

Prof. dr hab. inż. Piotr Konieczka
Katedra Chemii Analitycznej
Wydział Chemiczny
Politechnika Gdańska
e-mail: piotr.konieczka@pg.edu.pl

Gdańsk, 7 lutego 2022

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr. Jędrzeja Mateusza Procha pt.:

**"Hyphenated systems based on detection by optical emission spectrometry
in determination of metals and metalloids species"**

*"Układy łączone oparte na detekcji przy użyciu spektrometrii emisji optycznej
w oznaczaniu form metali i metaloidów"*

Promotor pracy: prof. dr hab. Przemysław Niedzielski

Tematyka opiniowanej rozprawy dotyczy opracowania i wykorzystania układów łączonych, wykorzystujących na etapie oznaczeń końcowych emisyjną spektrometrię optyczną, w celu oznaczania poszczególnych form metali i metaloidów w próbkach o różnym składzie matrycy.

Podjęcie tematyki badawczej przez Doktoranta jest na pewno zgodne z trendami rozwojowymi badań w analityce chemicznej. W przypadku każdej z opracowanych metod przeprowadzono badania zgodnie ze schematem: optymalizacja-walidacja-pomiary dla próbek badanych.

Na opiniowaną rozprawę doktorską składają się 4 prace opublikowane w czasopiśmie JCR o sumarycznym współczynniku oddziaływania $IF = 23,022$, w których mgr Jędrzej Proch jest pierwszym ze współautorów. Załączone publikacje są poprzedzone ok. 30-stronicowym opracowaniem, w którym Doktorant zamieścił streszczenie badań (w języku polskim i angielskim), opisał cel badań zrealizowanych w ramach rozprawy doktorskiej, podał spis swojego dorobku naukowego oraz opisał

przebieg swojej działalności naukowej. Pragnę w tym miejscu przyznać, że jak na tak krótki okres dorobek ten zasługuje na szczególne podkreślenie jako wręcz imponujący. Ponadto w tej części rozprawy znajduje się także swego rodzaju „przewodnik” po załączonych pracach, którego układ: Wstęp – Materiały i metody – Komentarze – Podsumowanie i perspektywy, odpowiada układowi „klasycznej” rozprawy doktorskiej. Ta część rozprawy w sposób bardzo przejrzysty i skondensowany opisuje zarówno cel badań jak i ich planowanie oraz przeprowadzenie.

Ponieważ prace będące podstawą rozprawy doktorskiej zostały już opublikowane w recenzowanych czasopismach, zatem zostały już poddane ocenie. Z tego powodu, należałoby przyjąć założenie, że moja recenzja powinna ograniczyć się jedynie do treści rozdziałów wstępnych. Jednak z racji tego, iż dysertacja wpisuje się także w szeroko pojętą tematykę jakości wyników pomiarów analitycznych, biorąc pod uwagę podstawowe zasady metrologii, szczególnie chemicznej, muszę odnieść się do pewnych niejasności w prezentowaniu wyników zestawionych w tych pracach.

1. W pracy D1 w Tabeli 2 w przypadku zakresu liniowości podano jako wartość najmniejszą LOD – np.: LOD-1000 $\mu\text{g/L}$ a w pracy D3 w Tabeli 2 LOQ, np.: LOQ-20 mg/L . Który z tych zapisów jest zdaniem Doktoranta poprawny z punktu widzenia metrologii chemicznej i jakości wyników pomiarów? Proszę o komentarz.
2. Doktorant we wszystkich pracach prezentuje wyniki pomiarów i/lub obliczeń (w przypadku podawania zawartości indywidualów w próbce i odzysku procedury) jako: wartość średnia \pm wartość. Tu pierwsze moje pytanie. Nie we wszystkich przypadkach podawana jest wartość zapisana po znaku \pm . W niektórych jest co prawda informacja, iż jest to odchylenie standardowe, jednak nie jest to informacja wystarczająca. Niespójny jest jednak sposób zapisu wyników. Poprosiłbym o komentarz dotyczący poprawnej liczby cyfr znaczących podawanych zarówno w przypadku wartości odchylenia standardowego (lub niepewności) i w konsekwencji poprawnego zapisu wartości średniej.
3. W poszczególnych pracach Doktorant stosuje akronimy i związane z tym ich rozwinięcia w stosunku do granicy wykrywalności: LOD, ND czy BDL, oraz w stosunku do granicy oznaczalności: LOQ, BQL. Skąd wynika takie „spektrum”



tych akronimów? Który z nich Doktorant uważa za najbardziej metrologicznie poprawny?

Pozostałe uwagi

1. W polskojęzycznym streszczeniu pracy wielokrotnie pojawia się termin „nebulizacja”. Czy jest to zdaniem Doktoranta termin poprawny?
2. W przypadku wyznaczenia parametrów walidacyjnych, jednym z najważniejszych jest dokładność jako funkcja poprawności i precyzji. Najbardziej pożądanym sposobem wyznaczania odzysku procedury (miara poprawności) jest zastosowanie certyfikowanych materiałów odniesienia. Niestety liczba dostępnych CRM jest bardzo ograniczona, a z drugiej strony nie wszystkie mogą być stosowane w danego typu oznaczeniach. Doktorant w swoich badaniach, właśnie z tych powodów, stosował głównie metodę dodatku wzorca. Czy, biorąc pod uwagę wyniki otrzymanych badań, jak i własne doświadczenie, w stosunku do *yerba mate*, istnieje szansa na wytworzenie tego typu materiału odniesienia? Jeśli tak to jaki sposób Doktorant zaproponowałby w celu realizacji tego przedsięwzięcia?
3. Podsumowując, prosiłbym o krótkie opisanie ewentualnych dalszych perspektyw związanych z wykorzystaniem i/lub modyfikacjami opracowanych w ramach realizacji rozprawy doktorskiej procedur analitycznych.

Wymienione powyżej uwagi i pytania nie zmieniają mojej bardzo pozytywnej oceny merytorycznej pracy.

Praca w mojej ocenie spełnia aktualne wymagania merytoryczne i formalne Ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. Nr 65, poz. 595, z późn. zm.), z dnia 14 marca 2003 r.; wnoszę więc o dopuszczenie mgr. Jędrzeja Mateusza Procha do kolejnych etapów przewodu doktorskiego.


KIEROWNIK
Katedry Chemii Analitycznej
prof. dr hab. inż. Piotr Konieczka



WNIOSEK O WYRÓŻNIENIE ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

mgr. Jędrzeja Mateusza Procha

Biorąc pod uwagę poniższe aspekty:

1. Imponujący dorobek naukowy Doktoranta, który znajduje odbicie w tzw. „parametrach scjentometrycznych”:
 - 22 opublikowane prace w czasopismach z listy JCR,
 - H-index – 6,
 - 91 niezależnych cytowań
 - Sumaryczny IF – 76,41, co w przeliczeniu na jedną pracę daje wartość średnią 3,47

W pracach, które są podstawą rozprawy doktorskiej Doktorant jest pierwszym ze współautorów, a Jego udział w nich jest dominujący, co zostało zawarte w załączonych oświadczeniach pozostałych współautorów.

2. Podjęta w ramach realizacji rozprawy doktorskiej tematyka badawcza, wpisuje się w szeroko pojęty trend rozwojowy nowoczesnych procedur analitycznych, za pomocą których możliwe jest jednoczesne oznaczanie wielu analitów na niskich i bardzo niskich poziomach zawartości w próbkach o różnym, często bardzo skomplikowanym składzie matrycy. Opracowane w ramach rozprawy doktorskiej procedury są na pewno selektywne, co jest pierwszym, niezbędnym z warunków, jakie są wymagane w tego typu procedurach. Spełnione są na pewno wymagania dotyczące nowości naukowej. Na podkreślenie zasługuje ponadto zarówno planowanie jak i bardzo logiczne i konsekwentnie prowadzone postępowanie w celu opracowania procedur analitycznych. W stosunku do każdej z opracowanych procedur wyznaczono optymalne warunki jej przeprowadzenia a zastosowanie procedury do analizy próbek zostało poprzedzone każdorazowo bardzo rzetelnym procesem walidacji. Pragnę podkreślić dodatkowo, że ta część badań służących do opracowania procedury analitycznej została wykonana przez Doktoranta w sposób jak najbardziej zgodny z zaleceniami i rekomendacjami spełniając tym samym wymagania metrologii chemicznej.

Dodatkowo, Doktorant wykazał się w trakcie realizacji badań szeroką wiedzą nie tylko z zakresu analityki chemicznej, stosując zaawansowane techniki spektroskopowe i chromatograficzne w systemach łączonych, ale także wykorzystania i poprawnego stosowania narzędzi chemometrycznych i statystycznych. Potwierdził przy ich wykorzystaniu zarówno miarodajność otrzymanych wyników analiz, a przede wszystkim słuszność postawionych wniosków.

3. Doktorant brał aktywny udział w wymianie wiedzy naukowej o czym świadczą:

- liczne Jego udziały w konferencjach naukowych, krajowych jak i zagranicznych, w trakcie których Doktorant prezentował wyniki swoich badań, zarówno w formie posterów jak i prezentacji ustnych,
- pobyt, na niemal miesięcznym (skróconym ze względów na pandemię) zagranicznym stażu naukowym,
- członkostwo w komitetach organizacyjnych konferencji naukowych.

Pokazuje to pełne zaangażowanie w prowadzenie działalności naukowej, zwłaszcza w obszarze wymiany doświadczeń badawczych.

4. Spełnione zostały wymagania formalne zawarte w Zarządzeniu nr 3/2021 Dziekana Wydziału Chemii UAM z dnia 21 czerwca 2021 w sprawie procedury wyróżniania rozpraw doktorskich.

W związku z tym, nie mam najmniejszych wątpliwości co do wyróżniającego charakteru przedstawionej do recenzji rozprawy doktorskiej mgr. Jędrzeja Mateusza Procha. Doktorant, w mojej opinii, z naddatkiem spełnia wymagania dotyczące dorobku naukowego a także nowości naukowej zawartej w rozprawie doktorskiej, czyli opublikowanych czterech pracach aplikacyjnych. Wykazał On poza tym bardzo dobrą znajomość zarówno wykorzystywanych, bardzo zaawansowanych technicznie, technik analitycznych jak i narzędzi stosowanych na etapie opracowywania uzyskanych wyników pomiarów. W trakcie zapoznawania się, zwłaszcza ze wstępem i podsumowaniem badań wchodzących w skład rozprawy doktorskiej, daje się odczuć niewątpliwą pasję Doktoranta.

Poza tym, mgr Jędrzej Mateusz Proch od listopada 2021 jest zatrudniony na etacie dydaktycznym w macierzystej Uczelni, co dodatkowo dowodzi docenieniu Jego predyspozycji do pracy naukowo-dydaktycznej.

Reasumując, niniejszym wnoszę do Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne UAM o wyróżnienie rozprawy doktorskiej mgr. Jędrzeja Mateusza Procha.



KIEROWNIK
Katedry Chemii Analitycznej
prof. dr hab. inż. Piotr Konieczka