиамин-N,N'-дисирћетна-N,N'-ди-3-пропионска киселина; H₄pdtp = 1,3-пропандиаминтетра-3-пропионска киселина) су испитивани. Хелатни лиганди координују бакар(II) преко пет или шест донорских атома фаворизујући дисторговану тригонално-бипирамидалне и октаедарске структуре које су верификоване рендгенском структурном анализом за Ba[Cu(pd3ap)]·6H₂O (1) и *trans*(O₆)-Ba[Cu(pddadp)]·8H₂O (2) комплексе. Утицај контра јона код P-APC комплекса је детаљно приказана заједно са анализама других структурних параметара. EPR спектрални резултати пентакоординацију комплекса 1 и хексакоординацију комплекса 2 у воденом раствору, чак и неколико Cu(II) врста са различитим степеном протонације зависе од вредности pH, и указују на то да је хексакоординована структура фаворизована када су два аксијална COO⁻ донора петочлани хелатни прстенови. Такође су приказани резултати молекулско механичких (LFMM) израчунавања која се заснивају на претходно развијеном пољу сile заједно са резултатима DFT-а (Теорија функционала густине). На основу обимних DFT и TD-DFT израчунавања B1LYP/6-311++G(d,p) показано је да су те методе тачне у израчунавању и предвиђању UV-Vis спектара у случају бакар-P-APC једињења.

Г. Цитирањост

Према бази Science Citation Index 4 рада др Марине Ђендић цитирана су 16 пута у међународним часописима (не рачунајући аутоцитате, извор ISI Web of Knowledge).

Списак цитата:

Рад 2.1.1. Zoran D. Matović, Vesna D. Miletić, **Marina Ćendić**, Auke Meetsma, Petra J. van Koningsbruggen, Robert J. Deeth "Synthetic, Crystallographic and Computational Study of Copper(II) Complexes of Ethylenediaminetetracarboxylate Ligands" *Inorganic Chemistry*, 52 (3), 1238-1247 (2013) ISSN: 0020-1669, M21, if = 4.60

Цитиран је у:

1. Srećko R. Trifunović, Vesna D. Miletić, Verica V. Jevtić, Zoran D. Matović, "Nickel(II) in chelate N₂O₂ environment. DFT approach and in-depth molecular orbital and configurational analysis" *Dalton Transactions* **42**, 13357-13368 (2013).
2. Małgorzata J. Gajewska, Wei-Min Ching, Yuh-Sheng Wen, Chen-Hsiung Hung "Synthesis, structure, and catecholase activity of bispyrazolylacetate copper(II) complexes" *Dalton Transactions* **43**, 14726-14736 (2014).

3. Ahmet Karadağ, Ali Aydin Süreyya Dede, Şaban Tekin, Yusuf Yanar, Bilge Hilal Çadırcı, Mustafa Serkan Soylu, Ömer Andaç "Five Novel Dicyanidoaurate(I)-Based Complexes Exhibiting Significant Biological activities: Synthesis, Characterization and Three Crystal Structures" New Journal of Chemistry **39**, 8136-8152 (2015).
4. Sebastian Köhling, Georg Künze, Katharina Lemmnitzer, Dr. Marcel Bermudez, Prof. Dr. Gerhard Wolber, Dr. Jürgen Schiller, Prof. Dr. Daniel Huster, Prof. Dr. Jörg Rade "Chemoenzymatic Synthesis of Nonasulfated Tetrahyaluronan with a Paramagnetic Tag for Studying Its Complex with Interleukin-10" A European Journal **22**, 5563-5574 (2016).
5. Ram N. Patel, Yogendra Pratap Singh, Yogendra Singh, Raymond John Butcher, Matthias Zeller, Bhubon Singh Rajkumar, Oinam U-wang "Syntheses, crystal structures, spectral and DFT studies of copper(II) and nickel(II) complexes with N'-(pyridine-2-ylmethylene) acetohydrazide" (2017).
6. Ram N. Patel, Yogendra Pratap Singh, Yogendra Singh, Raymond John Butcher, Jerry P. Jasinski, "Syntheses, single crystal structures, DFT and antioxidant superoxide dismutase studies of some new mono-/binuclear copper(II) complexes" Polyhedron **129** (2017).
7. Ram N. Patel, Yogendra Pratap Singh, Yogendra Singh, Raymond John Butcher, Jerry P. Jasinski, "New di- μ -oxidovanadium(V) complexes with NNO donor Schiff bases: Synthesis, crystal structures and electrochemical studies" Polyhedron **133** (2017).

Рад 2.1.2. Marina Ćendić, Zoran D. Matović and Robert J. Deeth "Molecular Modeling for Cu(II)-Aminopolycarboxylate Complexes: Structures, Conformational Energies and Ligand Binding Affinities" Journal of Computational Chemistry, 34 (31), 2687–2696 (2013) Online ISSN: 1096-987X, M21, if = 3.601

Цитиран је у:

1. John M. Slattery, Jason M. Lynam, Natalie Fey "Using Metal Vinylidene Complexes to Probe the Partnership Between Theory and Experiment" Understanding Organometallic Reaction Mechanisms and Catalysis, 41-67 (2015).
2. Marco Foscato, Robert James Deeth, Vidar R Jensen "Integration of Ligand Field Molecular Mechanics in Tinker" Journal of Chemical Information and Modeling **55**, 1282-1290 (2015).
3. Khalid A. H. Alzahrani, Robert J. Deeth "Molecular modeling of zinc paddlewheel molecular complexes and the pores of a flexible metal organic framework" Journal of Molecular Modeling **22**, 1-13 (2016).

Рад 2.2.1. Marina Ćendić, Robert J. Deeth, Auke Meetsma, Eugenio Garribba, Daniele Sanna, Zoran D. Matović "Chelating properties of EDTA-type ligands containing six-membered backbone ring toward copper ion: Structure, EPR and TD-DFT evaluation" *Polyhedron*, 124, 215-228 (2017) ISSN: 0277-5387

Цитиран је у:

1. Datta, Amitabha; Das, Kuheli; Beyene, Belete B.; Garribba, Eugenio; Gajewska, Małgorzata J.; Hung, Chen-Hsiung "EPR interpretation and electrocatalytic H₂ evolution study of bis(3,5-di-methylpyrazol-1-yl)acetate anchored Cu(II) and Mn(II) complexes" *Molecular Catalysis* **439**, 81-90 (2017)

Рад 2.2.2. Svetlana Belošević, Marina Ćendić, Zoran D. Matović, Auke Meetsma "Crystal structure, configurational and DFT-NEDA analysis of nickel(II) complexes with pentadentate ed3a-type ligands" *Polyhedron*, 50, 473-480 (2013) ISSN: 0277-5387, M22, if = 2.057

Цитиран је у:

1. Srećko R. Trifunović, Vesna D. Miletić, Verica V. Jevtić, Zoran D. Matović, "Nickel(II) in chelate N₂O₂ environment. DFT approach and in-depth molecular orbital and configurational analysis" *Dalton Transactions* **42**, 13357-13368 (2013).
2. Santolalla-Vargas, C. E.; Suarez Toriello, V. A.; de los Reyes, J. A.; Cromwell, D. K.; Pawelec, B.; Fierro, J. L. G. "Effects of pH and chelating agent on the NiWS phase formation in NiW/ γ -Al₂O₃ HDS catalysts" *Materials Chemistry and Physics* **166**, 105-115 (2015).
3. Ram N. Patel Yogendra Singh Yogendra Pratap Singh Raymond J. Butcher "Synthesis, crystal structure and DFT calculations of octahedral nickel(II) complexes derived from N'-(*E*)-phenyl(pyridin-2-yl)methylidene]benzohydrazide" *Journal of Coordination Chemistry* **69**, 2377-2390 (2016).

Рад 2.2.3. Svetlana Belošević, Marina Ćendić, Maja Đukić, Miorad Vasović, Auke Meetsma, Zoran D. Matović "Crystal structure, configurational and density functional theory analysis of nickel(II) complexes with pentadentate 1,3-pd3a-type ligands" *Inorganica Chimica Acta*, 399, 146-153 (2013) ISSN: 0020-1693, M22, if = 1.846

Цитиран је у:

1. Mandal, Senjuti; Modak, Ritwik; Sikdar, Yeasin; Naskar, Barnali; Goswami, Sanchita "Syntheses, crystal structures and spectroscopic characterization of two new octahedral nickel(II) complexes of a Schiff base ligand derived from pyridoxal and 2-(pyrid-2-yl)ethylamine" Journal of Molecular Structure **1074**, 271-278 (2014).
2. Dias dos Santos, Rachel; Freire dos Santos, Sinara de Fatima; Moura, Fagner da Silva; Maia, Paulo Jose Sousa; Teixeira da Fonseca, Bruna; Santos, Regina Helena de Almeida; Medeiros, Marta Eloisa; Garrido, Francisco Manoel dos Santos; Casellato, Annelise "A nickel(II) coordination polymer derived from a tridentate Schiff base ligand with N,O-donor groups: synthesis, crystal structure, spectroscopy, electrochemical behavior and electrocatalytic activity for H₂O₂ electroreduction in alkaline medium" Transition Metal Chemistry **42**, 301-310 (2017).

Д. Мишљење и предлог комисије

Научни допринос др Марине Ђендић огледа се у познавању карактеристика новосинтетисаних комплекса бакра(II) са АПК киселинама. Испитивање структурних карактеристика ових система, као и интеракција са важним биомолекулама попут Atox1 је важно ради бољег разумевања многобројних хемијских процеса који се одигравају у организму приликом транспорта бакра. Резултати добијени у *in vitro/in vivo* условима који су у сагласности са резултатима добијеним на основу теоријских експеримената указују на примењивост и потенцијални механизам дејства синтетисаних једињења у случајевима оболелих од одређених неуротоксичних поремећаја. Сматрамо да ће резултати бити веома корисни за истраживаче који се баве бионеорганском или медицинском хемијом.

Др Марина Ђендић је до сада објавила пет научних радова у познатим часописима међународног значаја (два рада из категорије M21 и три радова из категорије M22) и по четири саопштења на међународним и националним научним конференцијама штампаним у изводу (M34 и M64). Укупна вредност коефицијента M за до сада постигнуте резултате износи **39,8**.

Имајући у виду целокупне научне резултате др Марине Ђендић, њену научну компетентност за избор у звање научни сарадник карактеришу следеће вредности индикатора:

Ознака групе	Укупан број радова	Вредност индикатора	Укупна вредност
M ₂₁	2	8	16
M ₂₂	3	5	15
M ₃₄	4	0,5	2
M ₆₄	4	0,2	0,8
M ₇₁	1	6	6
Укупна вредност коефицијента M			39,8

КРИТЕРИЈУМИ ЗА ИЗБОР У НАУЧНО ЗВАЊЕ НАУЧНИ САРАДНИК

Потребан услов	Остварено
Укупно: 16	Укупно: 39,8
M ₁₀ +M ₂₀ +M ₃₁ +M ₃₂ +M ₃₃ +M ₄₁ +M ₄₂ ≥ 10	M ₁₀ +M ₂₀ +M ₃₁ +M ₃₂ +M ₃₃ +M ₄₁ +M ₄₂ = 31
M ₁₁ +M ₁₂ +M ₂₁ +M ₂₂ +M ₂₃ +M ₂₄ ≥ 5	M ₁₁ +M ₁₂ +M ₂₁ +M ₂₂ +M ₂₃ +M ₂₄ = 31

На основу свега изложеног може се закључити:

Ђ. Закључак

На основу анализе приложене документације, може се закључити да је др Марина Ђендић својим досадашњим научноистраживачким радом дала значајан оригинални научни допринос у области неорганске хемије. Постигнути научни резултати су од значаја за синтезу и карактеризацију АПК киселина као и одговарајућих комплекса јона бакра(II), као и резултате структурне карактеризације ових система, интеракцију са значајним биомолекулима (Atox1), резултате теоријских израчунавања (квантна/молекулска механика и молекулска динамика) као и испитивања биолошке активности у *in vitro/in vivo* експерименталним условима. Као резултат свих ових испитивања проистекао је предложени механизам дејства синтетисаних АПК киселина са циљем будуће примене у лечењу неуротоксичних поремећаја. Одбранила је докторску дисертацију из области неорганске хемије и до сада је објавила пет научних радова у познатим часописима међународног значаја (два рада из категорије M21 и три рада из категорије M22) чија је цитираност 16 (без аутоцитата), и по четири саопштења на међународним и националним научним конференцији штампаним у изводу (M34 и M64).

Имајући у виду целокупне научне резултате др Марине Ђендић, њену научну компетентност за избор у звање **научни сарадник** карактерише укупна вредност коефицијента **M** од **39,8** поена. Показала је изузетан смисао и способност за самостално бављење научно-истраживачким радом у области неорганске хемије. Поред тога, др Марина Ђендић је показала смисао да стечено знање са успехом преноси на студенте и млађе колеге. На основу претходно изнетих чињеница, а у складу са Законом о научноистраживачкој делатности („Службени гласник РС”, бр. 110/05 и 50/06-исправка), може се закључити да је др Марина Ђендић, испунила све услове за избор у звање **научни сарадник**.

Сходно томе, комисија са задовољством предлаже Наставно-научном већу Природно-математичког факултета у Крагујевцу да прихвати предлог за избор кандидата др Марине Ђендић у научно звање **научни сарадник** и упути га надлежној комисији Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије.

У Крагујевцу

20.11.2017.

К о м и с и ј а

-
1. Др Зоран Матовић, редовни професор (ментор)
Природно-математички факултет, Крагујевац
Ујеса научна област: Неорганска хемија

-
2. Др Срећко Трифуновић, редовни професор
Природно-математички факултет, Крагујевац
Ујеса научна област: Неорганска хемија

-
3. Др Матија Златар, виши научни сарадник
Институт за хемију, технологију и металургију, Београд
Научна област: Хемија