



POLITECHNIKA BIAŁOSTOCKA

Wydział Budownictwa i Inżynierii Środowiska Zakład Chemii

ul. Zamenhofska 29, 15-435 Białystok, tel. 085 7469796, 085 7469781

Białystok, 07.01.2014

Prof. dr hab. Włodzimierz Lewandowski
Politechnika Białostocka
Zakład Chemii

Ocena rozprawy doktorskiej

*mgr Lecha Szczepaniaka pt. „Opracowanie systemu komputerowej identyfikacji
związków organicznych w analizie rozpoznawczej metodą GC/MS”
wykonanej pod kierunkiem prof. zw. dr hab. Walerija Isidorowa*

Praca dotyczy jednego z najtrudniejszych problemów chromatografii, tj. budowania baz danych, które umożliwiają identyfikację związków chemicznych. Może wydawać się, że jednoznaczna identyfikację związków umożliwiają widma mas zebrane w komercyjnych bazach danych. Okazuje się jednak, że największa komercyjna baza danych zawiera aktualnie widma mas około 640 tysięcy związków chemicznych, co stanowi tylko kilka procent poznanych do tej pory związków organicznych. Próba identyfikacji związków nieobecnych w bazach danych, poprzez interpretację widma mas jest możliwa tylko dla niektórych substancji. Nie osiągnięto do tej pory takiego zaawansowania w modelowaniu fragmentów jonów, aby było możliwe przewidywanie sposobu (kolejności) ich rozpadu, a w konsekwencji przewidywania postaci widma mas, co umożliwiłoby identyfikację. Problemy z identyfikacją są także wtedy, gdy widmo mas zostało zarejestrowane bez piku jonu molekularnego. Wówczas niezbędne są dodatkowe informacje, niezależne od widm mas, dodatkowe parametry identyfikacyjne. Przedstawiona praca mgr Lecha Szczepaniaka wychodzi temu zagadnieniu naprzeciw, gdzie Autor do celów identyfikacji proponuje (wykorzystuje) liniowe indeksy retencji.

Mgr Lech Szczepaniak podjął się zaprojektowania i stworzenia systemu komputerowej identyfikacji związków organicznych metodą chromatografii gazowej ze spektrometrią mas

(CG/MS). Chromatografia gazowa jest obecnie najczęściej stosowaną techniką chromatograficzną. Nowoczesne chromatografy gazowe są w stanie rozdzielić analizowane mieszaniny na setki, a nawet tysiąc składników. Współcześnie produkowane modele tych aparatów wyposażone są w wysokiej klasy komponenty zapewniające dużą powtarzalność mierzonych wielkości retencyjnych, do których należą czasy retencji (przy spełnieniu pewnych warunków) i indeksy retencji.

W celu realizacji postawionego sobie celu mgr Lech Szczepaniak rozwiązał następujące problemy badawcze:

- pełna automatyzacja procesu wprowadzania wartości danych retencyjnych z chromatogramów do zaprojektowanej w tym celu relacyjnej bazy danych,
- automatyzacja procesu wprowadzania widm mas substancji do biblioteki użytkownika,
- automatyzacja procesu wprowadzania wartości indeksów retencji (RI) substancji do relacyjnej bazy danych,
- opracowanie narzędzi do komputerowego wspomaganie jednoczesnej interpretacji indeksów retencji (RI) oraz widm mas i ich wykorzystanie do identyfikacji związków chemicznych,
- opracowanie narzędzi do komputerowego przewidywania wartości RI na podstawie możliwie prostych zależności korelacyjnych pomiędzy strukturą substancji organicznych a RI.

Przedmiotem badań mgr Lecha Szczepaniaka były: ekstrakty tkanek roślinnych, eksudaty roślinne, olejki eteryczne i ekstrakty pożytków pszczelich. Doktorant wykonał zarówno prace analityczne (przygotowanie ekstraktów do badań, wykonanie analiz chromatograficznych, identyfikacja analitów), badania statystyczne oraz stworzył system komputerowej identyfikacji GC/MS, który wymagał:

- zaprojektowania struktury bazy danych indeksów retencji i widm mas,
- opracowania algorytmów umożliwiających: (a) automatyzację wprowadzania do bazy danych chromatograficznych, oraz (b) identyfikację analitów wykorzystując język programowania Pascal oraz język systemu MSD Chemstation firmy Agilent.

Główne elementy systemu to dwa moduły oprogramowania i dwie bazy danych. Identyfikacja związku chemicznego odbywa się w dwóch etapach. W pierwszej kolejności moduł MSDChem dokonuje wstępnej identyfikacji każdej substancji zarejestrowanej na chromatogramie w postaci piku poprzez wygenerowanie listy możliwych substancji (jako wynik porównania z widmami mas zebranymi w bazie danych). W drugim etapie brany pod uwagę jest dodatkowy

parametr – liniowy indeks retencji. Stworzony przez mgr Lecha Szczepaniaka system komputerowej identyfikacji GC/MS pozwolił na możliwie maksymalną automatyzację zarówno procesu rejestracji danych, jak i identyfikacji substancji chemicznych. Opracowany przez Autora system komputerowy (zestaw programów komputerowych i dwie bazy danych) jest obecnie wykorzystywany w czterech laboratoriach:

- Zakładu Chemii Środowiska Instytutu Chemii Uniwersytetu w Białymstoku,
- Zakładu Zoologii Bezkręgowców Instytutu Biologii UwB,
- Pracowni Środowiska Leśnego Zamiejscowego Wydziału Leśnego w Hajnówce Politechniki Białostockiej,
- Zakładu Bromatologii Wydziału Farmaceutycznego Uniwersytetu w Białymstoku.

System umożliwia automatyczne wprowadzanie danych chromatograficznych z chromatogramów zarejestrowanych w systemie MSD Chemstation i z wykorzystaniem danych z bazy, identyfikację badanych związków.

Praca wykonana przez mgr Lecha Szczepaniak dotyczy bardzo ważnego i trudnego problemu identyfikacji związków chemicznych techniką chromatograficzną. Rozprawa podsumowuje badania chromatograficzne ponad 3 tysięcy próbek, co umożliwiło wprowadzenie ponad 5 tysięcy wartości indeksów retencji RI (I i I^T) substancji organicznych do baz danych. Sposób realizacji postawionego sobie celu nie budzi zastrzeżeń. Praca stanowi połączenie kilku dziedzin: chemii, biologii, statystyki, informatyki. Interdyscyplinarny charakter pracy jest jej niezwykłym atutem. Natomiast korzystanie z opracowanego systemu komputerowego przez laboratoria o różnej specjalności świadczy o ogromnej praktycznej wadze wyników rozprawy mgr Lecha Szczepaniaka. Doktorant mógł w pracy również bardziej szczegółowo opisać prace analityczne związane z przygotowaniem materiału biologicznego do badań, co niewątpliwie wskazuje na jego wielkie zaangażowanie oraz dużą wiedzę.

Praca doktorska składa się z części teoretycznej, w której Doktorant wykazał się dużą znajomością tematyki z zakresu identyfikacji związków chemicznych na podstawie indeksów retencji, czasów retencji, widm mas oraz opisał dostępne systemy komputerowej identyfikacji GC/MS (ich wady i zalety). W dalszej części rozprawy zawartych jest pięć prac będących podstawą pracy. Są to publikacje w czasopismach z listy filadelfijskiej o wysokim Impact Factor (*Journal of Chromatography A*, *Food Chemistry*, *Analytical Science*). Każda publikacja opatrzona jest wstępem opisującym najważniejsze zagadnienia oraz wkład Doktoranta. Dalej mgr Lech Szczepaniak dokładnie opisuje stworzony system komputerowej identyfikacji GC/MS (komponenty i mechanizm działania). Praca zawiera również 14 załączników

odnoszących się zarówno do części teoretycznej pracy jak i doświadczalnej (przedstawiony jest sposób działania programów oraz przykłady problemów z jakimi może spotkać się użytkownik). Praca zawiera 92 pozycje literaturowe pochodzące z literatury zagranicznej (pozycja 87 wydaje się być niekompletna). Praca napisana jest zrozumiale i estetycznie wykonana, a dobór i forma prezentowanego materiału są właściwe. Dyskusja prowadzona jest kompetentnie, rzetelnie, kolejność rozdziałów jest logiczna.

W podsumowaniu stwierdzam, że rozprawa doktorska mgr Lecha Szczepaniaka jest bardzo wartościowa, a badania nad poszerzaniem bazy oraz zwiększaniem funkcjonalności programów i baz powinny być kontynuowane. Cel rozprawy został osiągnięty. Prezentowane w rozprawie wyniki badań zostały opublikowane w postaci pięciu publikacji o zasięgu międzynarodowym. Autor jest ponadto współautorem 13 artykułów opublikowanych w czasopismach z listy filadelfijskiej oraz 2 artykułów w polskim piśmiennictwie. Udokumentowany znaczący dorobek naukowy z pewnością prognozuje dalszy rozwój naukowy. Doktorant posiada zasób wiedzy teoretycznej i umiejętność wykorzystania technik doświadczalnych co w pełni uzasadnia samodzielne prowadzenie przez niego prac naukowych w przyszłości.

Zdaniem recenzenta praca spełnia warunki stawiane rozprawom doktorskim określone w art. 13 ustawy z dn. 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. z 2003 r., nr 65 poz. 595 z późniejszymi zmianami), a także w Rozporządzeniu Ministra Edukacji Narodowej i Sportu z dn. 15 stycznia 2004 r. (Dz. U. 15 poz. 128) z późniejszymi zmianami. Wnoszę zatem, aby Wysoka Rada Wydziału Biologiczno-Chemicznego Uniwersytetu w Białymstoku dopuściła mgr Lecha Szczepaniaka do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

W Lewandowski