

Пољопривредни факултет

32/19-7.1.

(Број захтева)

24.06.2026.

(Датум)

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ

Веће научних области

биотехничких наука

(Назив већа научне области коме се захтев упућује)

ЗАХТЕВ

за давање сагласности на одлуке о усвајању извештаја Комисије за оцену докторске дисертације и о именовању комисије за одбрану

Молимо да, сходно члану 48 ст. 5 тач. 4) Статута Универзитета у Београду ("Гласник Универзитета", бр. 201/2018, 207/2019, 213/2020, 214/2020, 217/2020, 230/21, 232/22, 233/22 и 236/22), дате сагласност на одлуку о усвајању извештаја Комисије за оцену докторске дисертације:

КАНДИДАТ Марија, Сергејевна, Лагерхолм

(име, име једног од родитеља и презиме)

студент докторских студија на студијском програму Прехрамбена технологија

уписана на докторске студије 2018/2019. године,

пријавила је тему докторске дисертације дана 21.03.2025. године, под називом: „Инкапсулација природних биоактивних једињења и примена машинског учења у анализи молекулских подструктура повезаних са антимикуробном активношћу“.

из научне области: Прехрамбена технологија

Универзитет је дана 08.07.2025. године својим актом под бр. 02-08 Број: 61206-2630/2-25 дао сагласност на предлог теме докторске дисертације која је гласила: „Хемијска карактеризација есенцијалних уља и примена машинског учења у анализи молекулских подструктура повезаних са антимикуробном активношћу према *Salmonella Typhimurium* за потребе прехрамбене индустрије“.

Име и презиме првог ментора др Виктор Недовић

Име и презиме другог ментора др Мирјана Пешић

Комисија за оцену докторске дисертације именована је на седници одржаној 29.04.2026. године одлуком факултета под бр. 32/17-5.1., у саставу:

Име и презиме члана комисије	звање	научна област	Установа у којој је запослен
1. др Ивана Средовић Игњатовић	ванредна професорка	Хемија	Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет;
2. др Стева Левић	ванредни професор	Биохемија	Универзитет у Београду – Пољопривредни факулте

3. др Милена Пантић	ванредна професорка	Технолошка микробиологија Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет;
4. др Наташа Милосављевић	ванредна професорка	Математика и информатика Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет;
5. др Милош Јовановић	ванредни професор	Организационе науке Универзитет у Београду – Факултет организационих наука;

Датум стављања извештаја Комисије и докторске дисертације на увид јавности 06.05.2026. год.

Наставно-научно веће факултета усвојило је извештај Комисије за оцену докторске дисертације на седници одржаној дана 24.06.2026. године.

Комисија за одбрану докторске дисертације именована је на седници одржаној 24.06.2026. године одлуком факултета под бр. 32/19-7.2., у саставу:

Име и презиме члана комисије	звање	научна област	Установа у којој је запослен
1. др Ивана Средовић Игњатовић	ванредна професорка	Хемија	Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет;
2. др Стева Левић	ванредни професор	Биохемија	Универзитет у Београду – Пољопривредни факулте
3. др Милена Пантић	ванредна професорка	Технолошка микробиологија	Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет;
4. др Наташа Милосављевић	ванредна професорка	Математика и информатика	Универзитет у Београду – Пољопривредни факултет;
5. др Милош Јовановић	ванредни професор	Организационе науке	Универзитет у Београду – Факултет организационих наука;

В. Д. ДЕКАН ФАКУЛТЕТА

Проф. др Владан Богдановић

Прилози:

1. Одлука Наставно-научног већа о усвајању извештаја Комисије за оцену докторске дисертације и одлука о именовању Комисије за одбрану докторске дисертације
2. Извештај Комисије о оцени докторске дисертације

Универзитет у Београду
ПОЉОПРИВРЕДНИ ФАКУЛТЕТ
Број: 32/19-7.1.
Датум: 24.06.2026. године
БЕОГРАД-ЗЕМУН

На основу члана 44. Статута Пољопривредног факултета (2026. година – пречишћен текст), и члана 62. Правилника о правилима докторских академских студија, Наставно - научно веће факултета на седници одржаној 24.06.2026. године, донело је

О Д Л У К У

I УСВАЈА СЕ Извештај Комисије о позитивној оцени докторске дисертације коју је поднела **МАРИЈА ЛАГЕРХОЛМ, мастер** и одобрава јавна одбрана дисертације по добијању сагласности од Универзитета, под насловом: **«ХЕМИЈСКА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ЕСЕНЦИЈАЛНИХ УЉА И ПРИМЕНА МАШИНСКОГ УЧЕЊА У АНАЛИЗИ МОЛЕКУЛСКИХ ПОДСТРУКТУРА ПОВЕЗАНИХ СА АНТИМИКРОБНОМ АКТИВНОШЋУ ПРЕМА *Salmonella* Typhimurium ЗА ПОТРЕБЕ ПРЕХРАМБЕНЕ ИНДУСТРИЈЕ».**

II Универзитет је дана 08.07.2025. године актом 02-08 Број: 61206-2630/2-25 дао сагласност на одлуку Наставно - научног већа факултета о прихватању теме докторске дисертације.

III Радови кандидата у научним часописима који га квалификују за одбрану докторске дисертације:

Zrimec, J., **Kokina, M.**, Jonasson, S., Zorrilla, F., & Zelezniak, A. (2021). Plastic-degrading potential across the global microbiome correlates with recent pollution trends. *mBio*, 12(5), e0215521.

<https://doi.org/10.1128/mBio.02155-21>

Kokina, M., Salević, A., Kalušević, A., Lević, S., Pantić, M., Pljevljakušić, D., Šavikin, K., Shamtsyan, M., Nikšić, M., & Nedović, V. (2019). Characterization, antioxidant and antimicrobial activity of essential oils and their encapsulation into biodegradable material followed by freeze-drying. *Food Technology and Biotechnology*, 57(2).
<https://doi.org/10.17113/ftb.57.02.19.5957>

Zrimec, J., Buric, F., **Kokina, M.**, Garcia, V., & Zelezniak, A. (2021). Learning the regulatory code of gene expression. *Frontiers in Molecular Biosciences*, 8, 673363.
<https://doi.org/10.3389/fmolb.2021.673363>

Lagerholm, M., Jovanović, M., Kuzmanović, M., Pešić, M., & Nedović, V. (2025). A machine learning-supported analysis of essential oil constituents targeting *Salmonella Typhimurium*. *Comprehensive Plant Biology (Botanica Serbica)*, 49 (1): 87-100.
<https://doi.org/10.2298/CPB2501087L>

Образложење

Наставно-научно веће факултета разматрало је и усвојило Извештај Комисије о позитивној оцени урађене докторске дисертације коју је поднела Марија Лагерхолм, мастер.

Наставно-научно веће факултета је приликом доношења одлуке оцењивало да ли је завршена докторска дисертација у складу са одобреном темом и да ли наводи садржани у реферату потврђују да су се стекли услови за одбрану докторске дисертације. Сходно изнетом одлучено је као у диспозитиву.

**ПРЕДСЕДНИК
НАСТАВНО-НАУЧНОГ ВЕЋА ФАКУЛТЕТА
В.Д. ДЕКАНА**

(Проф. др Владан Богдановић)

Доставити: кандидату, ментору, Институту за прехранбену технологију и биохемију, Студентској служби и архиви.

Универзитет у Београду
ПОЉОПРИВРЕДНИ ФАКУЛТЕТ
Број: 32/19-7.2.
Датум: 24.06.2026. године
БЕОГРАД-ЗЕМУН

На основу члана 44. Статута Пољопривредног факултета (2026. година – пречишћен текст) и члана 63. Правилника о правилима докторских академских студија, Наставно - научно веће факултета на седници одржаној 24.06.2026. године, донело је

О Д Л У К У

I У Комисију за одбрану докторске дисертације коју је поднела **МАРИЈА ЛАГЕРХОЛМ, мастер,** под насловом: **«ХЕМИЈСКА КАРАКТЕРИЗАЦИЈА ЕСЕНЦИЈАЛНИХ УЉА И ПРИМЕНА МАШИНСКОГ УЧЕЊА У АНАЛИЗИ МОЛЕКУЛСКИХ ПОДСТРУКТУРА ПОВЕЗАНИХ СА АНТИМИКРОБНОМ АКТИВНОШЋУ ПРЕМА *Salmonella Typhimurium* ЗА ПОТРЕБЕ ПРЕХРАМБЕНЕ ИНДУСТРИЈЕ»**, именују се:

1. др Ивана Средовић Игњатовић, ванредна професорка
Универзитета у Београду – Пољопривредног факултета,
2. др Стева Левић, ванредни професор
Универзитета у Београду – Пољопривредног факултета,
3. др Милена Пантић, ванредна професорка
Универзитета у Београду – Пољопривредног факултета,
4. др Наташа Милосављевић, ванредна професорка
Универзитета у Београду – Пољопривредног факултета,
5. др Милош Јовановић, ванредни професор
Факултета организационих наука Универзитета у Београду

II На ову одлуку, о именовању Комисије за одбрану докторске дисертације, сагласност даје одговарајуће Веће научних области Универзитета у Београду.

**ПРЕДСЕДНИК
НАСТАВНО-НАУЧНОГ ВЕЋА ФАКУЛТЕТА
В.Д. ДЕКАНА**

(Проф. др Владан Богдановић)

Доставити: кандидату, члановима Комисије, Институту за прехранбену технологију и биохемију, Студентској служби и архиви.

**НАСТАВНО-НАУЧНОМ ВЕЋУ
ПОЉОПРИВРЕДНОГ ФАКУЛТЕТА
УНИВЕРЗИТЕТА У БЕОГРАДУ**

Датум: 04.05.2026.

Предмет: Извештај Комисије за оцену урађене докторске дисертације **Марије Лагерхолм**, мастер биотехнологије

Одлуком Наставно-научног већа Пољопривредног факултета Универзитета у Београду број: 32/17-5 од 29.04.2026. године, именовани смо у Комисију за оцену урађене докторске дисертације под насловом: **“Хемијска карактеризација есенцијалних уља и примена машинског учења у анализи молекулских подструктура повезаних са антимикробном активношћу према *Salmonella Typhimurium* за потребе прехранбене индустрије”**, кандидата Марије Лагерхолм, мастер биотехнологије.

Комисија у саставу: др Ивана Средовић Игњатовић, ванредни професор, Универзитет у Београду-Пољопривредни факултет (ужа научна област-Хемија); др Стева Левић, ванредни професор, Универзитет у Београду-Пољопривредни факултет (ужа научна област-Биохемија); др Милена Пантић, ванредни професор, Универзитет у Београду-Пољопривредни факултет (ужа научна област-Технолошка микробиологија); др Наташа Милосављевић, ванредни професор, Универзитет у Београду-Пољопривредни факултет (ужа научна област - Математика и информатика); др Милош Јовановић, ванредни професор, Универзитет у Београду-Факултет организационих наука (ужа научна област-Организационе науке), на основу прегледа, анализе и оцене докторске дисертације подноси Наставно-научном већу Пољопривредног факултета следећи

ИЗВЕШТАЈ

1. ОСНОВНИ ПОДАЦИ О КАНДИДАТУ И ДИСЕРТАЦИЈИ

Основни подаци о кандидату. Марија Лагерхолм (девојачко Кокина) рођена је 4. децембра 1994. године у Сајанску, Иркутска област, Русија. Завршила је средњу школу 2012. године, након чега је исте године уписала студије хемијске технологије.

Године 2016. стекла је диплому основних студија, а 2018. године завршила је мастер студије из биотехнологије на Технолошком универзитету у Санкт Петербургу, Русија. Током мастер студија учествовала је у Еразмус програму размене студената на Универзитету “Лучиан Блага” у Сибију (Румунија) у периоду од 6. марта до 2. августа 2017. године. Поред тога, добила је финансирање Владе Руске Федерације за реализацију пројекта у области међународне мобилности младих истраживача, што јој је омогућило учешће у програму размене у Србији. Током тог периода упознала се са научноистраживачким радом у лабораторији проф. др Виктора Недовића и радила у лабораторијама Института за проучавање лековитог биља „Др Јосиф Панчић” (од 15. новембра до 6. децембра 2017. године и од 10. априла до 31. маја 2018. године).

По завршетку мастер студија 2018. године добила је стипендију Владе Републике Србије за докторске студије на Пољопривредном факултету Универзитета у Београду. Током докторских студија, у периоду од 2019. до 2021. године, боравила је на истраживачкој пракси на Чалмерс

технолошком универзитету у Шведској, где је радила на пројектима из области аналитичке хемије и рачунарске биологије. Од септембра 2024. године уписана је на програм науке о подацима у Гетеборгу, Шведска. Од августа 2025. године ради као стручњак за науку о подацима у приватном сектору у Шведској, а током 2026. године планира да настави академску каријеру као истраживач на постдокторским студијама на Чалмерс технолошком универзитету.

Њено истраживање усмерено је на проучавање биоактивних једињења, посебно једињења присутних у етеричним уљима, и њихова биоактивна својства. Њена посебна област рада и истраживања је примена машинског учења и анализе података у прехранбеној, фармацеутској, хемијској и козметичкој индустрији.

Основни подаци о дисертацији. Тема дисертације пријављена је на Пољопривредном факултету Универзитета у Београду и одобрена је од стране Већа научних области биотехничких наука одлуком број 61206-2630/2-25 од 08. 07. 2025. године. За ментора докторске дисертације одређени су др Мирјана Б. Пешић, редовни професор Пољопривредног факултета, Универзитета у Београду (ужа научна област – Биохемија) и др Виктор Недовић, редовни професор, Пољопривредни факултет, Универзитет у Београду (ужа научна област - Наука о конзервисању и врењу). Докторска дисертација Марије Лагерхолм, мастер биотехнологије, под насловом: **“Хемијска карактеризација есенцијалних уља и примена машинског учења у анализи молекулских подструктура повезаних са антимикуробном активношћу према *Salmonella Typhimurium* за потребе прехранбене индустрије”** написана је у складу са захтевима Уговора о коментроству и брани се на Универзитету у Београду. Дисертација је написана на српском језику, на укупно 173 страна, од којих је 158 нумерисано. Ненумерисани делови дисертације су: насловна страна на српском и енглеском језику са информацијама о члановима комисије у складу са Уговором о коментроству, странице са захвалницом, странице са сажетком на српском и енглеском језику са кључним речима, страница са валоризацијом научног рада, странице са садржајем, листом слика, табела и скраћеница. Нумерисани део дисертације садржи следећа поглавља: Увод (стр. 1-4), Преглед литературе (стр. 5-36), Материјал и методе (стр. 37-46), Резултати (стр. 47-73), Закључци (стр. 74-80), Литература (стр. 81-116), Биографија и библиографија аутора (стр. 118-121), Прилози (стр. 122-158). Поглавља Преглед литературе, Материјал и методе и Резултати подељена су на више потпоглавља. У оквиру дисертације приказано је 13 слика и 10 табела. Цитирано је 300 литературних извора.

2. ПРЕДМЕТ И ЦИЉ ДИСЕРТАЦИЈЕ

Главни циљ истраживања је боље разумевање хемијских основа антимикуробне активности етарских уља применом машинског учења, као и унапређење њихове ефикасности као потенцијалних конзерванса у прехранбеној индустрији, посебно кроз интеграцију нових технологија инкапсулације. Ово подразумева:

- анализу хемијског састава, антимикуробних и антиоксидативних својстава етарских уља лаванде (*Lavandula angustifolia*), чајевца (*Melaleuca alternifolia*), бергамота (*Citrus bergamia*) и нане (*Mentha piperita*);
- идентификацију кључних молекулских подструктура које утичу на антибактеријску активност етарских уља, са циљем развоја нових, природом инспирисаних антибактеријских агенаса, посебно усмерених на спречавање инфекција изазваних *S. Typhimurium*;

- испитивање потенцијала инкапсулације као средства за унапређење примене етарских уља наведених биљних врста у прехранбеним системима.

3. ОСНОВНЕ ХИПОТЕЗЕ ОД КОЈИХ СЕ ПОЛАЗИЛО У ИСТРАЖИВАЊУ

Основне хипотезе од којих се полази у оквиру ове докторске дисертације су следеће:

- структурна специфичност: одређене молекулске подструктуре представљају кључне предикторе високе антибактеријске активности према култури *Salmonella Typhimurium*;
- рачунарска анализа: применом машинског учења и хемоинформатике може се успоставити повезаност између структурних карактеристика есенцијалних уља и њихове антибактеријске ефикасности, што омогућава усмеравање даљих истраживања и дизајн нових природних или синтетичких антибактеријских агенаса;
- потенцијал инкапсулације: уграђивањем есенцијалних уља лаванде (*Lavandula angustifolia*), чајевца (*Melaleuca alternifolia*), бергамота (*Citrus bergamia*) и нане (*Mentha piperita*) у биодеграбилне материјале, уз примену електростатичне екструзије и сушења лиофилизацијом, може се побољшати њихова стабилност, контролисано ослобађање и применљивост у прехранбеним системима.

4. КРАТАК ОПИС САДРЖАЈА ДИСЕРТАЦИЈЕ

Увод. Уводно поглавље засновано је на предмету истраживања докторске дисертације и даје преглед значаја природних биоактивних једињења, посебно етеричних уља, у фармацеутској и прехранбеној индустрији. Указано је на улогу природних производа као извора савремених лекова, као и на растући интерес за њихову примену као природних конзерванаса.

Наглашен је потенцијал етеричних уља као антимикробних и антиоксидативних агенаса, уз осврт на њихова ограничења као што су испарљивост, токсичност и сензорни утицај. Истакнут је значај савремених метода заснованих на подацима, посебно машинског учења, у повезивању молекулске структуре и биолошке активности компонената етеричних уља.

Посебна пажња посвећена је проблему бактеријских инфекција изазваних *Salmonella enterica* серовар *Typhimurium* и потреби за развојем нових, неантибиотичких стратегија контроле. Представљен је и значај инкапсулације етеричних уља у калцијум-алгинатне системе као приступа за побољшање њихове стабилности и применљивости.

На крају уводног поглавља дефинисани су циљеви истраживања, који обухватају хемијску карактеризацију етеричних уља, испитивање њихове биолошке активности, примену машинског учења у анализи структура-активност односа и развој инкапсулисаних система.

Преглед литературе. Кандидат је у овом поглављу обухватио литературне податке повезане са тематиком истраживања докторске дисертације и систематизовао их у више потпоглавља. У првом потпоглављу приказан је хемијски састав етеричних уља, са посебним освртом на терпенска и

фенолна једињења, њихову биосинтезу, класификацију и улогу у испољавању биолошке активности. Анализирани су механизми антимикробног и антиоксидативног деловања етеричних уља, као и фактори који утичу на њихову ефикасност.

У другом потпоглављу размотрене су савремене аналитичке технике за карактеризацију етеричних уља, са нагласком на гасну хроматографију спрегнуту са масеном спектрометријом (GC-MS), као и приступи обради и интерпретацији добијених података. Посебна пажња посвећена је примени хемоинформатике, укључујући употребу молекулских дескриптора и структурних отисака (fingerprints) у анализи односа структура-активност.

У трећем потпоглављу приказана је примена машинског учења у истраживању природних биоактивних једињења, са фокусом на моделовање и предикцију антимикробне активности етеричних уља. Размотрени су различити алгоритми, као и значај идентификације кључних молекулских подструктура одговорних за биолошку активност.

У четвртном потпоглављу анализиране су технике инкапсулације етеричних уља, са нагласком на биополимерне системе као што је калцијум-алгинат, као и методе електростатичне екструзије и сушења лиофилизацијом. Размотрени су механизми стабилизације, контролисаног ослобађања и потенцијал примене инкапсулисаних система у прехранбеној индустрији.

Материјал и методе. У овом поглављу приказане су експерименталне и рачунарске методе примењене у истраживању. У оквиру експерименталног дела описани су коришћени узорци етеричних уља лаванде, чајног дрвета, бергамота и нане, као и поступци за одређивање њиховог хемијског састава применом гасне хроматографије спрегнуте са масеном спектрометријом (GC-MS). Детаљно је приказана метода електростатичне екструзионе инкапсулације етеричних уља у алгинатним матрицама, укључујући припрему емулзија, формирање куглица, лиофилизацију и морфолошку анализу добијених инкапсулата.

У истом поглављу описани су поступци за испитивање антимикробне активности етеричних уља према *Salmonella Typhimurium*, одређивањем минималне инхибиторне и минималне бактерицидне концентрације, као и методе за процену антиоксидативне активности применом DPPH и ABTS тестова.

У оквиру рачунаског дела приказан је поступак прикупљања и припреме података, генерисања Морганових отисака и формирања скупа карактеристика за анализу. Описан је протокол машинског учења заснован на регуларизованој логистичкој регресији, као и методе за процену перформанси модела, калибрацију, анализу важности карактеристика и декодирање структурних отисака у хемијски тумачиве подструктуре.

Резултати и дискусија. Резултате истраживања аутор је изнео у више тематских целина које обухватају експерименталну и рачунарску анализу, са више потпоглавља. Резултати су приказани прегледно, јасно и концизно кроз текстуалну анализу, слике и табеле, док је дискусија дата интегрисано, уз поређења са релевантним литературним подацима у области етарских уља, антимикробне активности и примене машинског учења.

У првом потпоглављу (GC-MS анализа етарских уља) показано је да хемијски профили

испитиваних уља зависе од биљног извора и доминантних терпенских компоненти. Уље чајевог дрвета карактерише висок садржај терпинен-4-ола (44,7%), док лаванда и бергамот припадају линалоол/линалилацетат хемотипу са садржајем од око 78% и 80% ових једињења, а нане ментолном хемотипу са 49,3% изоментола. Добијени резултати су у складу са ранијим истраживањима и потврђују да варијације у саставу значајно утичу на биолошку активност уља.

У другом потпоглављу (Физичко-хемијска карактеризација инкапсулираних уља) утврђено је да додавање етарских уља у алгинатне матрице утиче на морфологију, пречник и степен скупљања куглица након лиофилизације. Показано је да различита уља доводе до варијација у фактору сферичности (SF_{wet} 0,225-0,299; SF_{dried} 0,391-0,541) и структурној стабилности, што има значај за контролисано ослобађање и примену у прехранбеним системима.

У трећем потпоглављу (Антиоксидативна активност) показано је да сва испитивана уља поседују способност неутрализације слободних радикала, при чему је уље нане показало највећу активност ($23,3 \pm 1,0$ mmol TE/L), док је уље чајевог дрвета показало најслабију ($7,6 \pm 1,0$ mmol TE/L). Ови резултати су у складу са хемијским саставом уља и литературним подацима који повезују присуство одређених терпеноида са антиоксидативним капацитетом.

У четвртом потпоглављу (Антимикробна активност против *Salmonella Typhimurium*) показано је да сва уља испољавају значајну инхибиторну активност, са варијацијама у MIC (5-10 µg/mL) и MBC (10 и >10 µg/mL) вредностима. Лаванда и бергамот показали су већу ефикасност у односу на чајево дрво и нану, што се може повезати са њиховим хемијским профилем и потенцијалним синергистичким ефектима компонената.

У наредним потпоглављима (Резултати компјутерске анализе) примена машинског учења омогућила је идентификацију кључних молекулских подструктура повезаних са антимикробном активношћу. Показано је да одређени структурни мотиви, посебно фенолне групе, значајно повећавају вероватноћу биолошке активности, док други, попут алифатичних и бицикличних угљоводоника, имају негативан утицај. Добијени резултати су у складу са савременим хемоинформатичким студијама и пружају основу за даљу рационализацију односа структура-активност.

У завршном делу резултата приказана је интеграција експерименталних и рачунарских налаза, при чему је показано да хемијски састав, структурни мотиви и физичко-хемијске карактеристике заједно одређују биолошку активност етарских уља. Ови резултати потврђују мултифакторску природу антимикробног деловања и указују на значај комбиновања експерименталних и машинских приступа у развоју нових природних антимикробних агенаса.

Закључци. На основу спроведених истраживања може се закључити да хемијски састав етарских уља чајевца, лаванде, бергамота и нане одређује њихова антиоксидативна и антимикробна својства, при чему су уља различитих хемотипова показала значајне разлике у ефикасности. Показано је да се применом електростатичке екструзије у алгинатним матрицама могу успешно инкапсулирати етарска уља уз задовољавајућу морфолошку стабилност, што указује на потенцијал за њихову примену у прехранбеним системима. Резултати антиоксидативних испитивања потврдили су стабилност активности током складиштења, док је антимикробна активност зависила

од молекулског састава и поларности компонената. Применом машинског учења идентификоване су кључне молекулске подструктуре, посебно фенолни ароматични мотиви, као најзначајнији предиктори антибактеријске активности, чиме је успостављена веза између структуре и функције. Добијени резултати указују да интеграција експерименталних метода и хемоинформатике представља ефикасан приступ у развоју природних антимикробних система и даје основу за даља истраживања и примену у прехранбеној индустрији.

Литература. У дисертацији је на правилан начин наведено 300 литературних извора. Избор референци је актуелан и одговара предмету проучавања докторске дисертације.

Прилози. Као прилог дати су резултати рачунарске анализе и машинског учења који допуњују главна истраживања. Обухваћена је експлораторна анализа података, анализа мултиколинеарности, као и поступци обуке модела и процене перформанси. Приказана је пермутациона важност карактеристика, калибрационе криве, ROC AUC и криве прецизности-подсетљивости, као и корелационе матрице. Додатно су приказани графици парцијалне зависности и резултати поновног узорковања са проценама и 95% интервалима поузданости параметара модела. Прилози такође садрже детаљан преглед карактеристика коришћених у моделу. Сви прикази омогућавају транспарентну интерпретацију модела, проверу стабилности резултата и боље разумевање односа између молекулских подструктура и антимикробне активности.

5. ОСТВАРЕНИ РЕЗУЛТАТИ И НАУЧНИ ДОПРИНОС ДИСЕРТАЦИЈЕ

Реализацијом ове докторске дисертације детаљно су испитани хемијски састав, антимикробна и антиоксидативна својства етарских уља лаванде, чајевца, бергамота и нане, при чему је утврђено да хемијски профил и доминантне терпенске компоненте директно одређују биолошку активност сваког уља. Показано је да лаванда и бергамот испољавају већу антибактеријску ефикасност према *Salmonella Typhimurium* у поређењу са чајевцем и наном. Применом машинског учења и хемоинформатике успешно су идентификоване кључне молекулске подструктуре, посебно фенолни ароматични мотиви, као најзначајнији предиктори антибактеријске активности, чиме је успостављена квантитативна веза између структуре и функције компонената етарских уља. Инкапсулацијом етарских уља у калцијум алгинатне матрице методом електростатичке екструзије и сушењем лиофилизацијом постигнута је задовољавајућа морфолошка стабилност и контролисано ослобађање активних компоненти, што потврђује потенцијал овог приступа за примену у прехранбеним системима. Научни допринос дисертације огледа се у интеграцији експерименталних метода и рачунарских приступа заснованих на подацима, која омогућава рационално усмеравање даљих истраживања у правцу дизајна нових, природом инспирисаних антимикробних агенаса и отвара нове могућности за развој ефикасних природних конзерванаса у прехранбеној индустрији.

6. ОБЈАВЉЕНИ И САОПШТЕНИ РЕЗУЛТАТИ

У сарадњи са другим ауторима кандидат је објавио следеће научне радове:

Научни радови објављени у међународном часопису M21 = 1:

1. Zrimec, J., Kokina, M., Jonasson, S., Zorrilla, F., & Zelezniak, A. (2021). Plastic-degrading

potential across the global microbiome correlates with recent pollution trends. *mBio*, 12(5), e0215521. <https://doi.org/10.1128/mBio.02155-21>

Научни радови објављени у међународном часопису M22 = 2:

1. Kokina, M., Salević, A., Kalušević, A., Lević, S., Pantić, M., Pljevljakušić, D., Šavikin, K., Shamtsyan, M., Nikšić, M., & Nedović, V. (2019). Characterization, antioxidant and antimicrobial activity of essential oils and their encapsulation into biodegradable material followed by freeze-drying. *Food Technology and Biotechnology*, 57(2). <https://doi.org/10.17113/ftb.57.02.19.5957>
2. Zrimec, J., Buric, F., Kokina, M., Garcia, V., & Zelezniak, A. (2021). Learning the regulatory code of gene expression. *Frontiers in Molecular Biosciences*, 8, 673363. <https://doi.org/10.3389/fmolb.2021.673363>

Научни радови објављени у међународном часопису M23 = 1:

1. Lagerholm, M., Jovanović, M., Kuzmanović, M., Pešić, M., & Nedović, V. (2025). A machine learning-supported analysis of essential oil constituents targeting *Salmonella Typhimurium*. *Comprehensive Plant Biology (Botanica Serbica)*, 49 (1): 87-100. <https://doi.org/10.2298/CPB2501087L>

Научни радови објављени у индексираним међународним часописима који нису категорисани у КОБСОН-у = 3:

1. Kokina, M., Shamtsyan, M., Georgescu, C., Mironescu, M., & Nedović, V. (2019). Essential oil/alginate microcapsules: Obtaining and applying. *Immunopathologia Persa*, 5(1), e04-e04.
2. Kokina, M., Shamtsyan, M., Georgescu, C., & Mironescu, M. (2018). Antimicrobial activity of essential oils from plants against selected microorganisms. *Journal of Medical Bacteriology*, 7(1-2), 44-49.
3. Kokina, M., Frioui, M., Shamtsyan, M., Sibirtsev, V., Krasnikova, L., Konusova, V., & Simbirtsev, A. (2018). Influence of *Pleurotus ostreatus* β -glucans on the growth and activity of certain lactic acid bacteria. *Scientific Study & Research Journal*, 19(4), 465-471.

Научна саопштења са међународних скупова штампана у изводу (M34) = 11:

1. Kokina, M., Shamtsyan, M., Frioui, M., Sibirtsev, V., Krasnikova, L., & Konusova, V. (2018). Influence of *Pleurotus ostreatus* β -glucans on the growth and activity of specific lactic acid bacteria. 9th Central European Congress on Food (CEFood), Sibiu, Romania.
2. Kokina, M., Shamtsyan, M., Salević, A., Kalušević, A., Lević, S., Despotović, S., Pantić, M., Pljevljakušić, D., Šavikin, K., Nikšić, M., & Nedović, V. (2018). Characterization, antioxidant and antimicrobial activity of essential oils and embedding them into biodegradable material followed by freeze-drying. 9th Central European Congress on Food (CEFood), Sibiu, Romania.
3. Kokina, M., Shamtsyan, M., Georgescu, C., & Mironescu, M. (2017). Essential oils from several plants as antimicrobial agents against pathogenic microorganisms. Conference "Traditions and Innovations", Saint Petersburg, Russia.
4. Kokina, M., Shamtsyan, M. (2018). Plant essential oils as natural food preservatives. Conference

- “Innovative Materials and Technologies”, Saint Petersburg, Russia.
5. Kokina, M., Shamtsyan, M., Georgescu, C., & Mironescu, M. (2017). Encapsulation of volatile oil by using an alginate coating method. NeeFood Congress, Kaunas, Lithuania.
 6. Kokina, M., Shamtsyan, M., Georgescu, C., & Mironescu, M. (2017). Antimicrobial activity of essential oils from plants against selected microorganisms. Nutricon 2017, Skopje, Macedonia.
 7. Kokina, M., & Koleva, V. (2016). The probiotic activity against obesity. New Science - Experiences, Traditions, and Innovations, Omsk, Russia.
 8. Kokina, M., Yasnogorodskaya, O., Sivtsov, E., & Malov, V. (2015). Surface activity of acrylic substances in aqueous solutions. Baltic Polymer Symposium, Sigulda, Latvia.
 9. Kokina, M., Sivtsov, E., & Malov, V. (2015). The surface activity of acrylic monomers. Conference “Science Week”, Saint Petersburg, Russia.
 10. Kokina, M., & Sivtsov, E. (2015). Innovation in chemical technology as a factor of professional qualification specialists. Conference “Innovative Science and Contemporary Society”, Ufa, Russia.
 11. Kokina, M., Sivtsov, E., & Malov, V. (2015). The surface activity in aqueous solutions of some acrylic monomers. Surface Active Agents - 2015, Saint Petersburg, Russia.

7. ЗАКЉУЧАК И ПРЕДЛОГ

На основу анализе докторске дисертације под насловом: **“Хемијска карактеризација есенцијалних уља и примена машинског учења у анализи молекулских подструктура повезаних са антимикробном активношћу према *Salmonella Typhimurium* за потребе прехранбене индустрије”**, Комисија сматра да је дисертација урађена према одобреној пријави теме и да представља оригинално и самостално научно дело. У уводу и прегледу литературе аутор је детаљно анализирао литературу везану за хемијски састав и биолошку активност етарских уља, примену машинског учења у хемоинформатици и технике инкапсулације у биополимерним системима. На основу прегледа литературе успешно је образложена тематика докторске дисертације, предмет и циљеви истраживања су правилно дефинисани и постављени, док је програм истраживања добро осмишљен. Методе примењене у експерименталном и рачунарском делу су савремене и поуздане, а резултати су прегледно приказани, правилно анализирани и упоређени са резултатима других аутора. Из резултата су правилно изведени закључци. Научни допринос докторске дисертације огледа се у свеобухватном испитивању хемијског састава етарских уља лаванде, чајевца, бергамота и нане применом GC-MS анализе, испитивању антимикробне активности према *Salmonella Typhimurium* и антиоксидативног капацитета применом DPPH и ABTS тестова, као и у успешној инкапсулацији етарских уља у калцијум алгинатне матрице методом електростатичке екструзије и сушења лиофилизацијом. Применом регуларизоване логистичке регресије и Морганових структурних отисака су идентификоване кључне молекулске подструктуре, посебно фенолни ароматични мотиви, као најзначајнији предиктори антибактеријске активности, чиме је успостављена квантитативна веза између молекулске структуре и биолошке функције. Посебно значајан допринос представља развој методолошког оквира заснованог на интеграцији хемоинформатике и машинског учења, чија је ефикасност потврђена на испитиваним етарским уљима и који је по својој природи универзално применљив, односно може се адаптирати и проширити на етарска уља других биљних врста, друге микроорганизме и шире класе природних биоактивних једињења. Ово представља нови научни

допринос у разумевању мултифакторске природе антимикурног деловања етарских уља и ствара основ за будућа истраживања и практичну примену у развоју природних конзерванса у прехранбеној индустрији.

Имајући у виду квалитет, обим и научни допринос постигнутих и приказаних резултата, Комисија предлаже Наставно-научном већу Пољопривредног факултета Универзитета у Београду да позитивно оцени и прихвати овај Извештај, заједно са поднетом дисертацијом кандидата Марије Лагерхолм, мастер инжењер биотехнологије, под насловом: **“Хемијска карактеризација есенцијалних уља и примена машинског учења у анализи молекулских подструктура повезаних са антимикурном активношћу према *Salmonella Typhimurium* за потребе прехранбене индустрије”** и да након завршетка процедуре омогући кандидату јавну одбрану докторске дисертације пред Комисијом у истом саставу.

Београд - Земун
Датум: 30.04.2026. године.

Чланови Комисије:

др Ивана Средовић Игњатовић, ванредни професор
Универзитет у Београду - Пољопривредни факултет
Ужа научна област - Хемија

др Стева Левић, ванредни професор
Пољопривредни факултет, Универзитет у Београду
Ужа научна област - Биохемија

др Милена Пантић, ванредни професор
Универзитет у Београду - Пољопривредни факултет
Ужа научна област - Технолошка микробиологија

др Наташа Милосављевић, ванредни професор
Пољопривредни факултет, Универзитет у Београду
Ужа научна област - математика и информатика

др Милош Јовановић, ванредни професор
Факултет организационих наука, Универзитет у Београду
Ужа научна област - организационе науке

Оцена извештаја о провери оригиналности докторске дисертације

На основу Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду и налаза у извештају из програма iThenticate којим је извршена провера оригиналности докторске дисертације: **“Хемијска карактеризација есенцијалних уља и примена машинског учења у анализи молекулских подструктура повезаних са антимикуробном активношћу према *Salmonella Typhimurium* за потребе прехранбене индустрије”**, аутора Марије Лагерхолм, констатујем да утврђено подударање текста износи 28%. Овај степен подударности последица је библиографских података о коришћеној литератури, тзв. општих места и података, назива инструмената, произвођача и хемијских једињења, као и претходно публикованих резултата докторандових истраживања, који су проистекли из дисертације, што је у складу са чланом 9. Правилника.

На основу свега изнетог, а у складу са чланом 8. став 2. Правилника о поступку провере оригиналности докторских дисертација које се бране на Универзитету у Београду, изјављујемо да извештај указује на оригиналност докторске дисертације, те се прописани поступак припреме за њену одбрану може наставити.

У Београду, 06.04.2026. године.

Ментори

Проф. др Виктор Недовић

Проф. др Мирјана Пешић