

Gdańsk, dnia 5 listopada 2013.

Prof. dr hab. inż. Jacek Namieśnik, prof. zw. PG
Katedra Chemii Analitycznej
Wydział Chemiczny Politechniki Gdańskiej
80-233 Gdańsk
ul. G. Narutowicza 11/12
tel: 58 - 347-10-10
58 - 347-21-10
fax: 58 - 347-26-94
e-mail: jacek.namiesnik@pg.gda.pl
lub chemanal@pg.gda.pl

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr Lecha SZCZEPANIAKA **Opracowanie systemu komputerowej identyfikacji związków organicznych w analizie rozpoznawczej metodą GC-MS** wykonanej w Zakładzie Chemii Środowiska na Wydziale Biologiczno-Chemicznym Uniwersytetu w Białymstoku pod kierownictwem prof. zw. dr hab. Walerija Isidorova.

Najczęściej przedmiotem zainteresowania analityków są próbki charakteryzujące się złożonym składem matrycy oraz obecnością w nich analitów na poziomie śladów a nawet ultraśladów i charakteryzujących się podobnymi właściwościami fizykochemicznymi.

To sprawia, że wykrycie, identyfikacja oraz ilościowe oznaczenie poszczególnych analitów stanowi poważne wyzwanie analityczne.

Problemy analityczne związane ze składem matrycy oraz śladowymi ilościami analitów mogą być pomyślnie rozwiązane na etapie przygotowania próbki do analizy poprzez zastosowanie odpowiednich technik izolacji i/lub wzbogacania analitów bo wtedy następuje:

- przeniesienie analitów do próbki wtórnej charakteryzującej się prostym składem matrycy przyjaznej w stosunku do stosowanego przyrządu kontrolno-pomiarowego (np. chromatografu gazowego),
- "podniesienie" stężenia analitów w tych próbkach do poziomu powyżej granicy wykrywalności metodyki analitycznej,
- usunięcie przynajmniej części składników przeszkadzających (interferentów) charakteryzujących się podobnymi właściwościami fizykochemicznymi jak anality.

Do rozwiązania pozostaje problem identyfikacji poszczególnych analitów obecnych na chromatogramie w przypadku stosowania określonej techniki chromatograficznej (np. GC) bądź też na spektrogramie, gdy odpowiednio przygotowane próbki poddaje się analizie z wykorzystaniem technik łączonych, czego przykładem może być zastosowanie zestawu chromatograf gazowy- spektrometr (detektor) mas.

W tym kontekście należy rozpatrywać wyniki programu badawczego zrealizowanego przez Doktoranta opisane w rozprawie doktorskiej wykonanej pod kierownictwem profesora Walerija Isidorowa, który jest autorytetem w zakresie rozwoju i praktycznego wykorzystania technik chromatograficznych.

Mgr Lech Szczepaniak postanowił rozwiązać ciekawy i ważny problem badawczy polegający na opracowaniu systemu komputerowej identyfikacji związków organicznych w trakcie badań z wykorzystaniem techniki GC-MS.

Nie mam wątpliwości, że do tego sukcesu przyczyniła się zarówno współpraca z takim specjalistą jak prof. W. Isidorow, jak i własne doświadczenie czego potwierdzeniem jest spis interesujących publikacji obejmujący 15 prac opublikowanych w renomowanych czasopismach naukowych. Prace te ukazały się drukiem w okresie 1986-2014 i są efektem współpracy z tak znanymi analitykami jak prof. Z. Witkiewicz oraz prof. I. G. Zenkewicz a przede wszystkim wspomniany już prof. W. Isidorow - promotor rozprawy doktorskiej.

Rozprawę doktorską stanowi cykl 5 publikacji oryginalnych opublikowanych w latach 2007-2014 wraz z komentarzem liczącym 13 stron tekstu oraz dodatkowe strony, na których przedstawiono:

- cel i zakres pracy,
- opis systemu komputerowej identyfikacji analitów na podstawie wyników analizy próbek z wykorzystaniem techniki GC-MS,
- podsumowanie.

Nie mam wątpliwości, że efekty programu badawczego realizowanego przez Doktoranta charakteryzują się elementami nowości naukowej.

Za najważniejsze uważam:

- zaprojektowanie struktury bazy danych indeksów retencji (RI) i widm mas,
- opracowanie algorytmów identyfikacji analitów opartych na jednoczesnym wykorzystaniu dwóch baz danych:
 - o indeksów retencji (RI),
 - o widm mas.

Opracowany system, został już wprowadzony do praktyki laboratoryjnej i stanowi istotne narzędzie wspomagające proces oznaczania szerokiego spektrum analitów organicznych obecnych w próbkach o różnym składzie matrycy w kilku laboratoriach analitycznych.

Można więc mówić o zrealizowaniu pełnego cyklu badań od pomysłu poprzez jego rozwinięcie i opracowanie pełnej koncepcji aż do wprowadzenia do praktyki analitycznej. To wielki sukces i może stanowić powód do wielkiej satysfakcji Doktoranta.

Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt wprowadzenia do międzynarodowego obiegu informacji naukowej proponowanych rozwiązań i uzyskanych wyników w postaci artykułów opublikowanych w czasopismach o najwyższej renomie naukowej a mianowicie:

- *Journal of Chromatography A* (IF = 4,612) - 3 prace,
- *Analytical Sciences* (IF= 1,569),
- *Food Chemistry* (IF = 3,334)

Ta ostatnia praca jest już dostępna w pełnej wersji choć oficjalnie zostanie opublikowana w roku 2014. W trzech pracach mgr L. Szczepaniak jest wskazany jako autor odpowiedzialny za prowadzenie korespondencji.

Do kopii każdego z artykułów stanowiących podstawę rozprawy doktorskiej dołączono:

- krótki opis programu badań i uzyskanych efektów,
- opis udziału Doktoranta w realizacji określonego zadania badawczego.

Analiza tych informacji stanowi mocną podstawę do stwierdzenia o znaczącym udziale merytorycznym mgr Lecha Szczepaniaka w rozwiązaniu problemów badawczych opisanych w w/wym cyklu prac oryginalnych.

Biorąc powyższe pod uwagę nie mam wątpliwości, że spełnione zostały wszystkie wymogi formalne i merytoryczne by rada Wydziału Biologiczno-Chemicznego Uniwersytetu w Białymstoku mogła podjąć uchwałę o dopuszczeniu mgr Lecha SZCZEPANIAKA do ostatniego etapu postępowania kwalifikacyjnego czyli do etapu publicznej prezentacji tez pracy.

Jednocześnie biorąc po uwagę:

- istotne elementy nowości naukowej i trudny do przecenienia potencjał innowacyjny uzyskanych wyników,
- publikację cyklu 5 prac oryginalnych w renomowanych czasopismach naukowych ($\Sigma IF = 18,739$)

z całym przekonaniem wnioskuję by Rada Wydziału podjęła dodatkową uchwałę o wyróżnieniu tej rozprawy doktorskiej.

