

**Универзитет у Београду**  
**Институт за хемију, технологију и металургију ИХТМ**  
**Институт од националног значаја за Републику Србију**  
**Његошева 12, 11000 Београд:**

## **НАУЧНОМ ВЕЋУ ИНСТИТУТА ЗА ХЕМИЈУ, ТЕХНОЛОГИЈУ И МЕТАЛУРГИЈУ**

Научно веће Универзитета у Београду, Института за хемију, технологију и металургију (ИХТМ), Института од националног значаја за Републику Србију, именовало нас је одлуком број 1119 донетој на 85-тој електронској седници одржаној 26.08.2023. године за чланове Комисије за писање реферата за избор др Катарине Симић у звање научни сарадник. На основу достављене документације о научноистраживачком раду кандидаткиње, у складу са Законом о науци и истраживању подносимо следећи:

### **ИЗВЕШТАЈ**

#### **1. БИОГРАФСКИ ПОДАЦИ**

Катарина З. Симић је рођена 29. јула 1994. године у Смедереву. Основну школу и гимназију (смер: природно-математички) завршила је у Смедереву. Универзитет у Београду - Хемијски факултет, студијски програм Хемија, уписала је 2013. године, а завршила 2017. године, са просечном оценом 8,66 (8 и 66/100) и оценом 10 за завршни рад под насловом „Испитивање испарљивих компоненти шљивове ракије од сорти црвена ранка, пожегача и трновача“. Током основних академских студија, волонтирала је четири месеца у Центру за инструменталну анализу при Хемијском факултету. Мастер академске студије при Катедри за органску хемију, уписала је школске 2017. године на Хемијском факултету Универзитета у Београду и завршила 2018. године са просечном оценом 9,75 (9 и 75/100) и оценом 10 за завршни рад под насловом „Карактеризација шљивове ракије од сорти пожегача, црвена ранка и трновача применом гасне хроматографије и мултиваријанте анализе“. Докторске академске студије при Катедри за органску хемију, уписала је 2018. године на Хемијском факултету Универзитета у Београду. Докторску дисертацију под насловом „Метаболомичко испитивање биомаркера у серуму оболелих од схизофреније и биполарног афективног поремећаја“ одбранила је 12.07.2024. и тиме стекла титулу доктора хемијских наука финализирајући докторске студије са просечном оценом на студијама 10,00 и оценом 10 за дисертацију.

Од новембра 2018. године до јуна 2021. године била је запослена као истраживач-приправник на Универзитету у Београду – Институту за хемију, технологију и металургију, Центар за хемију. Од јуна 2021. године до данас запослена је као истраживач сарадник у истој институцији. Од 2020. године ангажована је као сарадник на пословима аналитичара на NMR инструменту, акредитоване лабораторије Центра за хемију. Од 2018. до 2019. године била је ангажована на пројекту „Биоактивни природни производи самониклих, гајених и јестивих биљака: одређивање структуре и активности“, пројекат број 172053 (руководилац др Дејан

Гођевац, научни саветник Универзитета у Београду - ИХТМ, Центар за хемију). Поред тога била је ангажована и на међународним пројектима MECWA FCUB CIA, OPCW L/ICA/ICB/210502/17; CIA p-LABs, Twinning VERIFIN CIA, OPCW/L/ICA/ICB-75/21. У априлу 2022. године боравила је на VERIFIN Институту Универзитета у Хелсинкију.

Током докторских студија, паралелно са научно-истраживачким радом, учествовала је у извођењу вежби при Катедри за органску хемију Универзитета у Београду, Хемијског факултета на предметима Структурне инструменталне методе (221A2 и 221B2).

## 2. БИБЛИОГРАФСКИ ПОДАЦИ

Др Катарина Симић је коаутор на 15 научних радова са SCI листе цитираних 54 пута без аутоцитата, h индекс = 4 (подаци о цитираности су преузети из *Scopus* базе података дана 16.07.2023.). Од тога четири рада у врхунским међународним часописима (M21), пет радова у истакнутим међународним часописима (M22), шест радова у међународним часописима (M23). Кандидаткиња има и седам саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34) и три саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (M64). Поред наведених библиографских јединица, кандидаткиња је објавила и два рада у часописима од националног значаја, M52 и M54.

**ORCID број:** 0000-0001-5060-8936

**Репозиторијум:**

[https://cer.ihm.bg.ac.rs/APP/faces/author.xhtml?author\\_id=orcid%3A%3A0000-0001-5060-8936&item\\_offset=0&project\\_offset=0&sort\\_by=dc.date.issued](https://cer.ihm.bg.ac.rs/APP/faces/author.xhtml?author_id=orcid%3A%3A0000-0001-5060-8936&item_offset=0&project_offset=0&sort_by=dc.date.issued)

**Scopus ID:** 57217222547

### 1. Радови објављени у међународним часописима; научна критика, уређивање часописа

**Укупно: M20 = 67,34    Укупно ИФ: 50,978**

#### Радови у врхунским међународним часописима (M21= 8; $3 \times 8 + 1 \times 6,67 = 30,67$ ):

1.1 Ljujić, J.; Vujisić, L.; Tešević, V.; Sofrenić, I. V.; Ivanović, S.; **Simić, K.**; Anđelković, B. Critical Review of Selected Analytical Platforms for GC-MS Metabolomics Profiling - Case Study: HS-SPME/GC-MS Analysis of Blackberry's Aroma. *Foods* **2024**, *13*(8), 122. <https://doi.org/10.3390/foods13081222>.

ИФ: 5,500 (2022)

Област: Food Science & Technology (33/142)

Цитираност (без аутоцитата): /

Број аутора: 7 (M21 = 1 x 8 = 8,00)

- 1.2. Sofrenić, I.; Anđelković, B.; Gođevac, D.; Ivanović, S.; **Simić, K.**; Ljujić, J.; Tešević, V.; Milosavljević, S. Metabolomics as a Potential Chemotaxonomical Tool: Application on the Selected Euphorbia Species Growing Wild in Serbia. *Plants* **2023**, *12*, 262, <https://doi.org/10.3390/plants12020262>.

ИФ: 4,827 (2021)

Област: Plant Sciences (45/240)

Цитираност (без аутоцитата): 1

Број аутора: 8 ( $M21 = 1 \times (8 / (1 + 0,2 \times (8-7))) = 6,67$ )

- 1.3. Gođevac, D.; Ivanović, S.; **Simić, K.**; Anđelković, B.; Jovanović, Ž.; Rakić, T. Metabolomics Study of the Desiccation and Recovery Process in the Resurrection Plants *Ramonda serbica* and *R. nathaliae*. *Phytochem. Anal.* **2022**, *33*, 961, <https://doi.org/10.1002/pca.3151>.

ИФ: 3.373 (2020)

Област: Plant Sciences (61/235)

Цитираност (без аутоцитата): 4

Број аутора: 6 ( $M21 = 1 \times 8 = 8,00$ )

- 1.4. Aćimović, M.; Ivanović, S.; **Simić, K.**; Pezo, L.; Zeremski, T.; Ovuka, J.S.; Sikora, V.Š. Chemical Characterization of *Marrubium Vulgare* Volatiles from Serbia. *Plants* **2021**, *10*(3), 600. <https://doi.org/10.3390/plants10030600>.

ИФ (петогодишњи): 4,827 (2021)

Област: Plant Sciences (45/240)

Цитираност (без аутоцитата): 8

Број аутора: 7 ( $M21 = 1 \times 8 = 8,00$ )

**Радови у истакнутим међународним часописима (M22=5;  $2 \times 5 + 1 \times 4,17 + 2 \times 2,5 = 19,17$ ):**

- 1.5. **Simić, K.**; Miladinović, Z.; Todorović, N.; Trifunović, S.; Gavrilović, A.; Jovanović, S.; Avramović, N.; Gođevac, D.; Vujisić, L.; Tešević, V.; Tasić, Lj.; Mandić, B. Metabolomic Profiling of Bipolar Disorder by <sup>1</sup>H-NMR in Serbian Patients. *Metabolites*, **2023**, *13*, 607, <https://www.mdpi.com/2218-1989/13/5/607>

ИФ: 5.581 (2021)

Област: Biochemistry & Molecular Biology (90/297)

Цитираност (без аутоцитата): 4

Број аутора: 12 ( $M22 = 1 \times (5 / (1 + 0,2 \times (12-7))) = 2,5$ )

- 1.6. **Simić, K.**; Todorović, N.; Trifunović, S.; Miladinović, Z.; Gavrilović, A.; Jovanović, S.; Avramović, N.; Gođevac, D.; Vujisić, L.; Tešević, V.; Tasić, Lj.; Mandić, B. NMR Metabolomics in Serum Fingerprinting of Schizophrenia Patients in a Serbian Cohort. *Metabolites*, **2022**, 12, 707, <https://www.mdpi.com/2218-1989/12/8/707>

ИФ: 5,581 (2021)

Област: Biochemistry & Molecular Biology (90/297)

Цитираност (без аутоцитата): 9

Број аутора: 12 ( $M22 = 1 \times (5 / (1 + 0,2 \times (12-7))) = 2,5$ )

- 1.7. Ivanović, S.; **Simić, K.**; Lekić, S.; Jadranin, M.; Vujisić, L. V.; Gođevac, D. Plant Metabolomics as a Tool for Detecting Adulterants in Edible Plant: A Case Study of *Allium ursinum*. *Metabolites* **2022**, 12(9), 849. <https://doi.org/10.3390/metabo12090849>.

ИФ: 5,581 (2021)

Област: Biochemistry & Molecular Biology (90/297)

Цитираност (без аутоцитата): 2

Број аутора: 6 ( $M22 = 1 \times 5 = 5,00$ )

- 1.8. Ivanović, S.; **Simić, K.**; Tešević, V.; Vujisić, L.; Ljekočević, M.; Gođevac, D. GC-FID-MS Based Metabolomics to Access Plum Brandy Quality. *Molecules* **2021**, 26, 1391, <https://doi:10.3390/molecules26051391>.

ИФ (петогодишњи): 5,110 (2021)

Област: Chemistry, Multidisciplinary (61/180)

Цитираност (без аутоцитата): 15

Број аутора: 6 ( $M22 = 1 \times 5 = 5,00$ )

- 1.9. Novaković, M.; Plić-Tomić, T.; Tešević, V.; **Simić, K.**; Ivanović, S.; Simić, S.; Opsenica, I.; Nikodinović-Runić, J. Bisaurones-Enzymatic Production and Biological Evaluation. *New J. Chem.* **2020**, 44, 9647-9655. <https://doi.org/10.1039/D0NJ00758G>.

ИФ: 3,591 (2020)

Област: Chemistry, Multidisciplinary (75/178)

Цитираност (без аутоцитата): 1

Број аутора: 8 ( $M22 = 1 \times (5 / (1 + 0,2 \times (8-7))) = 4,17$ )

**Радови у међународним часописима (M23= 3; 5x3,00 + 2,50 = 17,50):**

- 1.10. Aćimović, M.; Šeregelj, V.; **Simić, K.**; Varga, A.; Pezo, L.; Vulić, J.; Čabarkapa, I. Chemical profile of *Nepeta cataria* L. var. *Citriodora* (Becker) essential oil and in vitro evaluation of biological activities. *Acta Scientiarum Polonorum Hortorum Cultus* **2022**, <https://doi.org/10.24326/asphc.2022.4.7>

ИФ: 1,000 (2022)

Област: Horticulture (28/36)

Цитираност (без аутоцитата): 2

Број аутора: 7 ( $M23 = 1 \times 3 = 3,00$ )

- 1.11. Jeremić, J.S.; Gođevac, D.; Ivanović, S.; **Simić, K.**; Trendafilova, A.; Aćimović, M.; Milosavljević, S. HPTLC-based metabolomics for the investigation of metabolic changes during plant development: The case study of *Artemisia annua*. *J. Serbian Chem. Soc.* **2022**, 87(11), 1237-1244. <https://doi.org/10.2298/JSC210507007S>

ИФ: 1,240 (2020)

Област: Chemistry, Multidisciplinary (141/178)

Цитираност (без аутоцитата): 1

Број аутора: 7 ( $M23 = 1 \times 3 = 3,00$ )

- 1.12. Sofrenić, I. V; Ljujić, J.; **Simić, K.**; Ivanović, S.; Stanković-Jeremić, J.; Ćirić, A.; Soković, M.; Anđelković, B. Application of LC-MS/MS with ion mobility for chemical analysis of propolis extracts with antimicrobial potential. *J. Serbian Chem. Soc.* 2021, 86(12), 1205-1218. <https://doi.org/10.2298/JSC210812086S>

ИФ: 1,240 (2020)

Област: Chemistry, Multidisciplinary (141/178)

Цитираност (без аутоцитата): 3

Број аутора: 8 ( $M23 = 1 \times (3 / (1 + 0,2 \times (8-7))) = 2,50$ )

- 1.13. Ivanović, S.; Mandrone, M.; **Simić, K.**; Ristić, M.; Todosijević, M.; Mandić, B.; Gođevac, D. GC-MS-Based Metabolomics for the Detection of Adulteration in Oregano Samples. *J. Serbian Chem. Soc.* 2021, 86 (12), 1195-1203. <https://doi.org/10.2298/JSC210809089I>.

ИФ: 1,240 (2020)

Област: Chemistry, Multidisciplinary (141/178)

Цитираност (без аутоцитата): 4

Број аутора: 7 ( $M23 = 1 \times 3 = 3,00$ )

- 1.14. Đorđević, I.; Cvetković, M.; Jadranin, M.; Bojović, S.; Andjelković, B.; Sofrenić, I.; **Simić, K.** Phytochemical study of the genus *amphoricarpus*. *J. Serbian Chem. Soc.* **2021**, 86, 12. <https://doi.org/10.2298/JSC210726083D>

ИФ: 1,240 (2021)

Област: Chemistry, Multidisciplinary (141/178)

Цитираност (без аутоцитата): /

Број аутора: 7 ( $M23 = 1 \times 3 = 3,00$ )

- 1.15. Mandić, B.; **Simić, K.**; Trifunović, S.; Vujisić, Lj.; Novaković, M.; Tešević, V.; Miljanić, O. Inhibition potency of disulphides and trisulphides on various tumor cell lines growth. *Digest J. Nanomater. Biostruct.* **2021**, 16, 2, <http://dx.doi.org/10.15251/djnb.2021.162.585>.

ИФ: 1,047 (2020)

Област: Material Science, Multidisciplinary (290/334)

Цитираност (без аутоцитата): /

Број аутора: 7 ( $M23 = 1 \times 3 = 3,00$ )

## 2. Зборници међународних научних скупова (M30)

Укупно M30: 3,00

Радови саопштени на скупу међународног значаја, штампани у изводу (M34 = 0,5;  $5 \times 0,5 + 2 \times 0,25 = 3,00$ )

- 2.1. Avramović, N.; **Simić, K.**; Miladinović, Z.; Todorović, N.; Trifunović, S.; Gavrilović, A.; Jovanović, S.; Gođevac, D.; Vujisić, Lj.; Tešević, V.; Tasic, Lj.; Mandić, B. <sup>1</sup>H-NMR-based serum metabolomics of bipolar disorder patients, *IAPC-10 Meeting*, 4<sup>th</sup> – 6<sup>th</sup> September **2023**, Belgrade, Serbia, st. 67, <https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/7390>.

Број аутора: 12 ( $M34 = 1 \times (0.5 / (1 + 0,2 \times (12-7))) = 0,25$ )

- 2.2. Avramović, N.; **Simić, K.**; Miladinović, Z.; Todorović, N.; Trifunović, S.; Gavrilović, A.; Jovanović, S.; Gođevac, D.; Vujisić, Lj.; Tešević, V.; Tasic, Lj.; Mandić, B. <sup>1</sup>H-NMR metabonomic view on schizophrenia, *IAPC-10 Meeting*, 4<sup>th</sup> – 6<sup>th</sup> September **2023**, Belgrade, Serbia, st. 68, <https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/7392>.

Број аутора: 12 ( $M34 = 1 \times (0.5 / (1 + 0,2 \times (12-7))) = 0,25$ )

- 2.3. Ivanović, S.; Gođevac, D.; **Simić, K.**; Anđelković, B.; Jovanović, Ž.; Rakić, T. NMR metabolomics study of the desiccation and recovery process in the resurrection plants *Ramonda serbica* and *Ramonda nathaliae*. *14<sup>th</sup> Symposium on the Flora of Southeastern Serbia and Neighboring Regions*, 26<sup>th</sup> – 29<sup>th</sup> June **2022**, Kladovo, Serbia str. 171. ISBN: 978-86-6275-140-9 <https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/5522>

- 2.4. Anđelković, B.; Sofrenić, I.; Ljujić, J.; **Simić, K.**; Ivanović, S.; Gođevac, D.; Tešević, V. FT-IR Spectroscopy as a Simple Tool for Rapid Solution of Various Problems. *XII Young Investigator Workshop*. 25<sup>th</sup> – 26<sup>th</sup> November **2021**, Barcelona, Spain, str. 35. <https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/5528>

- 2.5. Anđelković, B.; Gođevac, D.; Stanković, J.; Cvetcović, M.; Tešević, V.; Milosavljević, S.; **Simić K.** Integration of dry-column flash chromatography with NMR and FTIR metabolomics to reveal cytotoxic metabolites from *Amphoricarpos autariatus*. 5<sup>th</sup>

*International Caparica Christmas Conference on Sample Treatment*, 15<sup>th</sup> – 18<sup>th</sup> November 2021, Lisabon, Portugal, str. 148. ISBN: 978-989-53350-0-8  
<https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/5526>

- 2.6. Sofrenić, I.; Ljujić, J.; **Simić, K.**; Kukić-Marković, J.; Ivanović, N.; Dodevska, M.; Phytosterol composition of selected nuts and seeds from the Serbian market, *International Bioscience Conference and the 8th International PSU – UNS Bioscience Conference*, 25<sup>th</sup> – 26<sup>th</sup> November, **2021**, Novi Sad, Srbija, str. 229.  
<https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/7394>
- 2.7. Gođevac, D.; **Simić, K.**; Ivanović, S.; Anđelković, B.; Jovanović, Ž.; Rakić, T. GC-MS Based Metabolomics Study of the Resurrection Plant *Ramonda serbica*. Book of abstracts, *4<sup>th</sup> Internatinal conference on natural products utilisation: from plants to pharmacy shelf*, 29<sup>th</sup> May – 1<sup>st</sup> June **2019**, Albena, Bulgaria, str. 189-190. ISSN: 2682-9487  
<https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/5524>

### 3. Радови у часописима националног значаја (M50)

**Укупно M50: 1,27**

**Рад у истакнутом националном часопису (M52 =1; 1x1,07=1,07):**

- 3.1. Aćimović, M.; Jeremić, J.S.; Simić, K.; **Ivanović, S.**; Ljujić, J.; Čabarkapa, I.; Radojčević, M.; Todosijević, M.; Cvetković, M. Essential Oil Quality of Chamomile Grown in Province of Vojvodina. *Letop. naučnih Rad. Poljopr. Fak. Novi Sad* 2021, 45(1), 1-8 ISSN 0546-8264

ИФ: /

Област: /

Цитираност (без аутоцитата):

Број аутора: 9 (M52 = 1 x (1,5 / (1 + 0,2 x (9-7))) = 1,07)

**Рад у националном часопису (M54 = 0,2; 1x0,2=0,2):**

- 3.2. Aćimović, M.; Pezo, L.; Ivanović, S.; **Simić, K.**; Ljujic, J. Essential Oil Profile of *Origanum Vulgare* Subsp. *Vulgare* Native Population from Rtanj via Chemometrics Tools. *Chem. Naissensis* 2020, 3(2), 100-116. ISSN: 2620-1895  
<https://doi.org/10.46793/ChemN3.2.100A>

ИФ: /

Област: /

Цитираност (без аутоцитата):

Број аутора: 5

### 4. Зборници националних научних скупова (M60)

**Укупно M60: 0,47**

**Радови саопштени на скупу националног значаја штампани у изводу (M64= 0,2; 2x0,20 + 1x0,07 = 0,47):**

- 4.1. **Simić, K.**; Ivanović, S.; Trifunović, S.; Mandić, B. Serum Biomarkers of Schizophrenia. Book of abstracts of the 8<sup>th</sup> Conference of Young Chemists of Serbia, 29<sup>th</sup> October 2022, Belgrade, Serbia, str. 114. ISBN 978-86-7132-080-1 <https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/5552>.
- 4.2. Ivanović, S.; **Simić, K.**; Lekić, S.; Gođevac, D. Detection of biomarkers of adulterated *Allium ursinum* with *Convallaria majalis* and *Arum maculatum*, Book of abstracts of the 8<sup>th</sup> Conference of Young Chemists of Serbia, 29<sup>th</sup> October 2022, Belgrade, Serbia, str. 111. ISBN 978-86-7132-080-1 <https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/5523>.
- 4.3. **Simić, K.**; Todorović, N.; Miladinović, Z.; Ivanović, S.; Trifunović, S.; Vujisić, Lj.; Tešević, V.; Jovanović, V.; Avramović, N.; Gavrilović, A.; Jovanović, S.; Costa, T.; Huan Liu, L.; Barros, P.; Stanišić, D.; Mandić, B.; Tasić, Lj. Evaluation of the universality of NMR metabolic fingerprints of schizophrenia. Book of abstracts, 21<sup>th</sup> Annual Central European NMR Symposium & Bruker users meeting, Belgrade, Serbia, 4<sup>th</sup> – 5<sup>th</sup> September 2019. ISBN 978-86-7220-100-0 <https://cer.ihtm.bg.ac.rs/handle/123456789/7536>.

Број аутора: 17 ( $M64 = 1 \times (0.2 / (1 + 0,2 \times (17-7))) = 0,07$ )

### 5. Одбрањена докторска дисертација (M70 = 6)

5.1. Katarina Z. Simić, „Metabolomičko ispitivanje biomarkera u serumu obolelih od shizofrenije i bipolarnog afektivnog poremećaja“, Doktorska disertacija, Hemijski fakultet, Univerzitet u Beogradu, jul 2024

Укупно: M = M21a + M21 + M22 + M23 + M34 + M64 + M70 = 78,08

Укупан ИФ: 50,978

### 3. АНАЛИЗА ОБЈАВЉЕНИХ РАДОВА

Досадашњи научноистраживачки рад кандидаткиње доминантно је фокусиран на примену различитих инструменталних техника, у комбинацији са мултиваријантном анализом, чиме је омогућена бржа и ефикаснија анализа потенцијалних биомаркера. Једна од темељних инструменталних техника у њеном раду је нуклеарно-магнетно резонантне спектроскопије, NMR. Поред наведене технике, кандидаткиња се успешно бави развојем и применом осталих инструменталних техника попут инфрацрвене спектроскопије, гасне и течне хроматографије, у циљу оптимизације услова за одређивање потенцијалних метаболита.

Предмет истраживања рада **M21 (1.1.)** је примена различитих аналитичких платформи за обаду и анализу података, различитих сорти купина, добијених GC-MS анализом. У овој студији одабране су три аналитичке платформе, SpectConnect, XCMS и MestReNova. Поред поменутих платформи, урађена је и ручна анализа добијених података. Добијени подаци су даље обрађени за мултиваријантну анализу и креирање PCA и OPLS-DA модела, који су детаљно анализирани.

У оквиру рада **M21 (1.2.)** коришћен је метаболомички приступ заснован на <sup>1</sup>H NMR подацима у циљу одређивања хемотаксономије одабраних врста рода Euphorbia.



Хемотаксономија представља изазов услед појединачних генетских и еколошких варијација које могу дати погрешну слику и довести до погрешних закључака. На основу добијених модела и одређивања значајних варијабли за сваку врсту, показано је да се метаболомичка анализа може успешно користити у хемотаксономији биљних врста из рода *Euphorbia*.

У раду **M21 (1.3.)** коришћена је комбинације две технике,  $^1\text{H}$  NMR и GC-MS, за добијање потпуније слике метаболичког профила током процеса исушивања и опоравка две биљне врсте, *Ramonda serbica* и *R. Nathaliae*. Наведене биљке су познате по својој изузетној способности да преживе потпуно исушивање својих вегетативних органа и брзо се опораве након рехидратације. Резултати добијени коришћењем наведених техника у комбинацији са мултиваријантном анализом, показали су да је у току процеса дехидратације примећено смањење садржаја фруктозе, галактозе и галактинола, док је садржај рафинозе и миоинозитола доминантан у сувим узорцима.

Рад **M21 (1.4.)** био је посвећен испитивању космополитске лековите биљке *Marrubium vulgare* из породице *Lamiaceae* која садржи веома разнолике групе секундарних метаболита. Испарљиве материје испитиване су током две године, 2019. и 2020. где је идентификовано 160 једињења. Главне компоненте припадају класи сесквитерпенских угљоводоника и доминантне су у обе испитиване године. Поред анализе испарљивих компоненти, ова рад је имао за циљ добијање валидних модела за предвиђање индекса задржавања. Коефицијент детерминације показао је да се ови модели могу користити за предвиђање индекса. Рад **M23 (1.10.)** бави се сличном тематиком, као претходно описани рад. У овом раду је GC-MS анализом испитиван хемијски састав етеричног уља из надземног дела *Nepeta cataria* L. var. *Citriodora*. Након тога, етерично уље је испитивано како би се утврдило његово антимикуробно, антиоксидативно, антихипергликемијско и антиинфламаторно дејство. Антимикуробна активност тестирана је применом методе микродилуционирања бујона на 16 бактеријских сојева, док су за антиоксидативну активност коришћени добро познати тестови.

Радови **M22 (1.5.)** и **M22 (1.6.)** били су кључни део истраживања у оквиру докторске дисертације кандидаткиње. У овим радовима приказана је метаболомичка студија заснована на анализи  $^1\text{H}$  NMR експеримената узорака серума оболелих од схизофреније и биполарног афективног поремећаја са подручја Републике Србије. Сложеност ових болести, укључујући различите генетске, еколошке и биохемијске факторе ствара значајне потешкоће у разумевању настанка болести и њене дијагностике. Потенцијалну помоћ у превазилажењу ових проблема представља идентификација биомаркера за сваку болест појединачно. Применом NMR спектроскопије и мултиваријантне анализе, идентификовано је 22 метаболита у серуму оболелих од биполарног поремећаја, а 26 у серуму оболелих од схизофреније. Сет биомаркера који укључује треонин, аспартат,  $\gamma$ -аминобутерну киселину, 2-хидроксибутерну киселину, серин и манозу је први пут пријављен у узорцима серума оболелих од биполарног поремећаја. Што се тиче серума оболелих од схизофреније,

успостављени сет биомакера који су први пут пријављени састоји се од четири биомакера и то аспартата, лизина, 2-хидроксибутерне киселине и ацилглицерола. Резултати проистекли из ових радова указују на веома успешну примену NMR спектроскопије за одређивање потенцијалних биомаркера неведених менталних обољења.

Као и у претходно наведеним радовима и у оквиру рада **M22 (1.7.)** коришћена је  $^1\text{H}$  NMR метаболомичка анализа за откривање алдутеранта биљке *Allium ursinum*. Како би се опонашали узорци фалсификовања, узоцима *A. ursinum* додате су биљке *C. majalis* и *A. Maculatum*, као најчешћи адултеранти. На основу добијених резултата, једињења изовитексин, виценин II, азетидин-2-карбоксилна киселина и тригонелин указала су на фалсификовање узорка са *C. Majalis*, док је изовитексин такође препознат као индикатор фалсификовања узорка са *A. Maculatum*. Слична методологија коришћења је и у раду **M23 (1.13.)**. Циљ поменутог рада је одређивање биомаркера оригана фалсификованим листовима маслине, венецијанског сумака и мирте. Оригано, као једана од најчешће коришћених кулинарских биљака често је предмет фалсификовања и комбинује се са знатно јефтинијим биљкама. Применом GC-MS анализе у комбинацији са мултиваријантном анализом добијен је метаболомички профил, односно маркери фалсификовања на основу мешања узорака оригана и поменутих адултераната. Различита концентрација сорбитола била је основ за разликовање узорака оригана фалсификованих листовима маслине, док је шикиминска киселина препозната као дискриминација за фалсификовање оригана са венецијанским сумаком. Ниво фруктозе био је у корелацији са фалсификовањем оригана са миртом.

Резултати истраживања представљени у раду **M22 (1.8.)** обухватили су процену квалитета алкохолног пића, шљивове ракије добијене применом три различите сорте. Хемијски профил добијен GC-FID-MS анализом и мултиваријантном анализом промogli су откривању значајности различитих сорти и процеса ферментације. Такође део овог рада представља корелација хемијског састава ракије са сензорним оценама добијеним од стране стручне комисије. Резултати проистекли из овог рада потврдили су потенцијал примене GC-FID-MS анализе у процени квалитета шљивове ракије.

Радови **M22 (1.9.)** и **M23 (1.14.)** заснивају се на класичним приступима фитохемијског испитивања и идентификацији нових, биолошки активних једињења. У раду **M22 (1.9.)** приказан је процес биотрансформације сулфуретина, где је помоћу карактеристичних ензима добијен димера аурон сулфуретина. Добијена једињења су изолована коришћењем семипрепаративне HPLC методе и окарактерисана детаљном  $^1\text{H}$  NMR анализом. Производи биотрансформације су покзали нижу цитотоксичност и већа антиоксидативна својства. Рад **M23 (1.14.)** се бави проучавањем секундарних метаболита рода *Amphoricarpos*. Два основна циља фитохемијског испитивања су изоловање и идентификација биолошки активних једињења – потенцијалних лекова и хемотаксономија одређених врста, што је и приказано у овом раду на примеру одабраног рода.

У оквиру рада **M23 (1.11.)** описана је примена нециљане метаболомичке анализе на танкослојној хроматографији високих перформанси за одређивање метаболита током развоја биљке *Artemisia annua*. Анализом добијених PCA и OPLS-DA модела потврђено је раздвајање узорака који припадају вегетативној фази, фази цветања и формирања семена у развоју биљке. Резултати овог рада потврђују да се метаболомички приступ заснован на HPTLC анализи може применити у истраживању тока развоја биљке и да је ова анализа комплементарна осталим инструменталним анализама.

Циљ рада **M23 (1.12.)** је био примена четвородимензионе LC-ESI-MS/MS хроматографије у анализи сложених етанолних екстракта узорака прополиса. Урађено је поређење узорака са различитих надморских висина. Детектовано је 96 карактеристичних компоненти у узорцима са великих надморских висина и 18 компоненти у узорцима прикупљених на малим надморским висинама. Такође урађена је антимикуробна активност етанолних и пропилен гликолних екстраката прополиса. Резултати рада показали су да већина испитиваних екстраката прополиса има већу или једнаку минималну инхибиторну концентрацију у поређењу са антибиотицима, независно од растварача који је коришћен приликом екстракције.

У раду **M23 (1.15.)** испитиван је инхибиторни потенцијал диалилсулфида и његових синтетичких деривата, као и трисулфида на раст различитих тумора. Испитиване су ћелијске линије меланома, карцинома јајника, бубрега, простате и дојке, као и леукемије. Концентрација свих испитиваних једињења била је 10  $\mu\text{mol/l}$ . Код карцинома плућа, деривати трисулфида показују су веће инхибиторне способности у поређењу са дисулфидима.

## **4. КВАЛИТАТИВНА ОЦЕНА НАУЧНОГ ДОПРИНОСА**

### **4.1. Показатељи успеха у научном раду**

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

#### **4.1.1. Награде и признања за научни рад додељене од стране релевантних институција и друштава**

2019. године др Катарина Симић је на симпозијуму у организацији Брукер, *Annual Central European NMR Symposium & Bruker users meeting*, одржаном у Београду, добила награду за најбољу постерску презентацију.

**Прилог 2.** Потврда за најбољу постерску презентацију

#### **4.1.2. Уводна предавања на научним конференцијама и друга предавања по позиву**

Др Катарина Симић одржала је предавање по позиву под насловом „Примена инструменталних техника: Примери из праксе“ у оквиру студентске радионице „Структурне методе карактеризације материјала“ организоване у Београду од 10. до 20. јануара 2023. године.

**Прилог 1.** Потврда о одржаном предавању

#### **4.2. Ангажованост у развоју услова за научни рад, образовању и формирању научних кадрова**

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

##### **4.2.1. Допринос развоју науке у земљи**

Кандидаткиња Катарина Симић бави се метаболомичким испитивањем биомаркера у серуму оболелих од шизофреније и биполарног афективног поремећаја, применом различитих инструменталних техника. Једна од темељних инструменталних техника у њеном раду је нуклеарно-магнетно резонантна спектроскопија, за коју је у свом досадашњем научном раду показала успешну примену у метаболомичкој анализи биолошких узорака. Поред наведне технике, кандидаткиња се успешно бави развојем и применом различитих инструменталних техника попут инфрацрвене спектроскопије, гасне и течне хроматографије, у циљу оптимизације услова за одређивање потенцијалних метаболита. Поред биолошких узорака, кандидаткиња се бави и развојем и оптимизацијом метода за производе биљног порекла, применом већ наведене технике у комбинацији са мултиваријантном анализом. Овим приступом је омогућена бржа и ефикаснија анализа биолошки активних једињења, односно потенцијалних биомаркера.

Др Катарина Симић учествује у реализацији научноистраживачких активности у оквиру Катедре за органску хемију. Ангажована је као истраживач на више домаћих и међународних пројеката:

1. Истраживач на међународном научно-истраживачком пројекту који финансира организација за забрану хемијског оружја OPCW „Примена метаболомике за мапирање биљних биомаркера изложености опасним супстанцама, као помоћ развоју хемијских анализа у зонама директног дејства користећи преносни спектрометар за анализу листова (CIA p-LABs) ” (2021/22.), руководилац пројекта ванредни професор др Љубодраг Вујисић.
2. Истраживач на пројекту Српске академије наука „Биомедицински потенцијал новоизолованих дитерпена латекса млечика (*Euphorbia L.*) са станишта у Србији” (2022/24), руководилац пројекта професор емеритус Хемијског факултета и редовни члан САНУ др Слободан Милосављевић.

3. Истраживач на међународном пројекту међулабораторијске сарадње који финансира организација за забрану хемијског оружја OPCW Твининг пројекат VERIFIN института за верификацију Конвенције о забрани хемијског оружја и Универзитета у Београду - Хемијског факултета (Центар за Инструменталну анализу - CIA) (Twinning VERIFIN CIA) (2021/23.), руководилац пројекта ванредни професор др Љубодраг Вујисић.
4. Истраживач на међународном пројекту који финансира организација за забрану хемијског оружја OPCW „Detection of herbs and dietary supplements fraud using metabolomics approach” (2019/21), руководилац пројекта научни саветник др Дејан Гођевац.
5. Истраживач на пројекту сарадње Српске академије наука и уметности и Бугарске академије наука „Phytochemical investigation of secondary metabolites from plants and fungi and their biotransformed products” (2020/22), руководилац пројекта професор емеритус ХФ и редовни члан САНУ др Слободан Милосављевић.
6. Истраживач на пројекту сарадње Српске академије наука и уметности и Бугарске академије наука „Phytochemical and metabolomics investigation of biologically active compounds from Primula species and medicinal mushrooms” (2023/25), руководилац пројекта редовни члан САНУ Слободан Милосављевић.
7. Истраживач на пројекту Српске академије наука и уметности „Фитохемијско испитивање секундарних метаболита из биљака и гљива и њихових биотрансформисаних производа”, (2023/26), руководилац пројекта редовни члан САНУ Слободан Милосављевић.
8. Истраживач на пројекту Министарства, просвете, науке и технолошког развоја бр. 172053 „Биоактивни природни производи самониклих, гајених и јестивих биљака: одређивање структуре и активности” (2011/2019), руководилац пројекта научни саветник др Дејан Гођевац.
9. Истраживач на међународном научно-истраживачком пројекту који финансира организација за забрану хемијског оружја (OPCW) „Development of on-line GC-MS and LC-MS methods based on micro extraction inpacked sorbent (MEPS) for the OPCW proficiency test framework and on-site analysis” (2017/18.), руководилац пројекта ванредни професор др Љубодраг Вујисић.
10. Истраживач на интерном позиву у оквиру институције за маладе начунике SEED, Seed Research Grant, финансиран од стране Serbia Accelerating Innovation and Entrepreneurship Project (SAIGE) „Cutting-edge tools for obtaining bioactive food supplements from Ganoderma”, FOODGAN, 2024. године, руководилац пројекта истраживач сарадник Стефан Ивановић.
11. Тренутно је ангажован на основним истраживањима у области фитохемије финансираним од стране ресорног Министарства (уговори бр. 451-03-68/2020-14/200026, 451-03-9/2021-14/200026, 451-03-68/2022-14/200026, 451-03-47/2023-01/200026 и 451-03-66/2024-03/200026).

### **Прилог 3. Доказ о учествовању на пројектима**

#### 4.2.2. Педагошки рад

Катарина Симић ангажована је као сарадник у настави на основним студијама Универзитета у Београду - Хемијског факултета од 2020. до 2024. године и то на следећим предметима:

1. Структурне инструменталне методе, смер Биохемија, 3. година студија, зимски семестар академске 2020/21, 2021/22, 2022/23, 2023/24
2. Структурне инструменталне методе, смер Хемија, 3. година студија, зимски семестар академске 2022/23
3. Структурне инструменталне методе, смер Настава хемије, 3. година студија, летњи семестар академске 2022/23
4. Одабране области структурне инструменталне методе, смер Хемија, Хемија животне средине, Настава хемије, 4. година студија, летњи семестар академске 2022/23
5. Загађивачи хране, смер Хемија животне средине, 4. година студија, летњи семестар академске 2022/23.
6. Одабране области примењене хемије, смер Хемија, Настава хемије, 4. година, летњи семестар академске 2022/23, 2023/24

2020. године, др Катарина Симић одржала је предавање на тему „Масена спектрометрија“ и вежбе из решавања масених спектра са ученицима средњих школа у оквиру зимског семинара хемије који је реализован у Истраживачкој станици Петница.

**Прилог 4.** Докази о педагошком раду

#### 4.2.3. Међународна сарадња

Кандидаткиња је коаутор на радовима публикованим у међународним часописима који су резултат међународне сарадње са истраживачима Института за органску хемију и фитохемију Бугарске академије наука (M23-1.11.) и истраживачима из Одсека за фармацију и биотехнологију Универзитета у Болоњи, Италија M23(1.13.). Поред наведених радова др Катарина Симић, има једно саопштење M64(4.3.) које је резултат сарадње са истраживачима са Института за хемију, Универзитета у Кампинасу (University of Campinas), Сан Паоло, Бразил.

Као учесница билатералног пројекта, кандидаткиња је боравила на Верифин институту, Универзитета у Хелсинкију од 29.03. до 1.04.2022. године. Похађала је курс обуке за анализу једињења сродних хемијском оружју, где је активно учествовала на теоријској и практичној обуци на тему стратегија анализе, генералне припреме узорака, припреме узорака животне средине, као и у припреми извештаја у складу са прописаним захтевима OPCW организације.

Поред наведених сарадњи, кандидаткиња је учесник на више међународних пројеката, финансираних од стране организације за забрану хемијског оружја OPCW и на пројектима међународне сарадње Српске академије наука и уметности и Бугарске академије наука.

**Прилог 5.** Докази о међународној сарадњи

### 4.3. Квалитет научних резултата:

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

#### 4.3.1. Утицајност

Најбољи показатељ утицајности публикованих научних резултата кандидаткиње огледа се у њиховој цитираности. Према подацима научне базе SCOPUS, радови кандидаткиње (на дан 16.07.2024.) су цитирани укупно 54 пута без аутоцитата, Хиршов индекс, h-индекс = 4. Цитираност је документована навођењем цитата у листи цитираности

#### 4.3.2. Параметри квалитета часописа и позитивна цитираност кандидатових радова

Током своје досадашње каријере, кандидаткиња је објавила 27 библиографских јединица, од тога 15 радова у међународним часописима, од тога четири рада у врхунским међународним часописима (M21), пет радова у истакнутим међународним часописима (M22), шест радова у међународним часописима (M23), седам саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34) и три саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (M64). Поред наведених библиографских јединица, кандидаткиња је објавила и два рада у часописима од националног значаја, M52 и M54. Укупан импакт фактор = **50,978** са укупним **M = 78,08**.

Највећу цитираност имају радови: M22 (1.8.), часопис *Molecules*, 15 цитата; M22 (1.6.), часопис *Metabolites*, 9 цитата и M21 (1.4.), часопис *Plants*, 8 цитата. Рад M21 (1.2.) цитиран је 1 пут, M21 (1.3.) цитиран је 4 пута, M22 (1.5.) цитиран је 4 пута, M22 (1.7.) цитиран је 2 пута, M22 (1.9.) цитиран је 1 пут, M23 (1.10.) цитиран је 2 пута, M23 (1.11.) цитиран је 1 пут, M23 (1.12.) цитиран је 3 пута, M23 (1.13.) цитиран је 4 пута.

Рада M22 (1.5.) је одабран за насловну страну часописа у години објављивања рада. Према подацима научне базе SCOPUS, радови кандидаткиње (на дан 16.07.2024.) су цитирани укупно 54 пута без аутоцитата (Хиршов индекс, h-индекс = 4).

#### 4.3.3. Ефективни број радова и број радова нормиран на основу броја коаутора

Свих 15 радова кандидаткиње припадају групи експерименталних радова у природно-математичким наукама. У току њихове реализације, кандидаткиња је активно учествовала у припреми и извођењу експерименталног рада, обради и дискусији добијених резултата. На основу критеријума наведених у Правилнику о стицању научних и истраживачких звања, извршено је нормирање радова према броју коаутора према формули  $K/(1+0,2(n-7))$  и то за радове M21 (1.2.), M22 (1.5.), M22 (1.6.), M22 (1.9.), M23 (1.12.), као и за саопштења M34(2.1.), M34(2.2.) и M64(4.3.). Радови са

нормираним бројем бодова су јасно обележени у Библиографији радова и израчунате су нормиране вредности бодова.

#### **4.3.4. Степен самосталности и степен учешћа у реализацији радова у научним центрима у земљи и иностранству**

Др Катарина Симић показала је висок степен самосталности у научноистраживачком раду. Кандидаткиња је показала самосталност у извођењу експеримената, обради и дискусији добијених резултата, као и при припреми радова за публикацију. Кандидаткиња је први аутор на 2 рада, која су део њене докторске дисертације, и на два саопштења на скупу од националног значаја штампаног у изводу.

Кандидаткиња је боравила у VERIFIN Институту Универзитета у Хелсинкију, где је активно учествовала на семинару за припрему узорака ради лакшег одређивања присуства потенцијалног хемијског оружја. Стечено искуство и знање применила је и за међународне билатералне тестове у којима је учествовала, као члан тима за припрему узорака. Кандидаткиња је коаутор на радовима публикованим у међународним часописима који су резултат међународне сарадње са истраживачима Института за органску хемију и фитохемију Бугарске академије наука (M23-1.11.) и истраживачима из Одсека за фармацију и биотехнологију Универзитета у Болоњи, Италија M23(1.13.). Поред наведених радова др Катарина Симић, има једно саопштење M64(4.3.) које је резултат сарадње са истраживачима са Института за хемију, Универзитета у Кампинасу (University of Campinas), Сан Паоло, Бразил.

#### **4.3.5. Допринос кандидата реализацији коауторских радова**

У реализацији свих објављених радова, Катарина Симић је учествовала у конципирању истраживања, планирању и извођењу експеримената, обради и дискусији добијених резултата, као и у писању радова.

Једна од темељних инструменталних техника у досадашњем раду кандидаткиње је NMR спектроскопија, развој и примена, пре свега у мултиваријантној анализи, о чему сведоче досадашњи објављени резултати. Библиографске јединице које се баве NMR метаболомичком анализом су M21(1.1.), M21(1.2.), M22(1.5), M22(1.6.), M22(1.7.). У реализацији наведених радова кандидаткиња је активно учествовала у конципирању истраживања, извођењу експеримената и тумачењу резултата, при чему је њен највећи допринос био у осмишљавању NMR експеримената, односно примени и припреми специфичних пулсних секвенци за мултисупресију одређених сигнала. Радови M22(1.5) и M22(1.6.), на којима је кандидаткиња први аутор, проистекли су из њене докторске дисертације. У наведеним радовима, кандидаткиња је учествовала у свим деловима истраживања, од конципирања истраживања, до обраде и дискусије добијених резултата, као и у писању самих радова. Резултати рада др Катарине Симић довели су до интензивније примене NMR метаболомичке анализе за бржу и ефикаснију анализу различитих узорака, од серумских до биљних. Осим примене NMR спектроскопије у метаболомичкој студији, кандидаткиња има и резултате добије применом NMR спектроскопије у класичним приступима фитохемијског



испитивања и идентификацији нових, биолошки активних једињења, што је описано у радовима M22(1.9.) и M23(1.14.)

Поред наведене технике, кандидаткиња се бави и применом гасне хроматографије са масеном спектрометријом, GC-MS, у анализи узорака биљног порекла. Радови које се баве овом тематиком су у библиографској листи означени M21(1.4), M22(1.8) и M23(1.10). У овим радовима кандидаткиња је дала значајан допринос у припреми узорака за анализу, као и тумачењу добијених резултата, чиме је показана могућност примене ове технике у метаболомичкој студији. Рад M21(1.3.) представља комбинацију наведених техника, у коме је допринос кандидаткиње био фокусиран на NMR спектроскопију. Резултати проистекли из овог рада указују на добијање потпуније слике испитиваних метаболита комбинацијом две аналитичке методе.

Течна хроматографија са масено спектрометријом и танкослојна хроматографија високих перформанси, такође су део истраживања кандидаткиње. У овим радовима кандидаткиња је дала изузетан допринос у осмишљавању експерименталних услова за анализу узорака биљног порекла, што је и приказано у радовима M23(1.11.) и M23(1.12.)

Сви радови кандидаткиње су резултат рада мултидисциплинарних тимова, при чему је кандидаткиња дала значајан и истакнут допринос.

#### **4.3.6. Значај радова**

Др Катарина Симић је својим резултатима остварила значајан допринос у примени инструменталних техника за одређивање потенцијалних биомаркера из различитих узорака и у оптимизацији инструменталних метода за анализу биљних узорака. Резултати истраживања проистекли из докторске дисертације кандидаткиње објављени су у два научна рада на којима је кандидаткиња први аутор. Оба рада су објављена у истакнутим међународним часописима (M22). У оквиру докторске дисертације др Катарина Симић је по први пут урадила NMR метаболомичку анализу серума оболелих од шизофреније и биполарног афективног поремећаја са подручја Републике Србије и утврдила потенцијалне биомаркере за њихово разликовање и тиме дала значајан допринос NMR метаболомичком проучавању серума. Поред утврђивања потенцијалних биомаркера, циљ докторске дисертације је био успостављање универзалног сета биомаркера наведених психијатријских поремећаја. Поређењем идентификованих сетова биомаркера ових обољења добијених анализом српских узорака са већ утврђеним сетовима потенцијалних биомаркера серума бразилског и кинеског географског порекла, утврђено је преклапање 13 биомаркера за шизофренију и 9 биомаркера за биполарни поремећај. У ширем смислу, резултати добијени у оквиру докторске дисертације кандидаткиње значајно ће допринети примени инструменталних техника при утврђивању потенцијалних биомаркера различитих психијатријских обољења и поремећаја. NMR метаболомичка анализа, као најдоминантнија област истраживања кандидаткиње, огледа се у броју објављених радова који доминирају у библиографији кандидаткиње, као и броју цитата. Значај наведених радова је фокусиран на оптимизацији различитих NMR експерименталних метода за мултисупресију сигнала и оптимизацији параметара снимања у

циљу добијања комплетније слике испитиваних метаболита. Значај радова који се баве применом гасне хроматографије са масеном спектрометријом у метаболомичким истраживањима огледа се у одабиру одговарајуће припреме узорака, ради добијања информација о значајним метаболитима.

Током своје научноистраживачке каријере, кандидаткиња је објавила 15 радова у часописима међународног значаја. Од тога четири рада у врхунским међународним часописима (M21), пет радова у истакнутим међународним часописима (M22), шест радова у међународним часописима (M23). Поред тога, кандидаткиња има и седам саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34) и три саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (M64). Поред наведених библиографских јединица, кандидаткиња је објавила и два рада у националним часописима. Укупан М износи 78,08 са одбрањеном докторском дисертацијом. Значај радова показује и њихова цитираност. Радови које је кандидаткиња објавила цитирани су 54 пута, без аутоцитата, h-индекс = 4.

## 5. ОЦЕНА ИСПУЊЕНОСТИ КВАНТИТАТИВНИХ УСЛОВА ЗА СТИЦАЊЕ НАУЧНОГ ЗВАЊА НАУЧНИ САРАДНИК:

Др Катарина Симић се први пут бира у звање научног сарадника. Приказ минималних критеријума за стицање звања научни сарадник као и остварених поена кандидата по свим условима дати су у следећој табели.

Диференцијални услов за избор у звање научни сарадник	Потребно је да кандидат има најмање 16 поена, који треба да припадају следећим категоријама:		
		Неопходно	Остварено
<b>Научни сарадник</b>	Укупно	16	78,08
Обавезни (1)	M10+M20+M31+M32+M33+M41+M42	10	67,34
Обавезни (2)	M11+M12+M21+M22+M23	6	67,34

Из наведених података следи да др Катарина Симић испуњава све квантитативне услове за избор у звање научни сарадник.

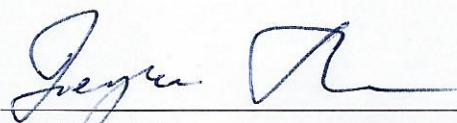
## 6.3 АКЉУЧЦИ И ПРЕПОРУКЕ КОМИСИЈЕ

На основу свега изложеног у овом извештају, као и на основу личног увида у рад кандидаткиње, Комисија закључује да је др Катарина Симић, др хемијских наука, истраживач сарадник Универзитета у Београду – Института за хемију, технологију и металургију остварила запажене резултате у свом научноистраживачком и педагошком раду. Др Катарина Симић је одбранила докторску дисертацију из области органске хемије и дала значајан допринос примени NMR метаболомичке анализе у анализи биомаркера различитих психијатријских болести. Поред тога, кандидаткиња је дала и значајан допринос у метаболомичкој анализу биљних узорака применом различитих инструменталних техника. Кандидаткиња се показала и као квалитетан сарадник у оквиру свог активног учешћа у реализацији наставе на Хемијском факултету Универзитета у Београду. Др Катарина Симић публиковала је укупно 15 радова у међународним часописима, од тога четири рада у врхунским међународним часописима (M21), пет радова у истакнутим међународним часописима (M22), шест радова у међународним часописима (M23), седам саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34) и три саопштења са скупова националног значаја штампаних у изводу (M64). Поред наведених библиографских јединица, кандидаткиња је објавила и два рада у часописима од националног значаја. Према Правилнику о стицању истраживачких и научних звања, за избор у научно звање научни сарадник, минимална вредност М коефицијента је 16 од избора у претходно звање, што кандидаткиња вишеструко премашује. Укупно М износи **78,08** (са одбрањеном докторском дисертацијом). Научни радови на којима је кандидаткиња коаутор објављени су у утицајним часописима, при чему је укупан импакт фактор свих објављених радова 50,978. Према подацима индексне базе *Scopus*, на дан 16.07.2024. године, радови кандидаткиње су цитирани укупно 54 пута без аутоцитата (Хиршов индекс, h-индекс = 4). Приказани резултати показују да кандидаткиња својим укупним научно-истраживачким радом и оствареним квалитетом научних публикација значајно доприноси развоју метаболомике и NMR спектроскопије.

У складу са Законом о науци и истраживању („Службени гласник РС“, бр. 49/2019), као и са Правилником о поступку и начину вредновања и квантитативном исказивању научноистраживачких резултата истраживача („Службени гласник РС“, бр. 159), а на основу приказане анализе и оцене постигнутих и објављених резултата др Катарине Симић, као и увида у приложену документацију Комисија закључује да кандидаткиња испуњава све квантитативне и квалитативне критеријуме за избор у звање научни сарадник. Стога, Комисија са задовољством предлаже Научном већу Института за хемију, технологију и металургију, да прихвати овај Извештај и предлаже избор др Катарине Симић у звање научни сарадник.

У Београду,  
30.08.2024. године

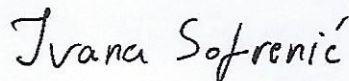
Комисија:



др Дејан Гојевац, председник комисије, научни саветник, Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију



др Мирјана Цветковић, научни сарадник, Универзитет у Београду – Институт за хемију, технологију и металургију



др Ивана Софренић, доцент, Универзитета у Београду - Хемијског факултета