

и неорганске хемије (Опште хемије) за студенте прве године смерова: Дипломирани хемичар, Педагог за физику и хемију и Педагог за биологију и хемију; Координационе хемије за студенте четврте године смера Дипломирани хемичар; Хемије чврстог стања за студенте четврте године смера Дипломирани хемичар; Рачунарског моделовања хемијских система за студенте четврте године смера Дипломирани хемичар; Основа Координационе хемије за студенте друге године свих студијских група на Хемијском факултету. Поред тога, током два семестра школске 1999/2000. године водила је вежбе из Опште и неорганске хемије и Органске хемије на Пољопривредном факултету Универзитета у Београду (ангажовање до 1/3 радног времена).

Од избора у звање доцента, а касније и ванредног професора, др Маја Груден-Павловић била је ангажована за извођење предавања на следећим курсевима: Основи координационе хемије, основне академске студије, за студенте студијског програма Дипломирани хемичар (ХЕ), Професор хемије (ПХ) и Дипломирани биохемичар (БХ) ; Одабране области неорганске хемије, основне академске студије, за студенте студијског програма Дипломирани хемичар, Професор хемије и Дипломирани хемичар за животну средину (ХЖС) (од 2010 до 2017. године); Општа хемија, основне академске студије, за студенте свих студијских програма; Координациона хемија, мастер академске студије; Методе конформационе анализе, докторске академске студије. Такође је задужена и за курс Практикум из Опште хемије за студенте студијског програма Дипломирани биохемичар (БХ) и Дипломирани хемичар за животну средину (ХЖС).

По мишљењу студената, показала је добре педагошке способности, спремност да са студентима разговара и даје одговоре у сваком тренутку, тако да су студенти Хемијског факултета Универзитета у Београду повољно оценили њена остварења у настави, и то оценама:

- Школска 2017/2018, Општа хемија, БХ, ХЖС, (47 студената): 4,61
- Школска 2016/2017, Општа хемија, БХ, ХЖС, (51 студент): 4,51
- Школска 2015/2016, Општа хемија, БХ, ХЖС, (45 студената): 4,62
- Школска 2014/2015, Општа хемија, БХ, ХЖС, (64 студената): 4,53
- Школска 2013/2014, Општа хемија, БХ, ХЖС, (30 студената): 4,71
- Школска 2017/2018, Основи координационе хемије , ХЕ, ПХ, БХ (24 студената): 4,59
- Школска 2016/2017, Основи координационе хемије , ХЕ, ПХ, БХ (26 студената): 4,64
- Школска 2015/2016, Основи координационе хемије , ХЕ, ПХ, БХ (23 студената): 4,67
- Школска 2014/2015, Основи координационе хемије , ХЕ, ПХ, БХ (29 студената): 4,35
- Школска 2013/2014, Основи координационе хемије , ХЕ, ПХ, БХ (29 студената): 4,69
- Школска 2015/2016, Одабране области неорганске хемије, ХЕ, ПХ (7 студената): 4,44
- Школска 2013/2014, Одабране области неорганске хемије, ХЕ, (3 студента): 4,22
- Школска 2017/2018, Координациона хемија МАС:ХЕ (6 студената): 4,98
- Школска 2016/2017, Координациона хемија МАС:ХЕ (3 студента): 5,00
- Школска 2014/2015, Координациона хемија МАС:ХЕ (5 студената): 5,00
- Школска 2013/2014, Координациона хемија МАС:ХЕ (5 студената): 4,79

Током последње године изборног периода (а и раније) обавила је испите у свих шест испитних рокова на предметима за које је задужена.

Током 2009. и 2010. године учествовала је у настави на курсу Молекулско моделовање за мастер студенте Универзитета у Фрибуру. Одржала је и два предавања за мастер 2 студенте на курсу "Nanomagnetism and Spintronics" of the Master Nanoscale Engineering of the University Claude Bernard Lyon 1, Ecole Centrale Lyon and INSA Lyon, у јануару 2019. године. Такође је као предавач учествовала на летњој школи докторских студија: The 2016 COST Action CM1305 Summer School -Theory and practice in Spectroscopy and Electrochemistry; Летњој школи "Metallics: Food, feed and environmental applications with practical training" за студенте

докторских студија у оквиру пројекта HORIZON2020 “Twinning of research activities for the frontier research in the fields of food, nutrition and environmental ‘omic, од 17. до 19. јуна 2019.

Била је ментор (коментор) одбрањених 10 дипломских радова, 5 мастер теза и 4 докторске дисертације. Тренутно руководи израдом једне докторске дисертације.

Била је члан комисија за преглед, оцену и одбрадну докторских дисертација, мастер и дипломских радова на Хемијском факултету. Била је члан комисија за преглед и одбрану једне мастер тезе на Универзитету у Фрибуру, једне докторске дисертације на Универзитету у Гронингену (Холандија) и једне докторске дисертације на Универзитету у Ђирони (Шпанија).

Коаутор је Практикума из хемије за студенте прве године Хемијског факултета: М. Груден-Павловић, С. Гргурић-Шипка, С. Грубишић, С.Р. Никетић, Практикум из опште хемије, Хемијски факултет, Београд, 2008., ИСБН-13: 978-86-7220-052-2 и аутор монографије Спинска стања у комплексима прелазних метала –Примена теорије функционала густине, Хемијски факултет, Београд, 2019., ИСБН:978-86-7220-097-3

Рецензент је два Универзитетска уџбеника.

Г. Уџбеници, збирке задатака, практикуми

1. М. Груден-Павловић, С. Гргурић-Шипка, С. Грубишић, С.Р. Никетић, Практикум из опште хемије, Хемијски факултет, Београд, 2008., ИСБН-13: 978-86-7220-052-2.

Овај практикум (помоћни уџбеник) је основна литература за предмет *Практикум из Опште хемије* за студенте прве године Хемијског факултета, за који је задужена.

За остале предмете за које је задужена следећа литература је препоручена: *Општа хемија* - И. Филиповић, С. Липановић: Опћа и анорганска хемија, М. Драгојевић, М. Поповић, С. Стевић, В. Шћепановић: Општа хемија, С.Р. Трифуновић. Т. Сабо: Општа хемија; *Основи координационе хемије* - Basolo, Jonnson: Coordination chemistry, Glen Rodgers: Descriptive Inorganic, Coordination and Solid-State Chemistry (I deo), Снежана Д. Зарић: Хемија прелазних метала као и нерецензирани материјал са предавања аутора М. Груден-Павловић; *Координациона хемија* - С.Р. Никетић: Симетријски принципи координационе хемије, F.A. Cotton: Chemical Application of Group Theory и делови монографије Маја Груден, Спинска стања у комплексима прелазних метала – Примена теорије функционала густине, Хемијски факултет, Београд, 2019. ИСБН:978-86-7220-097-3; *Методe конформационе анализе*- С.Ј. Cramer: Essentials of Computational Chemistry - Theories and Models; Wiley; 2002 и Маја Груден, Спинска стања у комплексима прелазних метала – Примена теорије функционала густине, Монографија, Хемијски факултет, Београд, 2019. ИСБН:978-86-7220-097-3.

Д. Научно-истраживачка делатност

Научна делатност кандидаткиње обухвата истраживања у области опште и неорганске хемије, и теоријске хемије. У периоду до избора у звање доцента др Маја Груден-Павловић се бавила конформационом анализом металопорфирина, као и проучавањем стереохемије полиаминополикарбоксилатних комплекса прелазних метала, молекулскомеханичком методом, уз развијање специфичног поља сила. Током пост-докторског усавршавања у групи проф. Claude-a Daul-a, на Универзитету у Фрибуру, Швајцарска, радила је на развоју и примени метода теорије функционала густине (*енгл.* Density Functional Theory – DFT) у анализи различитих хемијских проблема, а првенствено у анализи Jahn-Teller-овог (ЈТ) ефекта, фундаменаталног ефекта у физици и хемији. По повратку на Хемијски факултет Универзитета у Београду самостално наставља истраживања у овој области, па се највећи број објављених радова после пост-докторског усавршавања односи на примену *ab initio* метода у проучавању Jahn-Teller-овог ефекта и његовог утицаја на особине система.

У последњих 6 година у фокусу њених истраживања су спинска стања и магнетне особине комплекса прелазних метала, као и проучавање мехнизма хемијских реакција применом теорије функционала густине. Спинска стања играју важну улогу у ензимским реакцијама, метал-оксо комплексима, у *spin-crossover* једињењима, а постоји чак и катализа која се базира на промени спинског стања где се (са једним истим

једињењем) одвијају различите реакције за различита спинска стања. Блиска електронска стања различитог спинског мултиплицитета утичу на велики број особина комплекса прелазних метала, нпр. својства основног стања, као и реактивност. Међутим, одређивање тачног основног спинског стања Теоријом функционала густине (DFT) компликован је задатак, јер тренутно још увек не постоји консензус и различите истраживачке групе препоручују коришћење различитих апроксимативних функционала за проучавање енергија спинских стања. Велики број валидационих студија на комплексима прве серије прелазних метала са различитим лингандним системима, установио је одговарајући ниво теорије, а дато је и објашњење међусобних односа између структурних особина и металног окружења са електронском структуром. Добијени резултати пружају правац ка експлицитној контроли спинских стања једињења прелазних метала и рационалном дизајну молекула и система са жељеним особинама, али обезбеђују и адекватан ниво теорије за испитивање (био)неорганских реакционих механизма, као и магнетизма (магнетне анизотропије) координационих једињења. Већи део ових радова сумиран је у монографској студији, као и у прегледном раду који је изашао у часопису *Accounts of Chemical Research* чији је ИФ 22,003.

Др Маја Груден-Павловић успешно сарађује са више експерименталних истраживачких група, па је део објављених радова настао као резултат те сарадње, где су DFT прорачуни помогли у рационализацији експерименталних резултата.

Кандидаткиња је такође радила и на развоју семиемпиријских (DFTB) метода за прелазне метале.

Коаутор је **71** рада у међународним научним часописима (10 M21a, 25 M21, 23 M22, 13 M23) и **три** поглавља у истакнутим монографијама међународног значаја (3 M13) и аутор монографије „Спинска стања у комплексима прелазних метала – Примена теорије функционала густине“. У периоду од избора у звање ванредног професора кандидаткиња је објавила монографију, два поглавља у научној књизи, четрдесеттри (43) научна рада у међународним часописима (10 категорије M21a, 19 категорије M21, 10 категорије M22 и 4 категорије M23). Према бази података *Scopus* (на дан 03.06.2019.) h индекс је 13, а сви до сада објављени радови у којима је Маја Груден-Павловић један од аутора цитирани су 450 пута без аутоцитата. На 23 рада била је аутор одговоран за кореспонденцију.

Преглед свих публикација може се наћи на: ORCID: 0000-0002-0746-5754; Scopus: 6506469500

1. Монографије

Маја Груден, Спинска стања у комплексима прелазних метала – Примена теорије функционала густине, Хемијски факултет, Београд, 2019. ИСБН:978-86-7220-097-3

2. Поглавља у књигама, прегледни чланци

после избора у звање ванредни професор

1. C. Daul, M. Zlatar, **M. Gruden-Pavlovic** and M. Swart: "Application of Density Functional and Density Functional Based Ligand Field Theory to Spin States" Book chapter in *Spin states in biochemistry and inorganic chemistry: Influence on Structure and Reactivity*, M. Swart, M. Costas (Eds.), Wiley, 2015; Ch. 2, 7-34. DOI: 10.1002/9781118898277.ch2
2. **M. Gruden**, W.R.Browne, M.Swart, C.Duboc: "Computational vs. Experimental Spectroscopy for Transition Metals" Book chapter in: *In Transition metals in coordination environments: computational chemistry and catalysis viewpoints*, E. Broclawik, T. Borowski, M. Radon (Eds.), Springer, 2019; Ch. 6, 161-183. DOI: 10.1007/978-3-030-11714-6_6

пре избора у звање ванредни професор

3. M. Zlatar, J. P. Brogg, A. Tschannen, **M. Gruden-Pavlović**, C. Daul: "Density Functional Theory Study of the Multimode Jahn-Teller Effect - Ground State Distortion of Benzene Cation" Book chapter in: *Vibronic Interactions and the Jahn-Teller Effect*, M. Atanasov, C. Daul, P.L.W.Tregenna-Piggott (Eds.); *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*, vol.23, Springer, 2012; Ch. 6, 25-38. 10.1007/978-94-007-2384-9_2

3. Научни радови објављени у часописима међународног значаја:

3.1. међународним часописима изузетних вредности (M21a)

после избора у звање ванредни професор

- 3.1.1. Chen, J., Stepanovic, S., Draksharapu, A., Gruden, M*, Browne, W.R. (2018). **A Non-Heme Iron Photocatalyst for Light-Driven Aerobic Oxidation of Methanol**. *Angewandte Chemie - International Edition*, 57(12), 3207-3211. doi: 10.1002/anie.201712678 (M21a Chemistry, Multidisciplinary; IF2017: 12,102 (14/171))
- 3.1.2. Chen, J., Unjaroen, D., Stepanovic, S., Van Dam, A., Gruden, M*, Browne, W.R. (2018). **Selective Photo-Induced Oxidation with O₂ of a Non-Heme Iron(III) Complex to a Bis(imine-pyridyl)Iron(II) Complex**. *Inorganic Chemistry*, 57 (8), 4510-4515. doi: 10.1021/acs.inorgchem.8b00187 (M21a Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2016: 4,857 (4/46))
- 3.1.3. Swart, M., Gruden, M. (2016). **Spinning around in transition-metal chemistry**. *Accounts of Chemical Research*, 49(12), 2690-2697. doi: 10.1021/acs.accounts.6b00271 (M21a Chemistry, Multidisciplinary; IF2015: 22,003 (5/163))
- 3.1.4. Stanković, B., Ostojić, B. D., Popović, A., Gruden, M. A., Đorđević, D. S. (2016). **Theoretical study of nitrodibenzofurans: A possible relationship between molecular properties and mutagenic activity**. *Journal of Hazardous Materials*, 318, 623-630. doi: 10.1016/j.jhazmat.2016.07.035 (M21a Engineering, Civil; IF2016: 6,065 (1/125); *Environmental Sciences* (13/229))
- 3.1.5. Vulovic, B., Kolarski, D., Bihelovic, F., Matovic, R., Gruden, M., Saicic, R. N. (2016). **Gold(I)-catalyzed domino cyclizations of diynes for the synthesis of functionalized cyclohexenone derivatives. total synthesis of (-)-gabosine H and (-)-6-epi-gabosine H**. *Organic Letters*, 18(15), 3886-3889. doi: 10.1021/acs.orglett.6b01898 (M21a Chemistry, Organic; IF2016: 6,579 (3/59))
- 3.1.6. Zlatar, M., Gruden, M., Vassilyeva, O. Y., Buvaylo, E. A., Ponomarev, A. N., Zvyagin, S. A., Wosnitza, J., Krzystek, J., García-Fernández, P., Duboc, C. (2016). **Origin of the zero-field splitting in mononuclear octahedral Mn(IV) complexes: A combined experimental and theoretical investigation**. *Inorganic Chemistry*, 55(3), 1192-1201. doi: 10.1021/acs.inorgchem.5b02368 (M21a Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2016: 4,857 (4/46))
- 3.1.7. García-Fernández, P., Aramburu, J. A., Moreno, M., Zlatar, M., & Gruden-Pavlović, M. (2014). **A practical computational approach to study molecular instability using the pseudo-Jahn-Teller effect**. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 10(4), 1824-1833. doi: 10.1021/ct4011097 (M21a Physics, Atomic, Molecular & Chemical; IF2013: 5,310 (3/33))
- 3.1.8. Gruden-Pavlović, M., Perić, M., Zlatar, M., García-Fernández, P. (2014). **Theoretical study of the magnetic anisotropy and magnetic tunnelling in mononuclear Ni(II) complexes with potential molecular magnet behavior**. *Chemical Science*, 5(4), 1453-1462. doi: 10.1039/c3sc52984c ((M21a Chemistry, Multidisciplinary; IF2014: 9,211 (14/157))
- 3.1.9. Vulovic, B., Gruden-Pavlovic, M., Matovic, R., Saicic, R. N. (2014). **Substrate stereocontrol in the intramolecular organocatalyzed Tsuji-Trost reaction: Enantioselective synthesis of allokatins**. *Organic Letters*, 16(1), 34-37. doi: 10.1021/ol4028557 (M21a Chemistry, Organic; IF2014: 6,364 (4/58))

- 3.1.10. Stepanović, S., Andjelković, Lj., Zlatar, M., Andjelković, K., Gruden-Pavlović, M*, Swart, M. (2013). **Role of spin state and ligand charge in coordination patterns in complexes of 2,6-diacetylpyridinebis(semioxamazine) with 3d-block metal ions: A density functional theory study.** *Inorganic Chemistry*, 52(23), 13415-13423. doi: 10.1021/ic401752n (M21a Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2013: 4,794 (4/45))

3.2. врхунским међународним часописима (M21)

после избора у звање ванредни професор

- 3.2.1 Stepanovic, S., Zlatar, M., Swart, M., Gruden, M*. (2019). **The irony of manganocene - an interplay between the Jahn-Teller effect and close lying electronic and spin states.** *Journal of Chemical Information and Modeling*, 59(5), 1683-2508. doi: 10.1021/acs.jcim.8b00870 (M21 Chemistry, Multidisciplinary; IF2017: 3,804 (49/171))
Supplementary Cover Page
- 3.2.2 Gruden, M*, Andjelković, Lj., Jissy, A. K., Stepanović, S., Zlatar, M., Cui, Q., Elstner, M. (2017). **Benchmarking density functional tight binding models for barrier heights and reaction energetics of organic molecules,** *Journal of Computational Chemistry*, 38(25), 2171-2185. doi: 10.1002/jcc.24866 (M21 Chemistry, Multidisciplinary; IF2015: 3,648 (41/163))
- 3.2.3 Wang, L., Zlatar, M., Vlahović, F., Demeshko, S., Philouze, C., Molton, F., Gennari, M., Meyer, F., Duboc, C., Gruden, M*. (2018) **Experimental and Theoretical Identification of the Origin of Magnetic Anisotropy in Intermediate Spin Iron(III) Complexes,** *Chemistry - A European Journal*, 24 (20), 5091-5094. doi: 10.1002/chem.201705989 (M21 Chemistry, Multidisciplinary; IF2017: 5,160 (37/171))
- 3.2.4 Vlahovic, F., Gruden, M., Swart, M., (2018) **Rotating iron and titanium sandwich complexes,** *Chemistry - A European Journal*, 24, 5070-5073, doi: 10.1002/chem.201704829 (M21 Chemistry, Multidisciplinary; IF2017: 5,160 (37/171))
- 3.2.5 Vujović, M., Zlatar, M., Milčić, M., Gruden, M*. (2017). **In / out isomerism of cyclophanes: A theoretical account of 2,6,15-trithia-[34,10][7]metacyclophane and [34,10][7]metacyclophane as well as their halogen substituted analogues.** *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(14), 9500-9508, doi: 10.1039/c7cp00557a (M21 Chemistry, Physical; IF2015: 4,449 (32/144))
- 3.2.6 Stepanovic, S., Angelone, D., Gruden, M.*, Swart, M. (2017). **The role of spin states in the catalytic mechanism of the intra- and extradiol cleavage of catechols by O₂.** *Organic & Biomolecular Chemistry*, 15, 7860-7868 doi: 10.1039/c7ob01814b (M21 Chemistry, Organic ; IF2016: 3,564 (14/56))
- 3.2.7 Adhikary, J., Chakraborty, A., Dasgupta, S., Chattopadhyay, S. K., Kruszynski, R., Trzesowska-Kruszynska, A., Stepanovic, S., Gruden-Pavlović, M., Swart, M., Das, D. (2016). **Unique mononuclear Mn(II) complexes of an end-off compartmental schiff base ligand: Experimental and theoretical studies on their bio-relevant catalytic promiscuity.** *Dalton Transactions*, 45(31), 12409-12422. doi: 10.1039/c6dt00625f (M21 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2016: 4,029 (7/46))
- 3.2.8 Ajdačić, V., Stepanović, S., Zlatović, M., Gruden, M., Opsenica, I. M. (2016). **Decarbonylative dibromination of 5-phenylthiophene-2-carbaldehyde with bromine.** *Synthesis (Germany)*, 48(24), 4423-4430. doi: 10.1055/s-0035-1562615 (M21 Chemistry, Organic ; IF2014: 2,689 (17/58))
- 3.2.9 Andjelković, Lj., Stepanović, S., Vlahović, F., Zlatar, M., Gruden, M*. (2016). **Resolving the origin of the multimode Jahn-Teller effect in metallophthalocyanines.** *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18(42), 29122-29130. doi: 10.1039/c6cp03859j (M21 Chemistry, Physical; IF2015: 4,449 (32/144))
- 3.2.10 Fitzpatrick, A. J., Stepanovic, S., Müller-Bunz, H., Gruden-Pavlović, M. A., García-Fernández, P., & Morgan, G. G. (2016). **Challenges in assignment of orbital populations in a high spin Manganese(III) complex.** *Dalton Transactions*, 45(15), 6702-6708. doi: 10.1039/c5dt03914b (M21 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2016: 4,029 (7/46))

- 3.2.11 Vlahović, F., Perić, M., Gruden-Pavlović, M., Zlatar, M. (2015). **Assessment of TD-DFT and LF-DFT for study of d - d transitions in first row transition metal hexaaqua complexes.** Journal of Chemical Physics, 142(21) doi: 10.1063/1.4922111(M21 Physics, Atomic, Molecular & Chemical; IF2014: 2,952 (8/34))
- 3.2.12 Perić, M., García-Fuente, A., Zlatar, M., Daul, C., Stepanović, S., García-Fernández, P., Gruden-Pavlović, M.* (2015). **Magnetic anisotropy in "scorpionate" first-row transition-metal complexes: A theoretical investigation.** Chemistry - A European Journal, 21(9), 3716-3726. doi: 10.1002/chem.201405480 (M21 Chemistry, Multidisciplinary; IF2015: 5,771 (24/163))
- 3.2.13 Gruden-Pavlović, M.*, Stepanović, S., Perić, M., Güell, M., Swart, M. (2014). **A density functional study of the spin state energetics of polypyrazolylborato complexes of first-row transition metals.** Physical Chemistry Chemical Physics, 16(28), 14514-14522. doi: 10.1039/c3cp55488k (M21 Chemistry, Physical; IF2014: 4,493 (32/139))
- 3.2.14 Matović, R., Bihelović, F., Gruden-Pavlović, M., & Saičić, R. N. (2014). **Total synthesis and biological evaluation of atrop-O-benzyl-desmethylabysosomicin C.** Organic and Biomolecular Chemistry, 12(39), 7682-7685. doi: 10.1039/c4ob01436g (M21 Chemistry, Organic ; IF2014: 3,562 (12/58))
- 3.2.15 Milenkovic, M., Pevec, A., Turel, I., Vujčić, M., Milenković, M., Jovanović, K., Gligorijević, N., Radulović, S., Swart, M., Gruden-Pavlović, M., Čobeljić, B., Anđelkovic, K. (2014). **Synthesis, characterization, DFT calculation and biological activity of square-planar Ni(II) complexes with tridentate PNO ligands and monodentate pseudohalides.** European Journal of Medicinal Chemistry, 87, 284-297. doi: 10.1016/j.ejmech.2014.06.079 (M21 Chemistry, Medicinal; IF2014: 3,447 (11/59))
- 3.2.16 Shweshein, K. S. A. M., Andrić, F., Radoičić, A., Zlatar, M., Gruden-Pavlović, M., Tešić, Ž., Milojković-Opsenica, D. (2014). **Lipophilicity assessment of ruthenium(II)-arene complexes by the means of reversed-phase thin-layer chromatography and DFT calculations.** The Scientific World Journal, 2014 doi: 10.1155/2014/862796 (M21 Multidisciplinary Sciences; IF2013: 1,219 (16/55))
- 3.2.17 García-Fernández, P., Andjelković, Lj., Zlatar, M., Gruden-Pavlović, M.*, Dreuw, A. (2013). **A simple monomer-based model-hamiltonian approach to combine excitonic coupling and Jahn-Teller theory.** Journal of Chemical Physics, 139(17) doi: 10.1063/1.4827398 (Physics, Atomic, Molecular & Chemical; IF2012: 3,164 (8/34))
- 3.2.18 Zlatar, M., Gruden-Pavlović, M.*, Güell, M., Swart, M. (2013). **Computational study of the spin-state energies and UV-vis spectra of bis(1,4,7-triazacyclononane) complexes of some first-row transition metal cations.** Physical Chemistry Chemical Physics, 15(18), 6631-6639. doi: 10.1039/c2cp43735j (M21 Chemistry, Physical; IF2013: 4,198 (33/136))
- 3.2.19 Ramanantoanina, H., Zlatar, M., García-Fernández, P., Daul, C., Gruden-Pavlović, M.*. (2013). **General treatment of the multimode Jahn-Teller effect: Study of fullerene cations.** Physical Chemistry Chemical Physics, 15(4), 1252-1259. doi: 10.1039/c2cp43591h (M21 Chemistry, Physical; IF2013: 4,198 (33/136))

пре избора у звање ванредни професор

- 3.2.20 Ramanantoanina, H., Gruden-Pavlović, M., Zlatar, M., Daul, C. (2013). **Density functional theory study of the multimode Jahn-Teller problem in the fullerene anion.** International Journal of Quantum Chemistry, 113(6), 802-807. doi: 10.1002/qua.24080 (M21 Mathematics, Interdisciplinary Applications; IF2011: 1,357 (25/92))
- 3.2.21 Andjelković, Lj., Gruden-Pavlović, M., Daul, C., Zlatar, M. (2013). **The choice of the exchange-correlation functional for the determination of the Jahn-Teller parameters by the density functional theory.** International Journal of Quantum Chemistry, 113(6), 859-864. doi: 10.1002/qua.24245 (M21 Mathematics, Interdisciplinary Applications; IF2011: 1,357 (25/92))
- 3.2.22 Gruden-Pavlović, M., García-Fernández, P., Andjelković, Lj., Daul, C., Zlatar, M. (2011) **Treatment of the Multimode Jahn-Teller Problem in Small Aromatic Radicals,** The Journal of Physical Chemistry A, 115(39), 10801-10813 (M21 Physics, Atomic, Molecular & Chemical; IF2011: 2,946 (9/33))

- 3.2.23 Lazić, J., Vučićević, Lj., Grgurić-Šipka, S., Janjetović, K., Kaluderović, G. N., Misirkić, M., Gruden-Pavlović, M., Popadić, D., Paschke, R., Trajković, V., Sabo, T. J. (2010) **Synthesis and in vitro Anticancer Activity of Octahedral Platinum(IV) Complexes with Cyclohexyl-Functionalized Ethylenediamine-N,N'-Diacetate-Type Ligands**, ChemMedChem, 881-889 (M21 Chemistry, Medicinal; IF2010: 3,306 (10/54))
- 3.2.24 Antić, B., Kremenović, A., Vučinić-Vasić, M., Dohčević-Mitrović, Z., Nikolić, A.S., Gruden-Pavlović, M., Jančar, B., Meden, A. (2010) **Composition related properties of (Yb,Y)₂O₃ nanoparticles synthesized by controlled thermal degradation of AA complexes**, Materials Chemistry and Physics, 122, 386-391 (M21 Materials Science, Multidisciplinary; IF2010: 2,356 (45/225))
- 3.2.25 Gruden-Pavlović M., Grubišić, S., Niketić, S. R. (2004). **Conformational analysis of octa- and tetrabromo tetraphenylporphyrins and their Ni(II) and Tb(III) complexes**. Journal of Inorganic Biochemistry, 98, 1293-1302 (M21 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2004: 2,225 (13/45))

3.3. истакнутим међународним часописима (M22)

posle izbora u zvaņe vanredni profesor

- 3.3.1 Vujović, M., Huynh, M., Steiner, S., Garcia-Fernandez, P., Elstner, M., Cui, Q., Gruden, M.*. (2019). **Exploring the applicability of density functional tight binding to transition metal ions. Parameterization for nickel with the spin-polarized DFTB3 model**. Journal of Computational Chemistry, 40(2), 400-413. doi: 10.1002/jcc.25614 (M22 Chemistry, Multidisciplinary; IF2017: 3,221 (63/171))
- 3.3.2 Milenković, M. R., Papastavrou, A. T., Radanović, D., Pevec, A., Jagličić, Z., Zlatar, M., Gruden, M., Vougioukalakis, G. C., Turel, I., Anđelković, K., Čobeljić, B. (2019). **Highly-efficient N-arylation of imidazole catalyzed by Cu(II) complexes with quaternary ammonium-functionalized 2-acetylpyridine acylhydrazone**. Polyhedron, 165, 22-30. doi: 10.1016/j.poly.2019.03.001 (M22 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2017: 2,067(18/45))
- 3.3.3 Čobeljić, B., Pevec, A., Stepanović, S., Milenković, M. R., Turel, I., Gruden, M., Radanović, D., Anđelković, K. (2018). **Structural diversity of isothiocyanato Cd(II) and Zn(II) Girard's T hydrazone complexes in solution and solid state: effect of H-bonding on coordination number and supramolecular assembly of Cd(II) complex in solid state**. Structural Chemistry, 29(6), 1797-1806. doi: 10.1007/s11224-018-1155-8 (M22 Chemistry, Multidisciplinary; IF2017: 1,526 (99/171))
- 3.3.4 Stanković, B., Ostojić, B. D., Gruden, M., Popović, A., Đorđević, D. S. (2016). **Substituted naphthalenes: Stability, conformational flexibility and description of bonding based on ETS-NOCV method**. Chemical Physics Letters, 661, 136-142. doi: 10.1016/j.cplett.2016.08.056 (M22 Chemistry, Physical; IF2014: 1,897 (83/139))
- 3.3.5 Jovanović, M., Gruden-Pavlović, M., Zlatović, M. (2015). **Stabilizing non-covalent interactions of ligand aromatic moieties and proline in ligand-protein systems**. Monatshefte Fur Chemie, 146(2), 389-397. doi: 10.1007/s00706-014-1357-8 (M22 Chemistry, Multidisciplinary; IF2014: 1,222 (91/157))
- 3.3.6 Anđelković, Lj., Gruden-Pavlović, M., Zlatar, M. (2015). **Density functional theory study of the multimode Jahn-Teller problem in the open-shell corannulenes and coronenes**. Chemical Physics, 460, 64-74. doi: 10.1016/j.chemphys.2015.05.007 (Physics, Atomic, Molecular & Chemical; IF2014: 1,652 (19/34))
- 3.3.7 Čobeljić, B., Pevec, A., Stepanović, S., Spasojević, V., Milenković, M., Turel, I., Swart, M., Gruden-Pavlović, M., Adaila, K., Anđelković, K. (2015). **Experimental and theoretical investigation of octahedral and square-planar isothiocyanato complexes of ni(II) with acylhydrazones of 2-(diphenylphosphino)benzaldehyde**. Polyhedron, 89, 271-279. doi: 10.1016/j.poly.2015.01.024 (M22 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2015: 2,108 (19/46))
- 3.3.8 Perić, M., Anđelković, Lj., Zlatar, M., Daul, C., Gruden-Pavlović, M.* (2014). **DFT investigation of the influence of Jahn-Teller distortion on the aromaticity in square-planar arsenic and antimony clusters**. Polyhedron, 80, 69-80. doi: 10.1016/j.poly.2014.02.005 (M22 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2014: 2,011 (19/45))

- 3.3.9 Adaila, K., Milenković, M., Bacchi, A., Cantoni, G., Swart, M., Gruden-Pavlović, M., Milenković, M., Čobeljić, B., Todorović, T., Andjelković, K. (2014). **Synthesis, characterization, DFT calculations, and antimicrobial activity of Pd(II) and Co(III) complexes with the condensation derivative of 2-(diphenylphosphino)benzaldehyde and Girard's T reagent.** Journal of Coordination Chemistry, 67(22), 3633-3648. doi: 10.1080/00958972.2014.972389 (M22 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2014: 2,012 (18/45))
- 3.3.10 Perić, M., Andjelković, Lj., Zlatar, M., Nikolić, A. S., Daul, C., Gruden-Pavlović, M.*. (2013). **Spherical aromaticity of Jahn-Teller active fullerene ions.** Monatshefte Fur Chemie, 144(6), 817-823. doi: 10.1007/s00706-013-0943-5 1139 (M22 Chemistry, Multidisciplinary; IF2012: 1,629 (63/152))

pre izbora u zvanje vanredni profesor

- 3.3.11 Perić, M., Zlatar, M., Grubišić, S., Gruden-Pavlović, M.*. (2012) **Magnetic couplings mediated through the non-covalent interactions,** Polyhedron 42(1), 89-94 (M22 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2011: 2,057 (18/44))
- 3.3.12 Šumar Ristović, M., Gruden-Pavlović, M., Zlatar, M., Blagojević, V., Andjelković, K., Poleti, D., Minić, D. M. (2012). **Kinetics, mechanism and DFT calculations of thermal degradation of Zn(II) complex with 3 N-benzoyloxycarbonylglycinato ligand.** Monatshefte für Chemie, 143, 1133-1139 (M22 Chemistry, Multidisciplinary; IF2011: 1,532 (69/154))
- 3.3.13 Andjelković, Lj., Perić, M., Zlatar, M., Grubišić, S., Gruden-Pavlović, M.*. (2012) **Magnetic criteria of aromaticity in a benzene cation and anion: How does the Jahn-Teller effect influence the aromaticity?** Tetrahedron Letters, 53, 794-799 (M22 Chemistry, Organic; IF2011: 2,683 (19/56))
- 3.3.14 Perić, M., Zlatar, M., Gruden-Pavlović, M., Grubišić, S. (2012). **A DFT study of the magnetic coupling interaction in a series of binuclear oxalate complexes,** Monatshefte für Chemie, 143, 569-577 (M22 Chemistry, Multidisciplinary; IF2011: 1,532 (69/154))
- 3.3.15 Senn, F., Zlatar, M., Gruden-Pavlović, M.*, Daul, C. (2011). **Computational analysis of tris(1,2-ethanediamine) cobalt(III) complex ion: calculation of the ⁵⁹Co shielding tensor using LF-DFT,** Monatshefte für Chemie, 142, 593-597 (M22 Chemistry, Multidisciplinary; IF2011: 1,532 (69/154))
- 3.3.16 Perić, M., Zlatar, M., Niketić, S. R., Gruden-Pavlović, M., Grubišić, S. (2011). **DFT and MM description of the structure and magnetic properties of manganese complexes with X-phenylcyanamido bridging ligand,** Monatshefte für Chemie, 142 (2011) 585-592 (M22 Chemistry, Multidisciplinary; IF2011: 1,532 (69/154))
- 3.3.17 Zlatar, M., Gruden-Pavlović, M., Schlapfer, C.-W., Daul, C. (2010). **Density Functional Theory for the study of the multimode Jahn-Teller effect.** Chimia, 64, 161-164 (M22 Chemistry, Multidisciplinary; IF2009: 1.577 (58/140))
- 3.3.18 Gruden-Pavlović, M., Grubišić, S., Zlatar, M., Niketić, S. R. (2007). **Molecular Mechanics Study of Nickel(II)Octaethylporphyrin Adsorbed on Graphite(0001).** International Journal of Molecular Sciences, 8, 810-829 (M22 Chemistry, Multidisciplinary; IF2009: 1,387 (64/140))
- 3.3.19 Grubišić, S., Gruden-Pavlović, M., Niketić, S. R., Kaizaki, S., Sakagami-Yoshida, N. (2003). **Structural characterization and conformational analysis of (aqua)(ethylenediamine-N,N,N'-triacetato)chromium(III) monohydrate complex. Crystal structure of the cis-equatorial isomer of [Cr(ed3a)(H₂O)].H₂O.** Inorganic Chemistry Communications, 6, 1180-1184 (M22 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2003: 1,513 (20/46))
- 3.3.20 Pelizzi, G., Bacchi, A., Ivanović-Burmazović, I., Gruden, M., Andjelković, K. (2001). **Ni(II) complexes with neutral and dianionic form of 2,6-diacetylpyridine bis(acylhydrazones). Crystal structure of bis[dioxo-2,6-pyridinediylbis(ethylidyne-1-hydrazinyl-2-ylidene)diacetic acid]nickel(II) perchlorate,** Inorganic Chemistry Communications, 4, 311-314 (M22 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2002: 1,359 (22/45))
- 3.3.21 Grubišić, S., Gruden-Pavlović, M., Radanović, D. D., Perić, M., Niketić, S. R. (2009). **Molecular mechanics description of the stabilized effects in (ethylenediamine-N,N'-diacetato)chromate(III) dinuclear complex bridged by pyrazole-3,5-dicarboxylate: DFT calculations of magnetic properties,** Journal of Molecular Structure, 919, 54-58 (M22 Chemistry, Physical; IF2008: 1, 594 (66/113))

- 3.3.22 Grubišić, S., Gruden, M., Niketić, S. R., Sakagami-Yoshida, N., Kaizaki, S. (2002). **Conformational analysis of EDTA-type chromium(III) complexes with β -propionato metal chelate rings**. Journal of Molecular Structure, 609, 1-9 (M22 Chemistry, Physical; IF2002: 1,122 (55/95))
- 3.3.23 Gruden, M., Grubišić, S., Coutsolelos, A. G., Niketić, S. R. (2001). **Conformational analysis of octa- and tetrahalogenated tetraphenylporphyrins and their metal derivatives**, Journal of Molecular Structure, 595, 209-224 (M22 Chemistry, Physical; IF2002: 1,122 (55/95))

3.4. међународним часописима (M23)

после избора у звање ванредни професор

- 3.4.1 Perić, M., Kyne, H.S., Gruden, M., Rodić, M., Jeremić, D., Stanković, D., Brčeski, I. (2019). **Synthesis, structural and DFT analysis of a binuclear nickel(II) complex with the 1,4-bis[2-[2-(diphenylphosphino)benzylidene]]phthalazinyldihydrazone ligand**. Monatshefte für Chemie, doi: 10.1007/s00706-019-02405-7 (M23 Chemistry, Multidisciplinary; IF2017: 1.285 (117/171))
- 3.4.2 Vlahovic, F., Ivanovic, S., Zlatar, M., Gruden, M*. (2017). **Density functional theory calculation of lipophilicity for organophosphate type pesticides**. Journal of the Serbian Chemical Society, 82(12), 1369-1378, doi: 10.2298/JSC170725104V JSC141107025A (M23 Chemistry, Multidisciplinary; IF2015: 0.970 (120/163))
- 3.4.3 Andjelković, Lj., Perić, M., Zlatar, M., Gruden-Pavlović, M*. (2015). **Nucleus-independent chemical shift profiles along the intrinsic distortion path for Jahn-Teller active molecules. Study on the cyclopentadienyl radical and cobaltocene**. Journal of the Serbian Chemical Society, 80(7), 877-888. doi: 10.2298/JSC141107025A (M23 Chemistry, Multidisciplinary; IF2015: 0.970 (120/163))
- 3.4.4 Gruden, M., Stepanovic, S., Swart, M. (2015). **Spin state relaxation of iron complexes: The case for OPBE and S12g**. Journal of the Serbian Chemical Society, 80(11), 1399-1410. doi: 10.2298/JSC150611068G (M23 Chemistry, Multidisciplinary; IF2015: 0.970 (120/163))

пре избора у звање ванредни професор

- 3.4.5 Djordjević, M., Jeremić, D., Andjelković, K., Gruden-Pavlović, M., Divjaković, V., Šumar Ristović, M., Brčeski, I. (2012). **Novel Cobalt(II) and Cadmium(II) compounds with adamantane-1-sulfonic acid**, Journal of the Serbian Chemical Society, 77, 1391-1399 (M23 Chemistry, Multidisciplinary; IF2011: 0,879 (103/154))
- 3.4.6 Jovalekić, Č., Nikolić, A. S., Gruden-Pavlović, M., Pavlović, M. (2012). **Mechanochemical synthesis of stoichiometric nickel and nickel-zinc ferrite powders with Nicolson-Ross analysis of absorption coefficients**, Journal of the Serbian Chemical Society, 77, 497-505 (M23 Chemistry, Multidisciplinary; IF2011: 0,879 (103/154))
- 3.4.7 Andjelković, Lj. Grubišić, S., Djordjević, I., Zlatar, M., Niketić, S., Gruden-Pavlović, M*. (2010). **Consistent Force Field for Metalloporphyrins**. Journal of the Serbian Chemical Society, 75, 1671-1683 (M23 Chemistry, Multidisciplinary; IF2010: 0,725 (98/147))
- 3.4.8 Zlatar, M., Gruden-Pavlović, M., Schlaepfer, C.-W., Daul, C. (2010). **Intrinsic Distortion Path in the analysis of the Jahn-Teller effect**, Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, 954, 86-93 (M23 Chemistry, Physical; IF2010: 1,288 (88/127))
- 3.4.9 Gruden-Pavlović, M., Zlatar, M., Schlaepfer, C.-W., Daul, C. (2010). **DFT study of the Jahn-Teller effect in Cu(II) chelate complexes**, Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, 954, 80-85 (M23 Chemistry, Physical; IF2010: 1,288 (88/127))
- 3.4.10 Grubišić, S., Gruden-Pavlović, M., Niketić, S. R., Sakagami-Yoshida, N., Kaizaki, S. (2007). **Structural analysis of conformational flexibility in (aqua) (propanediamine-N,N'-diacetato-N-propionato)chromium(III)dihydrate. Crystal structure of cis-polar, trans(H₂O,O5)-[Cr(1,3-pddap)(H₂O)].2H₂O**, Journal of Coordination Chemistry, 60, 851-863 (M23 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2007: 0,867 (29/43))

- 3.4.11 Grubišić, S., Gruden-Pavlović, M., Niketić, S. R., Sakagami-Yoshida, N., Kaizaki, S. (2003). **Structural characterization of the trans-equatorial isomer of (aqua)(ethylenediamine-N,N,N'-tri-propionato)chromium(III) trihydrate, [Cr(edtrp)(H₂O)].3H₂O**, Transition Metal Chemistry, 28, 37-42 (M23 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2003: 0,840 (30/46))
- 3.4.12 Bacchi, A., Pelizzi, G., Gruden-Pavlović, M., Jeremić, D., Sladić, D., Andjelković, K., **Synthesis and structural characterization of copper(II) complexes with the 2'-[1-(2-pyridinyl)ethylidene]oxalohydrazide ligand** (2003). Transition Metal Chemistry, 28, 935-938 (M23 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2003: 0,840 (30/46))
- 3.4.13 Andjelković, K., Ivanović-Burmazović, I., Gruden, M., Niketić, S. R., **Complexes of Molybdenum(V) and Lanthanum(III) with 2' 2'''-(2,6-pyridindiyldiethylidene) dioxamohydrazide (H2dapsox)**, Journal of Coordination Chemistry, 53, 289-300 (M23 Chemistry, Inorganic & Nuclear; IF2001: 0,623 (33/42))

4. Научни радови објављени у часописима националних значаја

Кандидат нема публикације овог типа

5. Научна саопштења:

на међународним скуповима штампана у облику кратког извода:

после избора у звање ванредни професор

- 5.1.1 J. D. Steen, S. Stepanović, M. Parvizian, R. Hage, J. Chen, M. Swart, W. R. Browne, M. Gruden, **Elucidation of the role of Lewis acids in the activation of [Mn₂^{IV}(μ-O)₃(TMTACN)₂](PF₆)₂·H₂O in the catalytic oxidation of alkenes with H₂O₂**, 4th Quantum Bio Inorganic Chemistry Conference Bath, September 3rd-6th 2018, Book of Abstracts, P-20.
- 5.1.2 S. Stepanović, J. Chen, A. Draksharapu, M. Gruden, W. R. Browne, **Photocatalytic properties of antiferromagnetically coupled iron dimer**, Girona seminar on Predictive Catalysis: Transition-Metal Reactivity by Design, Girona, 3rd-6th April 2018, P99, p. 168, Book of Abstracts.
- 5.1.3 F. Vlahović, M. Gruden, M. Swart, **Rotating sandwich complexes**, Girona Seminar 2018, Predictive Catalysis: Transition-Metal Reactivity by Design, Book of abstracts pp178.
- 5.1.4 M. Zlatar, M. Gruden, **Rational Design of Single Molecule Magnets — Density Functional Perspective**, 17th International Conference on Density-Functional Theory and its Applications | Tällberg (Dalarna) Sweden | August 21st – 25th 2017
- 5.1.5 M. Zlatar, M. Gruden, **Rational Design of Single Molecule Magnets — Density Functional Perspective**, book of Abstracts, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, 27 August – 1 September 2017 Munich, Germany.
- 5.1.6 M. Zlatar, Lj. Andjelković and M. Gruden, **Resolving the origin of Jahn-Teller effect in organic and inorganic systems, Resolving the origin of Jahn-Teller effect in organic and inorganic systems** XXIII International symposium on the Jahn-Teller effect vibronic coupling and electron-phonon interaction in molecules and crystals 27 August - 1 September, 2016 Tartu, Estonia
- 5.1.7 L. Andjelković, M. Zlatar, M. Swart, M. Gruden, **Computational study of the spin-state energetics in manganese phthalocyanine**, Fifth scientific ECOSTBio CM1305 workshop: Kraków, September 8-9, 2016
- 5.1.8 S. Stepanović, D. Angelone, M. Gruden, M. Swart, **The role of spin states in catalytic mechanism of the intra- and extradiol cleavage of catechols by O₂**, Fifth scientific ECOSTBio CM1305 workshop: Kraków, September 8-9, 2016
- 5.1.9 F. Vlahović, M. Gruden, M. Swart, **Density functional approximation approach for determination of oxidation states and spin states of oxoiron complexes**, Fifth scientific ECOSTBio CM1305 workshop: Kraków, September 8-9, 2016

- 5.1.10 M. Gruden, M. Swart, **Spin state of iron complexes: The case for OPBE, SSB-D and S12g**, S18.OC10 (oral contribution), Book of Abstracts, 42nd International Conference on Coordination Chemistry, Brest, France, 3 July 2016 – 8 July 2016.
- 5.1.11 Lj. Andjelković, M. Zlatar, M. Gruden-Pavlović, **Treatment of the Multimode Jahn-Teller Problem: From Small Aromatic Organic Radicals to Fullerene Ions**, P1, p. 1, Book of Abstracts, ECOSTBio CM1305 Summer School, Groningen, The Netherlands, 04-11.07.2015.
- 5.1.12 M. Perić, M. Zlatar, M. Gruden-Pavlović, **Theoretical study of the magnetic anisotropy in mononuclear trigonal bipyramidal Ni(II) complexes**, P72, Book of Abstracts, 50th Symposium on theoretical Chemistry: Quantum Chemistry and Chemical Dynamics, Vienna, Austria, 14-18.09.2014.
- 5.1.13 M. Zlatar, C. Daul, P. García-Fernández, M. Gruden-Pavlović, **Computational Analysis of Intrinsic Distortions of Jahn-Teller and Pseudo Jahn-Teller Active Molecules**, Book of Abstracts, p. 22, XXIIInd International Symposium on the Jahn-Teller Effect, Graz, Austria, 18-22.08.2014.
- 5.1.14 M. Zlatar, C. Daul, M. Perić, M. Gruden-Pavlović, **LF-DFT Study of the Zero-Field-Splitting in hydro(tris-pyrazol-1-yl)borate complexes of Some First-Row Transition Metal Cations**, P165, Book of Abstracts, p. 212, 15th International Conference on Density Functional Theory and its Applications, Durham, UK, 9-13.09.2013
- 5.1.15 M. Gruden-Pavlović, Lj. Anđelković, M. Perić, M. Zlatar, C. Daul, **DFT investigation of aromatic/antiaromatic character of Jahn-Telleractive species: case study on arsenic and antimony clusters**, P60, Book of Abstracts, p. 107, 15th International Conference on Density Functional Theory and its Applications, Durham, UK, 9-13.09.2013
- 5.1.16 B. Vulović, M. Gruden-Pavlović, M. Zlatar, R. Matović, R. N. Sačić, **Substrate control in the intramolecular organocatalyzed Tsuji-Trost reaction: Enantioselective synthesis of allokinates**, 14th Tetrahedron Symposium, Beč, Austrija, 25-28.06.2013.
- 5.1.17 P. García-Fernández, M. Perić, M. Zlatar, M. Gruden-Pavlović, **Prediction of giant magnetic anisotropy on transition-metal single-ion magnets**, Book of abstracts, p. 47, CODECS 2013 Workshop, San Lorenzo de El Escorial, Madrid, 18-22.04.2013

пре избора у звање ванредни професор

- 5.1.18 M. Gruden-Pavlović, M. Perić, M. Zlatar, **Long range magnetic couplings mediated through the non-covalent interactions in multi copper metalloenzymes**, P21, p. 95, Book of Abstracts, X Girona seminar on Theoretical and Computational Chemistry for the Modeling of Biochemical Systems: From Theory to Applications, Girona, 2nd-5th July 2012.
- 5.1.19 H. Ramanantoanina, M. Zlatar, M. Gruden-Pavlović, C. Daul, **Excited state properties of Cr³⁺ in Cs₂NaYCl₆ and Cs₂NaYBr₆: A DFT study of the Jahn-Teller distortion in the excited state**, Talk 24, p. 50, Book of Abstracts, COST-CoDECS Workshop, Porto, Portugal, 4-8 May, 2012.
- 5.1.20 M. Zlatar, C. Daul, M. Gruden-Pavlović, **A general approach to analyze the multimode Jahn-Teller distortion: Case study on fullerene ions**, Talk 25, p. 51, Book of Abstracts, COST-CoDECS Workshop, Porto, Portugal, 4-8 May, 2012.
- 5.1.21 M. Zlatar, O. May, M. Gruden-Pavlović, M. Allan, **Dissociative electron attachment measurements and TDDFT calculations of the excitation energies in Pt(PF₃)₄: Synergy between the experiment and the theory**, p. 75, Book of Abstracts, 26th Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases, August 27th-31st, Zrenjanin, Serbia, 2012.
- 5.1.22 M. Zlatar, M. Gruden-Pavlović, Lj. Andjelković, C. Daul, **Treatment of Jahn-Teller Effect Using Density Functional Theory**, Poster 119, Book of Abstracts, 14th Intern. Conf. On the Applic. of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, DFT11, Athens, Greece, 2011.
- 5.1.23 M. Gruden-Pavlović, M. Zlatar, C. Daul, **Theoretical study of the Jahn-Teller effect**, Progress report, Invited Talk, p. 109, Book of Abstracts, 5th Conference on Elementary Processes in Atomic Systems (CEPAS) and 2nd National Conference on Electronic, Atomic, Molecular and Photonic Physics (CEAMPP), Belgrade, Serbia, 2011.
- 5.1.24 M. Šumar-Ristović, V. Blagojević, M. Gruden, K. Anđelković, D. Poletti, D. Minić, **Kinetics and Mechanism of Thermal Degradation of Zn(II) Complex with N-benzoyloxycarbonyl glycinate**

- Ligand**, PS1.41, Book of Abstracts, 1st Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry, Craiova, Romania, 2011.
- 5.1.25 B. P. Dojčinović, G. M. Roglić, B. M. Obradović, M. M. Kuraica, M. M. Kostić, M. A. Gruden-Pavlović, D. D. Manojlović, **Decolorization of Reactive Black 5 using water falling film dielectric barrier discharge**, p. 69, Book of Abstracts, The Fourth Central European Symposium on Plasma Chemistry, Zlatibor, Serbia, 2011.
- 5.1.26 M. Gruden-Pavlović, M. Zlatar, C.-W. Schläpfer, C. Daul, **Density Functional Theory for the study of the multimode Jahn-Teller effect**, OC 16, p. 24, Book of Abstracts, 20th International Symposium on the Jahn-Teller Effect, Fribourg, Switzerland, **2010**.
- 5.1.27 A. S. Nikolić, Č. Jovalekić, M. Gruden-Pavlović, M. B. Pavlović, **Mechanochemical synthesis of stoichiometric nickel and nickel-zinc ferrite powders with Nicolson-Ross analysis of absorption coefficients**, SSC2010, Inorganic Materials, Posters, page 127, Book of Abstracts, Solid state chemistry 2010, Prague, September 11-15, **2010**.
- 5.1.28 M. Gruden-Pavlović, M. Zlatar, C. Daul, **Computational Study of the Jahn-Teller Effect in Cu(II) Chelate Complexes: DFT/MM Approach**, Poster 124, p. 66, Book of Abstracts, 13th Intern. Conf. On the Applic. of Density Functional Theory in Chemistry and Physics, DFT09, Lyon, France, **2009**.
- 5.1.29 S. Grubišić, M. Gruden, S. R. Niketić, **Conformational analysis of octa- and tetrahalogenated tetraphenylporphyrins and their metal derivatives**, Book of Abstracts p.119, Fifth Yugoslav Materials Research Society Conference, Herceg Novi, Jugoslavija, **2003**.
- 5.1.30 C. Rauzy, S. R. Niketić, C. Daul, M. Gruden-Pavlović, S. Grubišić, **Study of the structural and electronic properties of five-coordinate [Ni(acac)₂(py)] type complex**, Fall Meeting of the Swiss Chemical Society, Basel, Chimia, 56, No. 7/8, **2002**.
- 5.1.31 S. Grubišić, M. Gruden, S. R. Niketić, **Structural characterization and conformation analysis of (aqua)(ethylenediaminetriacetato) chromium(III) monohydrate complex**, Book of Abstracts Vol. II, p. 335, 3rd International Conference of the Chemical Societies of the South-Eastern European Countries on Chemistry in the new Millennium-an Endless Frontier, Bucharest, Romania, **2002**.
- 5.1.32 G. Jakovljević, M. Gruden-Pavlović, Ž. Tešić, D. Sladić, K. Andjelković, **Synthesis and characterization of Pd(II) and Pt(II) complexes with 2'-(1-(2-pyridinyl)-ethylidene)-oxamohydrazide (Hapsox)**, Book of Abstracts Vol. II, p.337, 3rd International Conference of the Chemical Societies of the South-Eastern European Countries on Chemistry in the new Millennium-an Endless Frontier, Bucharest, Romania, **2002**.
- 5.1.33 M. Gruden-Pavlović, A. Bacchi, G. Pelizzi, Ž. Tešić, M. Natić, K. Andjelković, **Synthesis and structural characterization bis(2'-(1-(2-pyridinyl)-ethylidene)-oxamic acido)copper(II) monohydrate monomethanol complex**, Book of Abstract Vol. I, p. 291, 3rd International Conference of the Chemical Societies of the South-Eastern European Countries on Chemistry in the new Millennium-an Endless Frontier, Bucharest, Romania, **2002**.
- 5.1.34 S. Grubišić, M. Gruden, S. R. Niketić, **Conformational analysis of EDTA-type Chromium(III) complexes with β -propionato metal chelate rings**, Book of Abstracts, Fourth Yugoslav Materials Research Society Conference, Herceg Novi, Jugoslavija, **2001**.
- 5.1.35 M. Gruden, M. Šumar, D. Jeremić, K. Andjelković, **Ni(II) complex with tridentately coordinated 2,6-bis[-(metoxycarbonylmethyl-hydrazono)ethyl]pyridine**, Book of Abstracts, p. 99, Fourth Yugoslav Materials Research Society Conference, Herceg Novi, Jugoslavija, **2001**.
- 5.1.36 M. Gruden, S. Grubišić, S. R. Niketić, **Conformational analysis of EDTA-type Chromium(III) complexes with β -propionato metal chelate rings**, Book of Abstracts, volume I, PO 224, 2nd International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries, Halkidiki, Greece, June 6-9, **2000**.
- 5.1.37 A. G. Coutsolelos, S. Grubišić, M. Gruden, S. R. Niketić, **Conformational analysis of halogenated tetraphenylporphyrins and their metal derivatives**, Book of Abstracts (53), 5th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry, Corfu, Greece, 13-17 April **1999**.
- 5.1.38 A. S. Nikolić, M. A. Gruden, S. Djurić, M. B. Pavlović, **Preparation of mixed Ni- and Co-ferrites with some trivalent ions**, Book of Abstracts (E81), First International Conference on Inorganic Materials, Versailles, France, 16-19 September **1998**.

- 5.1.39 S. R. Niketić, K. Andjelković, M. Gruden, M. Mandić, **The relationship between trans- axial angle of a tridentate chelate ligand and the angle between equatorial monodentate ligands in trigonal-bipyramidal structures**, Book of Abstracts, volume I (PO 100), 1st International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries, Halkidiki, Greece, June 1-4, **1998**.

6. Други видови ангажовања у научноистраживачком и стручном раду

6.1 Техничка решења

Кандидат нема техничка решења

6.2 Патенти:

Кандидат нема патенте

6.3 Предавања по позиву на научним скуповима:

- 6.3.1 Maja Gruden, **Spin state relaxation of iron complexes: catalytic mechanism of the intra- and extradiol cleavage of catechols by O₂**, Keynote speaker on 5th Quantum BioInorganic Chemistry Conference, Marseille, July 8-10, 2019
- 6.3.2 Maja Gruden, **Spinning around in transition metal chemistry**, Invited speaker on Multi-Scale Quantum Mechanical Analysis of Condensed Phase Systems: Methods and Applications, Jul 23-27, 2018, Telluride, CO, USA
- 6.3.3 Maja Gruden, **Density Functional Approximations for Spin-State Chemistry**, Keynote speaker on Fourth ECOSTBio scientific workshop: Prague, April 13-15, 2016
- 6.3.4 Maja Gruden-Pavlović, **Density Functional Theory for the study of the multimode Jahn-Teller effect**, Invited speaker on XXth International Symposium on the Jahn-Teller Effect 16-20th August 2010, Fribourg, Switzerland
- 6.3.5 Maja Gruden-Pavlović, **Theoretical study of the Jahn-Teller effect**, Invited speaker on 2nd Conference on Electronic, Atomic, Molecular and Photonic Physics 21-25th June 2011, Belgrade, Serbia

6.4 Остали видови ангажовања

Учешће на националним пројектима

1. „Рационални дизајн и синтеза биолошки активних и координационих једињења и функционалних материјала, релевантних у (био)нанотехнологији“ (Ев. бр. ОИ172035), 2011-2017.
2. „Хемијске и биохемијске консеквенце метал-лиганд интеракција, II. део“ (Ев. бр. ОИ142017), 2006-2011.
3. „Хемијске и биохемијске консеквенце метал-лиганд интеракција“ (Ев. бр. 1569), 2002-2006.
4. Експериментална и теоријска истраживања биолошки значајних молекула и модел система (Ев. бр. 02Е09).

Учешће на међународним пројектима

1. HORIZON2020 “Twinning of research activities for the frontier research in the fields of food, nutrition and environmental ‘omic“, FoodEnTwin, Grant agreement ID: 810752, EU: 1.09.2018-31.08.2021., WP2 Leader
2. R & D Project „CompSpec“ Ministerio de Economía y Competitividad (Madrid), 01.01.2018-31.12.2020., Grant: CTQ2017-87392-P
3. CMST COST Action CM1305 (Explicit Control Over Spin-states in Technology and Biochemistry (ECOSTBio)), 2014-2018, MC member и руководиолац WG1, члан руководионог тима.

4. "Computational Design of materials displaying room temperature magnetic bistability" (451-03-02635/2011-14/5) – билатерални пројекат између Републике Србије и Краљевине Шпаније Министарство просвете и науке РС (Београд); Ministry of Science and Innovation of the Kingdom of Spain (Мадрид, Шпанија), 2011-2012.
5. CMST COST Action CM1002 (CONvergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy (CODECS)), 2010-2014.
6. 01.01.2015-31.12.2017: R & D Project "SpinEnzymeCat" plus FPI PhD-scholarship M.A. María Solano, MINECO, CTQ2014-59212-P
7. 01.10.2013 - 30.06.2015 Project 149234 (Computational Chemistry: Description and prediction of systems containing d- and f-Elements) Swiss National Science Foundation
8. 01.10.2011 - 30.09.2013 Project 137625 (Computational Chemistry: Methods and Applications to Systems containing d- and f-elements) Swiss National Science Foundation
9. 01.10.2009 - 30.09.2011 Project 126521 (Computational Chemistry: Methods and Applications to Systems containing d- and f-elements) Swiss National Science Foundation

Руковођење међународним пројектима

1. „Development of Density Functional Theory-based tight binding (DFTB) for metalloproteins” – билатерални пројекат између Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије и Немачке служба за академску размену – ДААД, 2016-2017.
2. “Rational design, synthesis and characterization of novel single molecular magnetic materials” – билатерални пројекат научне и технолошке сарадње између републике Србије и републике Француске у оквиру Програма „ПАВЛЕ САВИЋ“, 2016-2017.

Рецензент научних радова у часописима

Chem. Soc. Rev., Int. J. Quantum Chem, RSC Adv., Phys. Chem. Chem. Phys., Inorg. Chem., ChemPhysChem, J. Serb. Chem. Soc., Monatsh. Chem., Chem. Phys. Lett., J. Mol. Struct., Angewandte Chemie, The Journal of Physical Chemistry, Inorganica Chimica Acta

Чланство у програмским комитетима научних конференција

1. Члан научног одбора 50, 53, 54. и 56. Саветовања Српског хемијског друштва, (2013, 2016, 2017, 2019)
2. Организатор и председник научног одбора – ECOSTBio Third scientific workshop+MC meeting, 24-25.8.2015, Београд
3. Организатор DFTB developer meeting – мај 2017, септембар 2018.

Сарадња са другим научним институцијама

Од јуна до децембра 2009. године др Маја Груден-Павловић је била на постдокторском усавршавању на Department of Chemistry, University of Fribourg, Швајцарска као стипендиста Министарства науке (стипендија за постдокторско усавршавање у максималном трајању од 6 месеци). Сарадњу са групом проф. Claude-a Daul-a наставила је до данас, па је у протеклим годинама десет пута боравила на поменутом Универзитету где је одржала више предавања. Др Маја Груден-Павловић сарађује и са другим групама (најважније: проф. Marcel Swart, Универзитет у Ђирони, Шпанија, проф. Marcus Elstner,

Универзитет у Карлсруеу, Немачка, др Carole Duboc, Универзитет у Греноблу, Француска, др Pablo Garcia-Fernandez - Department CITIMAC, Faculty of Science, University of Cantabria, Шпанија, проф. Wesley Browne, Универзитет у Гронингену, Холандија). На свим поменутиим Универзитетима одржала је једно или више научних предавања. Ова успешна и разграната сарадња огледа се кроз велики број заједничких публикација, и бројне посете свих поменутих професора и њихових сарадника Хемијском факултету Универзитета у Београду. У априлу 2019. године била је један од организатора посете 16 студената докторских студија и 3 професора са Stratingh Institute for Chemistry, University of Groningen који су заједно са студентима докторских студија Хемијског факултета Универзитета у Београду одржали дводневни симпозијум. О међународном угледу кандидаткиње говоре и писма препоруке професора са 6 реномираних универзитета у свету (писма препоруке у прилогу). Осим тога, др Маја Груден-Павловић сарађује и са више експерименталних истраживачких група на Хемијском факултету Универзитета у Београду.

Ђ. Остале релевантне активности

- др Маја Груден-Павловић била је више пута члан уписне комисије Хемијског факултета, била је члан, као и председник Комисије за вредновање педагошког рада наставника на Хемијском факултету Универзитета у Београду, учествовала је у организацији градског такмичења из хемије за ученике основних и средњих школа, а била је и члан Републичке комисије за такмичење ученика средњих школа из хемије, у организацији Српског хемијског друштва и Министарства просвете и науке. Обављала је послове секретара Катедре за општу и неорганску хемију, а била је, као представник Катедре за општу и неорганску хемију, и члан Савета Хемијског факултета.
- 2011. године положила је испит за предавача за саветника за хемикалије.
- Члан је Српског Хемијског друштва, члан управног одбора СХД-а, а од 2018. и члан Председништва СХД-а
- Члан је Управног одбора Задужбине Илије М. Коларца
- Координатор за међународну сарадњу на Хемијском факултету 2011-2013.
- Продекан за науку и међународну сарадњу Хемијског факултета од 19. 5. 2013. до 30. 9. 2015.
- Супервизор ХемНет-а од 1. 3. 2017

Награде/признања/стипендије

- Стипендија Министарства науке Републике Србије за постдокторско усавршавање (Fribourg, Швајцарска), 2009
- SCOPES финансирање за предавача по позиву на XX Интернационалном Симпозијуму о Jahn-Teller-овом Ефекту 16-20 август 2010, Fribourg, Швајцарска
- Похвалница Хемијског факултета за допринос у развоју Хемијског факултета, Београд, (2015)
- Награда „Веселина Лучића” за 2017. годину за најбоље научно остварење наставника и сарадника Универзитета у Београду, објављено у 2016. години

Писма препоруке

Реномирани професори и научници из иностранства, проф. Qiang Cui - Универзитет у Бостону, др Carole Duboc, научни саветник са Универзитета Grenoble Alpes, проф. Wesley R. Browne, са Универзитета у Гронингену, проф. Marcus Elstner – КИТ, проф. Darrin York са Rutgers State University of New Jersey и проф. Marcel Swart са универзитета у Тирони су кроз писма препоруке оценили знање, залагање, рад, научне резултате и свеукупну сарадњу са др Мајом Груден-Павловић изузетним, и дали документовану подршку за њен избор у звање редовног професора. Ова писма се налазе у прилогу реферата.

ИЗБОРНИ УСЛОВИ

Табела: Изборни услови за избор у сва наставничка звања

<i>(најмање 2 од 3 услова)</i>	<i>Заокружити ближе одреднице (најмање по једна из 2 изабрана услова)</i>
Стручно-професионални допринос	<ol style="list-style-type: none"> 1. Председник или члан уређивачког одбора научних часописа или зборника радова у земљи или иностранству. 2. Рецензент у водећим међународним часописима, или рецензент међународних или националних научних пројеката. 3. Председник или члан организационог или научног одбора на научним скуповима националног или међународног нивоа. 4. Председник или члан комисија за израду завршних радова на академским основним, мастер или докторским студијама. 5. Руководилац или сарадник на домаћим или међународним научним пројектима. 6. Аутор/коаутор прихваћеног патента, техничког унапређења или иновације. 7. Писма препоруке.
Допринос академској и широј заједници	<ol style="list-style-type: none"> 1. Чланство у страним или домаћим академијама наука, или чланство у стручним или научним асоцијацијама у које се члан бира. 2. Председник или члан органа управљања, стручног органа или комисија на факултету или универзитету у земљи или иностранству. 3. Члан националног савета, стручног, законодавног или другог органа и комисије министарства. 4. Учешће у наставним активностима ван студијских програма, високошколске установе (перманентно образовање, курсеви у организацији професионалних удружења, и институција, програми едукације наставника) или у активностима популаризације науке. 5. Домаће или међународне награде и признања у развоју образовања и науке. 6. Социјалне вештине (поседовање комуникационих способности, способности за презентацију, способности за тимски рад и вођење тима). 7. Способност писања пројектне документације и добијања домаћих и међународних научних и стручних пројеката).
Сарадња са високошколским, научно-истраживачким установама, односно установама културе или уметности у земљи или иностранству	<ol style="list-style-type: none"> 1. Постдокторско усавршавање или студијски боравци у иностранству. 2. Руковођење или учешће у међународним научним или стручним пројектима или студијама. 3. Радно ангажовање у настави или комисијама на другим високошколским или научноистраживачким установама у земљи или иностранству, или звање гостујућег професора, или истраживача. 4. Руковођење или чланство у органу професионалног удужења или организацији националног или међународног нивоа. 5. Учешће у програмима размене наставника и студената. 6. Учешће у изради и спровођењу заједничких студијских програма. 7. Предавања по позиву на универзитетима у земљи или иностранству.

Е. Закључци и препоруке комисије

На основу анализе поднетог материјала и личног увида у рад кандидаткиње Комисија констатује да је др Маја Груден-Павловић у свом досадашњем раду постигла изванредне резултате у наставном и научно-истраживачком раду.

У настави, она је показала посвећеност, склоност и способност за успешан рад са студентима на свим нивоима: од елементарног (прва и друга година), где је потребно велико педагошко искуство, до високо специјализованог (четврта година, мастер и докторске студије), где је потребно дубље познавање ужих научних дисциплина на вишем нивоу. Рад кандидаткиње студенти су вредновали оценама од 4,22 до 5,00 за предмете за које је задужена, у току последњих 5 година. Коаутор је Практикума из хемије за студенте прве године Хемијског факултета, који је основна литература за предмет *Практикум из Опште хемије* и аутор монографије Спинска стања у комплексима прелазних метала – Примена теорије функционала густине, чији делови су намењени студентима мастер и докторских студија на предметима за које је кандидаткиња задужена. У развоју научног подмлатка кандидаткиња је у претходном периоду показала добре резултате, што се види из броја докторских и мастер теза на којима је била или је тренутно ментор. Осим тога, др Маја Груден-Павловић је учествовала и у комисијама за мастер тезе и докторске дисертације и на иностраним универзитетима, а држала је и предавања студентима мастер студија у Фрибуру и Лиону, као и студентима докторских студија у оквиру две летње школе.

Научна делатност кандидата др Маје Груден-Павловић обухвата истраживања у области опште и неорганске хемије, тј. теоријске хемије. По повратку на Хемијски факултет Универзитета у Београду са студијског боравка на Универзитету у Фрибуру, самостално наставља истраживања у овој области, а данас успешно сарађује са неколико академских група у Европи и САД, као и са експерименталним групама на Хемијском факултету. Изузетни резултати које је постигла у својој области најбоље се виде не само у броју, већ и у квалитету до сада публикованих научних радова.

Коаутор је **71** рада у међународним научним часописима (10 M21a, 25 M21, 23 M22, 13 M23) и **три** поглавља у истакнутим монографијама међународног значаја (3 M₁₃) и аутор монографије „Спинска стања у комплексима прелазних метала – Примена теорије функционала густине“. У периоду од избора у звање ванредног професора кандидаткиња је објавила монографију, два поглавља у научној књизи, четрдесеттри (43) научна рада у међународним часописима (10 категорије M21a, 19 категорије M21, 10 категорије M22 и 4 категорије M23). Према бази података *Scopus* (на дан 03.06.2019) h индекс је 13, а сви до сада објављени радови у којима је Маја Груден-Павловић један од аутора цитирани су 450 пута без аутоцитата. На 23 рада била је аутор одговоран за кореспонденцију.

Одржала је пет предавања по позиву на међународним научним скуповима, као и већи број предавања на универзитетима у Европи и међународним конференцијама. Др Маја Груден-Павловић перманентно, од дипломирања до данас, учествује на научним пројектима Министарства за науку Србије, руководила је билатералним пројектима са Француском и Немачком, у оквиру COST Акције 1305 била је руководилац радне групе, а тренутно је ангажована на пројекту HORIZON2020 “Twining of research activities for the frontier research in the fields of food, nutrition and environmental ‘omic“ као руководилац радног пакета.

Организатор је два међународна скупа, а активна је и у раду факултетских органа.

Добитник је и награде „Веселина Лучића“ за 2017. годину за најбоље научно остварење наставника и сарадника Универзитета у Београду, објављено у 2016. години.

Својим досадашњим радом на Хемијском факултету показала је висок степен посвећености настави, научном раду и матичној институцији.