

Dr hab. inż. Paweł Mochalski, prof. UJK

Kraków, 9 sierpnia 2025 r.

Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych

Uniwersytet Jana Kochanowskiego w Kielcach

RECENZJA ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

mgr Izabeli Pauliny Wolańskiej

pod tytułem

**„Wykorzystanie spektrometrów ruchliwości jonów do badania
procesów jonizacji chemicznej”**

Recenzję sporządzono na zlecenie Wojskowej Akademii Technicznej im. Jarosława Dąbrowskiego na podstawie przedłożonej rozprawy doktorskiej w odniesieniu do postanowień art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z późniejszymi zmianami.

Przedstawiona do oceny rozprawa doktorska została wykonana w Zakładzie Radiometrii i Monitoringu Skażeń WAT pod kierunkiem naukowym Pana dra hab. inż. Jarosława Putona, prof. WAT (promotor), oraz Pani dr inż. Edyty Budzyńskiej (promotor pomocniczy).

Ocena dorobku naukowego

Dorobek naukowy Pani mgr Izabeli Pauliny Wolańskiej stanowi zbiór spójnych tematycznie prac obejmujący cztery publikacje naukowe w renomowanych czasopismach indeksowanych w bazie Journal Citation Reports (JCR): *Analytical Chemistry* (2 prace), *Analytical and Bioanalytical Chemistry* i *Molecules*. Sumaryczny *Impact Factor* tych artykułów wynosi 22,627, a ich sumaryczna punktacja MNiSW=487. Średnią wartość IF wynosi 5,656 na publikację.

Dorobek naukowy Doktorantki uzupełnia jedna publikacja [3], która została opublikowana w kwartalniku *Analityka*. Po uwzględnieniu tej pracy sumaryczna liczba punktów MNiSW artykułów Autorki wynosi 507. Wszystkie artykuły Doktorantki to publikacje oryginalne, które zostały opublikowane w latach 2021-2024. Wszystkie prace są wieloautorskie. Dwie prace zostały przygotowane przez 4 autorów [3, 4], natomiast pozostałe prace powstały przy udziale trzech współautorów.

Wobec braku szczegółowych informacji o udziale poszczególnych współautorów w powyższych pracach trudno określić wkład Doktorantki w powstanie powyższych artykułów. Musiał być on jednak znaczący, gdyż Doktorantka jest pierwszym autorem aż czterech publikacji stanowiących Jej dorobek naukowy. Jedynie w przypadku publikacji w czasopiśmie *Molecules* udział Autorki został wyszczególniony i polegał na wykonywaniu eksperymentów naukowych, analizie danych doświadczalnych, interpretacji wyników i współredagowaniu manuskryptu.

Zawartość rozprawy doktorskiej

Przedstawiona do recenzji rozprawa liczy 162 strony i składa się z trzech rozdziałów podzielonych na podrozdziały i poprzedzonych spisem treści, spisem symboli i wykazem akronimów. Praca ma charakter tradycyjnej rozprawy o charakterze monograficznym, a jej układ jest typowy z podziałem na część teoretyczną i eksperymentalną.

Część opisową rozpoczyna nienumerowany rozdział zatytułowany „Wprowadzenie” (6 stron), w którym Doktorantka w sposób zwięzły opisuje znaczenie i rolę spektrometrii ruchliwości jonów w analityce oraz historię jej rozwoju. Nie jest dla mnie jasne dlaczego Autorka nie zdecydowała się tutaj uzasadnić w sposób zwięzły wyboru tematyki badawczej, celów pracy oraz jej zawartości. Te informacje czytelnik znajduje dopiero w rozdziale 2.1. W mojej ocenie logika i struktura rozprawy zyskałyby, gdyby cele badawcze pracy zostały jasno sformułowane na początku dysertacji, a treści zawarte w tej części rozprawy stanowiły pierwszą część rozdziału „Część literaturowa”.

Rozdział pierwszy pt.: „Część literaturowa” (60 str.) jest podzielony na dwa podrozdziały.

W podrozdziale „Podstawy spektrometrii ruchliwości jonów” (11 str.) podzielonym na trzy podrozdziały opisano podstawowe zjawiska zachodzące w spektrometrach ruchliwości jonów

oraz zdefiniowano pojęcia opisujące te zjawiska. Omówiono w nim także elementy teorii ruchliwości. W ostatniej części tego podrozdziału Autorka omawia i porównuje różne techniki ruchliwości jonów oraz dyskutuje główne obszary ich zastosowań. Słusznie Doktorantka podkreśla znaczenie zastosowań technik IMS jak wykrywanie skażeń chemicznych, czy materiałów wybuchowych. To przybliży czytelnikowi znaczenie podjętych badań. Szkoda, że nie wspomniano jednak tutaj o opracowanej ostatnio technice High Kinetic Energy - Ion Mobility Spectrometry (HiKE-IMS).

Rozdział 1.2 zatytułowany „Procesy jonizacji chemicznej zachodzącej w IMS” (49 str.) jest podzielony na kolejne pięć podrozdziałów. Podrozdział 1.2.1. zawiera krótkie omówienie procesów jonizacji chemicznej w trybie dodatnim IMS, zaś rozdział 1.2.2. opisuje procesy jonizacji w trybie ujemnym. Z kolei podrozdział 1.2.3. stanowi skondensowany opis podstaw kinetyki reakcji jonowo-cząsteczkowych zachodzących w detektorach IMS. W szczególności przedstawiono tu najważniejsze modele kinetyczne reakcji jonowo-cząsteczkowych oraz klasyczne metody wyznaczania stałej szybkości reakcji. Kolejny podrozdział 1.2.4. to opis podstaw termodynamiki reakcji jonowo-cząsteczkowych oraz metod pomiaru parametrów termodynamicznych reakcji. Ostatni podrozdział 1.2.5. to krótki przegląd prac naukowych dotyczących badań nad procesami jonizacji wykorzystujących spektrometrię ruchliwości jonów.

Rozdział drugi pt.: „Część doświadczalna” (58 str.) jest podzielony na pięć podrozdziałów.

Podrozdział 2.1. zatytułowany „Cel i zakres pracy” (1 str.) zawiera sformułowanie celu pracy jako „zbadać procesy jonizacji chemicznej zachodzących w gazach za pomocą spektrometru ruchliwości jonów z komorą dryftową” oraz zawartość pracy. W mojej ocenie tak sformułowany cel pracy jest bardzo ogólny i wymaga doprecyzowania. Autorka nie wyjaśnia bliżej dlaczego podjęła taką, a nie inną tematykę badawczą. Staje się to zrozumiałe dopiero po przestudiowaniu dalszych rozdziałów rozprawy doktorskiej. Takie syntetyczne uzasadnienie pozytywnie wpłynęłoby na przejrzystość pracy.

Podrozdział (2.2.) zatytułowany „Materiały i aparatura badawcza” (16 str.) rozpoczyna szczegółowy opis spektrometru ruchliwości jonów DT IMS używanego przez Doktorantkę w trakcie realizacji pracy. Następnie (podrozdział 2.2.2.) Autorka omawia metodyki i warunki przeprowadzonych operacji, zastosowanie instrumentarium do wytwarzania mieszanin

gazowych badanych substancji (2.2.4.) oraz metodę obliczeń ich finalnych stężeń w gazach nośnym i dryftowym (2.2.5.). Należy zaznaczyć, że rozdział ten zawiera szczegółowe opisy wszystkich parametrów analitycznych, co pozwala na wnikliwą i rzetelną ocenę badań wykonanych przez Autorkę oraz przeprowadzenie podobnych eksperymentów przez innych badaczy.

Kolejny podrozdział „Badania procesów jonizacji w trybie dodatnim” jest pierwszym rozdziałem zawierającym oryginalne wyniki Autorki i zawiera opis wyników badań procesów jonizacji trzech związków chemicznych: toluenu, p-ksylenu oraz 2-pentanonu w detektorze IMS dla różnych wartości temperatury i wilgotności próbki w komorze dryftowej. Słusznie Doktorantka zwraca uwagę na znaczący wpływ wilgotności na proces jonizacji analitów poprzez przeniesienie protonu i tym samym kształt ich krzywych kalibracyjnych. W dalszej części tego podrozdziału Autorka proponuje metodę oszacowania stałych szybkości reakcji dla wspomnianych wyżej związków na podstawie parametrów uzyskanych krzywych kalibracyjnych. W mojej opinii tytuł tego rozdziału jest nieadekwatny do jego zawartości, gdyż badania wykonano tylko dla trzech substancji i dotyczyły one w zasadzie tylko reakcji przeniesienia protonu. W tej części pojawiły się także pewne nieścisłości, które przedstawię w dalszej części recenzji.

W następnym podrozdziale pt. „Badania procesów tworzenia i rozpadu zlepków jonowych” Autorka prezentuje wyniki badań nad procesami tworzenia i rozpadu adduktów jonowo-cząsteczkowych w trybach ujemnym i dodatnim. Rozdział ten podzielony jest na dwie części. W pierwszej z nich Doktorantka bada procesy tworzenia adduktów zawierających jon chlorkowy przy pomocy dwóch związków chloroorganicznych; chlorku benzylu i chlorobenzenu. Uzyskane wyniki pozwoliły Doktorantce na wyznaczenie stałej równowagi tworzenia jonów tego typu dla cząsteczek chlorku benzylu oraz entalpii rozpadu i energii aktywacji. W dalszej części tego podrozdziału Autorka prezentuje wyniki badań procesów tworzenia i rozpadu uwodnionych jonów Cl^- , Br^- , I^- , H_3O^+ , O_2^- i NH_4^+ dla różnych wartości temperatury i wilgotności w komorze reakcyjnej. W przekonujący sposób demonstruje tu silny wpływ stopnia uwodnienia badanych jonów na ich ruchliwość. Następnie na podstawie własnych obliczeń teoretycznych oraz uzyskanych doświadczalnie wartości efektywnych ruchliwości zredukowanych oblicza wartości ruchliwości zredukowanych badanych jonów dla różnych stopni ich uwodnienia. W efekcie Autorka proponuje model matematyczny

pozwalający przewidzieć wartość efektywnej ruchliwości zredukowanej uwodnionych jonów dla określonych warunków w komorze dryftu. Zaproponowany model wykazuje dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi. Ta weryfikacja modelu jest dodatkowym atutem rozprawy.

Ostatnia część rozdziału 2. (2.4.) dotyczy badań kinetyki wychwytu elektronów przez trzy związki halogenopochodne w spektrometrze IMS. Wymiernym wynikiem tej części pracy jest oszacowanie wartości stałej wychwytu elektronów dla różnych stężeń chlorku benzylu, chlorobenzenu i chlorku benzalu dla różnych temperatur w komorze reakcji. Szkoda, że Autorka nie zdecydowała się porównać uzyskanych wyników w wartościami literaturowymi.

Rozdział czwarty to „Podsumowanie i wnioski” (3,5 str.). Autorka podsumowuje w nim swoje dokonania naukowe opisane w dysertacji i dowodzi, że postawione cele zostały osiągnięte.

Kolejny rozdział jest nienumerowany i zawiera wykaz cytowanej literatury liczący 154 pozycje. Pracę zamykają spis rysunków (3 str.), spis tabel (1,5 str.), opis dorobku naukowego Doktorantki (0,5 str.) oraz jednostronicowe streszczenia w języku polskim i angielskim.

Dysertacja jest bogato udokumentowana rysunkami i schematami (41) oraz 19-ma tabelami. W moim odczuciu rysunki umieszczone w pracy są jednak dosyć małe i tym samym mało czytelne. Muszę także przyznać, że struktura pracy jest nieco zbyt rozbudowana (aż 3 poziomy podrozdziałów), co w mojej ocenie negatywnie wpływa na jej przejrzystość. Pod względem edytorskim dysertacja jest przygotowana starannie, a tekst napisany jest jasnym i poprawnym językiem. W kilku miejscach autorka posługuje się jednak językiem żargonowym, lub nieadekwatnymi określeniami jak np.:

Tabela 6.: „... w *modzie dodatnim*”. Powinno być „... w trybie dodatnim”.

Strona 90: „Wybrany związek chemiczny przenika przez *septę*...” Powinno być „Wybrany związek chemiczny przenika przez *membranę*...”

Mam także zastrzeżenia odnośnie często stosowanego w pracy terminu „zlepek jonowy”, czy „jon zlepkowy”. Muszę przyznać, że nie spotkałem się z takimi określeniami i odnoszę wrażenie że są to terminy żargonowe. W moim przekonaniu terminy „addukt”, czy „addukt jonowo-cząsteczkowy” byłyby właściwsze.

Oprócz powyższych nieścisłości, zauważyłem kilka niezgrabnych sformułowań oraz wyrażeń, czy zdań wymagających poprawy składni.

Ocena merytoryczna

Gwałtowny rozwój technik analitycznych jaki nastąpił w ostatnim dziesięcioleciu zaowocował powstaniem bogatego instrumentarium specyficznych, czułych i precyzyjnych narzędzi analitycznych. Ich wykorzystanie wywołało rewolucję w poznaniu i opisanu wielu zjawisk i procesów na poziomie molekularnym. Niestety w wielu przypadkach nadal nie mamy pełnej wiedzy dotyczącej zjawisk i procesów będących podstawą ich działania. Wynika to po części z dążeń producentów do szybkiego wprowadzenia nowego produktu na rynek, a także wysokiego stopnia skomplikowania tych zjawisk. Dotyczy to w szczególności spektrometrii ruchliwości jonów. W tym kontekście praca Pani mgr Izabeli Pauliny Wolańskiej stanowi ważny krok w kierunku uzupełnienia tej wiedzy.

Tematyka badawcza Pani mgr Izabeli Pauliny Wolańskiej dotyczy badania wybranych procesów jonizacji chemicznej zachodzących w gazach pod ciśnieniem atmosferycznym w spektrometrach ruchliwości jonów (IMS). Zakres badań obejmował trzy zagadnienia. Pierwsze dotyczyło badania kinetyki reakcji przeniesienia protonu w trybie dodatnim tj. wpływu temperatury i wilgotności na stałą szybkości tej reakcji i tym samym czułość spektrometru przy użyciu wybranych substancji. Druga część badań polegała na badaniu procesów powstawania adduktów jon-cząsteczka w spektrometrze IMS, ze szczególnym uwzględnieniem tworzenia jonów uwodnionych. To zagadnienie ma szczególne znaczenie nie tylko dla zrozumienia procesów powstawania sygnału w spektrometrach IMS, ale też w technikach pokrewnych jak np. spektrometria mas z jonizacją poprzez przeniesienie protonu (PTR-MS), czy spektrometria mas wybranych jonów z reakcyjną komorą przepływową (SIFT-MS). Trzecie zagadnienie dotyczyło badania procesu wychwytu elektronów w trybie ujemnym substancji halogenopochodnych. Badania te zaowocowały wyznaczeniem stałych szybkości wychwytu elektronów dla różnych warunków w komorze dryftu.

Słowa uznania należą się promotorom za bardzo aktualny temat pracy a Autorce za realizację tego tematu. Nie mam najmniejszej wątpliwości, że tematyka jest ważna, ciekawa, wielowątkowa i stanowi podejście zarówno koncepcyjne jak i metodyczne, mieszczące się w kanonie wymaganej tzw. „nowości naukowej”. W tym miejscu należy także podkreślić

trafność wyboru użytych technik instrumentalnych i obliczeniowych dzięki którym według mojej oceny wytyczone cele badań zostały osiągnięte.

Za najważniejsze dokonania Doktorantki należy uznać:

1. Zaproponowanie oryginalnej metodyki wyznaczania wielkości opisujących procesy tworzenia i rozpadu adduktów jon-cząsteczka w detektorze DT-IMS jak stała równowagi reakcji, entalpia rozpadu i energia aktywacji tego procesu dla różnych warunków panujących w komorze reakcyjnej detektora DT-IMS na przykładzie jonu Cl^-
2. Przeprowadzenie gruntownych badań procesów uwodnienia sześciu rodzajów lekkich jonów istotnych dla spektrometrii ruchliwości jonów; Cl^- , Br^- , I^- , H_3O^+ , O_2^- i NH_4^+ w celu określenia ich efektywnych ruchliwości zredukowanych.
3. Określenie abundancji i wartości ruchliwości zredukowanych jonów Cl^- , Br^- , I^- , H_3O^+ , O_2^- i NH_4^+ o różnym stopniu uwodnienia dla różnych warunkach temperatury i wilgotności w komorze reakcyjnej spektrometru IMS, oraz opracowanie modelu matematycznego pozwalającego przewidzieć wartości efektywnej ruchliwości zredukowanej tych jonów.
4. Zaproponowanie oryginalnej metodyki wyznaczania stałych szybkości wychwytu elektronów w spektrometrze DT-IMS na przykładzie chlorku benzylu, chlorobenzenu i chlorku benzalu.
5. Zaproponowanie procedury szacowania stałych szybkości reakcji przeniesienia protonu z wykorzystaniem krzywych kalibracyjnych i zależności kinetycznych na przykładzie toluenu, ksylenu i 2-pentanonu.

Na podstawie przedstawionych wyników mogę jednoznacznie stwierdzić, że wyniki prac Pani mgr Izabeli Pauliny Wolańskiej mogą mieć istotne znaczenie użytkowe. Tematyka podjęta przez Doktorantkę wpisuje się w nurt badań ukierunkowanych na zrozumienie i wyjaśnienie procesów i zjawisk zachodzących w spektrometrach ruchliwości jonów i instrumentach pokrewnych (PTR-MS, SIFT-MS), a tym samym może przyczynić się do optymalizacji ich pracy oraz dalszego ich rozwoju. Przedmiot badań jest również trudnym wyzwaniem analitycznym, które wymusza stosowanie niestandardowych rozwiązań i konieczność żmudnego i precyzyjnego doboru warunków eksperymentalnych. Dysertacja wyczerpująco traktuje omawiane kwestie i dobrze dokumentuje żmudne poszukiwania prowadzące do optymalnych rezultatów. W szczególności chciałbym podkreślić dobry sposób komunikacji z czytelnikiem i formę prezentowania wyników badań.

Zadaniem recenzenta jest jednak zwrócić uwagę na najistotniejsze niedociągnięcia, niejasne sformułowania czy wręcz pomyłki dostrzeżone podczas recenzji rozprawy. Poniżej wymieniam najważniejsze uwagi jakie nasunęły mi się podczas lektury pracy:

1. Na stronie 20 Autorka określa proces formowania jonów próbki w IMS jako jonizację chemiczną pod ciśnieniem atmosferycznym (APCI). W mojej ocenie nie jest to termin adekwatny, gdyż część spektrometrów ruchliwości jonów pracuje pod obniżonym ciśnieniem. Lepszym określeniem byłaby tu po prostu jonizacja chemiczna (ang. Chemical Ionisation, CI).
2. Strona 43. „Reakcja zlepkiwania”. W moim przekonaniu lepszym określeniem tej reakcji jest „reakcja asocjacji”, co byłoby spójne z terminologią analogicznej reakcji w trybie dodatnim (roz. 1.2.1.2.)
3. Na stronie 59 Autorka stwierdza, że w technice PTR-MS nie stosuje się filtru mas. Nie jest to informacja prawdziwa. W instrumentach PTR-MS stosowane są standardowo filtry kwadrupolowe, a w aparatach o lepszej rozdzielczości analizatory czasu przelotu (TOF).
4. Na stronie 57 angielską nazwę SIFT-MS Autorka tłumaczy jako „spektrometria mas ze strumieniem wybranych jonów”. Myślę, że bardziej adekwatne byłoby tłumaczenie „spektrometria mas wybranych jonów z reakcyjną komorą przepływową”, które podkreśla specyfikę warunków panujących w komorze reakcyjnej w tej technice.
5. Strona 83. Dlaczego w badaniach procesów wychwytu elektronów stosowano stałą spektrometru przed kalibracji?
6. Na stronie 88 podano, że badane substancje chemiczne wytypowano na podstawie przeglądu literatury. W moim przekonaniu Autorka powinna przedstawić tutaj bardziej szczegółowe kryteria wyboru takich, a nie innych związków chemicznych badanych w poszczególnych eksperymentach.
7. Rysunek 17b. Dane pomiarowe uzyskane dla tego wzorca nie pozwalają na rzetelne wyznaczenie emisji bromoheksanu w czasie, czy określenie jej stabilności.
8. We wzorze 106 jak i w tekście rozdziału 2.3. autorka używa litery S na oznaczenie czułości jak i sygnału analitycznego/powierzchni pików. Jest to mylące dla czytelnika i utrudnia zrozumienie prezentowanych obliczeń. W wspomnianym wzorze nie opisano

- także w sposób jednoznaczny występujących w nim wielkości. Na przykład, dla różnicy powierzchni pików ΔS_{ar} nie podano, o które piki chodzi.
9. Na stronie 98 brakuje informacji o ilości poziomów stężeń wzorców wykorzystanych do wyznaczenia krzywych kalibracyjnych, oraz kryteriach ich doboru. Ma to istotne znaczenie gdyż najniższy poziom stężeń substancji jest później wykorzystany do obliczenia czułości. Czy krzywe kalibracyjne dla różnych warunków wyznaczano zawsze dla takich samych poziomów stężeń?
 10. Wydaje mi się, że na rysunku 19a błędnie opisano prezentowane widma. Widmo zarejestrowane przy braku toluenu w gazie nośnym (kolor czarny) wykazuje najniższy sygnał dla jonów reakcyjnych p_2 . Autorka błędnie stosuje tu także kropkę jako separator dziesiętny w legendzie rysunków.
 11. Na rysunku 19a Autorka identyfikuje pik p_4 jako MNO^+ . Na jakiej podstawie? W spektrometrach IMS pracujących pod ciśnieniem atmosferycznym w trybie dodatnim powstające jony NO^+ podobnie jak i jony O_2^+ ulegają w szeregu reakcji szybkiej konwersji do $H_3O^+ \cdot (H_2O)_n$, dlatego zazwyczaj nie są obserwowane na rejestrowanych widmach. Nie obserwujemy także reakcyjnego pików NO^+ w widmach na rysunku 19a. Skąd więc jony MNO^+ ? Co więcej, pik p_4 wydaje się obecny w widmie uzyskanym dla gazu nośnego nie zawierającego toluenu, co może sugerować, że jest on wynikiem np. zanieczyszczenia tego gazu. Analogiczna uwaga dotyczy rysunku 19b, gdzie pik p_2 identyfikowany jest jako NO^+ . Jak Autorka wytłumaczy obecność pików NO^+ w widmach na rysunku 19b w kontekście braku tego pików w widmach na rysunkach 19a i 19c?
 12. Rysunek 21. Które poziomy stężeń analitów zostały wykorzystane do obliczenia czułości? Z rysunku 20 można wywnioskować, że były to sygnały uzyskane dla najniższych stężeń analitów oraz próby ślepej. Jeśli tak, to uzyskane wartości czułości zależą od doboru poziomu najniższego stężenia analitu dla którego wyznaczono krzywą kalibracyjną, gdyż odpowiedź detektora jest nieliniowa. Ma to istotne znaczenie, gdyż w dalszej części rozdziału wartości czułości wykorzystywane są do oszacowania stałych szybkości reakcji. Proszę Doktorantkę o ustosunkowanie się do tego problemu.
 13. Dla jakiego poziomu wilgotności próbki wykonano oszacowania stałej szybkości reakcji w tabeli 11?
 14. Nie jest dla mnie zrozumiałe dlaczego na stronie 105 Autorka uzyskane wartości stałej szybkości reakcji dla 2-pentanonu porównuje do stałych uzyskanych dla pirydyny i

eteru dietylowego zamiast do wartości stałych badanych analitów obliczonych czy zmierzonych przez innych autorów (na przykład Zhao i Zhang, *Atmospheric Environment* 38 (2004) 2177–2185).

15. W badaniach opisywanych w rozdziale 2.4.1. Doktorantka stosuje chlorek benzylu oraz chlorobenzen. Wybór tych związków wymaga uzasadnienia, zwłaszcza, że w przypadku chlorobenzenu nie było możliwe wyznaczenie stałych równowagi reakcji.
16. Strona 109. „Widma czasów dryftu zmierzone przy wprowadzaniu badanej substancji wraz z gazami, nośnym i dryftowym przedstawiono na rysunku 15b.” Rysunek 15b przedstawia schemat układu do wytwarzania mieszanin gazowych.
17. Rysunki 23 i 24. W przypadku chlorku benzylu pik jonu chlorkowego ulega nie tylko przesunięciu wraz ze wzrostem stężenia tego analitu, ale także poszerzeniu (zwłaszcza w niższych temperaturach). Efekt ten wydaje się nie występować w przypadku chlorobenzenu. Jaka jest zdaniem Doktorantki przyczyna tej różnicy? Czy powierzchnia obserwowanych pików jonu chlorkowego ulega także zmniejszeniu wraz ze wzrostem stężenia tego analitu? Ten efekt nie jest w pracy dyskutowany.
18. Strona 113. Dlaczego nie było możliwe wyznaczenie czasu dryftu adduktów jonowych w przypadku chlorobenzenu?
19. Na stronie 115 Autorka podaje, że badania tworzenia jonów uwodnionych prowadzono dla temperatur 318–378 K. Na rysunkach 30 i 31 dla części jonów wyniki dla temperatury 378 K nie są pokazane. Dlaczego? Zauważyłem także różnice w danych pomiarowych uzyskanych dla jonów chlorkowych dla temperatury 348K przedstawionych na rysunku 27 i 28. Z czego to wynika?
20. Na stronie 125 Autorka stwierdza, że zgodność krzywych teoretycznych z wynikami pomiarów była bardzo dobra. Jaką miarę jakości dopasowania modelu zastosowano?
21. Tabela 17. Czy wszystkie wartości ruchliwości zredukowanych zaprezentowane w tej tabeli obliczono używając danych uzyskanych dla temperatury 363K? Jeśli tak, to ile wynoszą te wartości dla danych uzyskanych dla innych temperatur? Czy wykonano takie obliczenia?
22. Jakie były kryteria wyboru substancji testowych w badaniach opisanych w rozdziale 2.5.?
23. Szkoda że Autorka nie zdecydowała się na porównanie uzyskanych wartości stałej wychwytu elektronów (Tabela 19) z wartościami literaturowymi.

Pragę tu podkreślić, że podane powyżej uwagi krytyczne, nie przekraczają normalnego zakresu uwag recenzenckich dotyczących rozpraw doktorskich, a większość z nich ma charakter dyskusyjny.

Podsumowanie

Przedstawiona do oceny rozprawa doktorska zawiera oryginalne i wartościowe wyniki poszerzające wiedzę na temat procesów jonizacji chemicznej w spektrometrach IMS. Autorka wykazała się umiejętnością prowadzenia eksperymentalnych badań naukowych, a także znajomością metod analizy teoretycznej.

Podsumowując powyższe, stwierdzam jednoznacznie, że przedstawiona mi do oceny rozprawa doktorska Pani magister Izabeli Pauliny Wolańskiej zatytułowana: „Wykorzystanie spektrometrów ruchliwości jonów do badania procesów jonizacji chemicznej” spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim określone w art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 roku *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* i wnoszę do Rady Dyscypliny Naukowej „Nauki Chemiczne” Wojskowej Akademii Technicznej im. Jarosława Dąbrowskiego o dopuszczenie Pani magister Izabeli Pauliny Wolańskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Paweł Mochalski