



Politechnika Łódzka
Instytut Chemii Ogólnej i Ekologicznej

prof. dr hab. inż. Małgorzata Iwona Szynkowska

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr Aleksandry Michalskiej zatytułowanej: „Zastosowanie spektrometrii Ramana w badaniu niebieskich lakierów samochodowych - ocena wartości dowodowej widm w podejściu klasycznym oraz z zastosowaniem metod chemometrycznych i statystycznych”, wykonanej w Instytucie Ekspertyz Sądowych im. Prof. dra Jana Sehna w Krakowie.

Promotorem pracy doktorskiej jest dr hab. Grzegorz Zadora, profesor w Instytucie Ekspertyz Sądowych w Krakowie. Recenzja została opracowana na zlecenie Dyrektora Instytutu Chemii Uniwersytetu Śląskiego z dnia 14.11.2017 r.

WSTĘP

W ostatnich latach nauki sądowe ulegają szybkiemu rozwojowi dzięki wykorzystaniu najnowszych rezultatów badań z zakresu m. in. chemii, biologii, nauk technicznych dla potrzeb wymiaru sprawiedliwości i organów ścigania. Współczesne metody fizykochemiczne oraz analityczne dają coraz większe możliwości w procesach ujawniania, badania i identyfikowania różnego rodzaju śladów kryminalistycznych. Najczęściej wykorzystywane metody analizy instrumentalnej to: techniki mikroskopowe, spektroskopii UV/VIS, IR, Ramana, rentgenowskiej, spektrometrii mas, a także chromatograficzne. Potrzeby dziedziny nauki, jaką jest kryminalistyka, wciąż jednak są niezaspokojone, stąd bardzo ważne jest ciągle poszukiwanie i opracowywanie nowych metod i procedur badawczych. Zastosowanie nowych rozwiązań, w tym wykorzystanie zaawansowanych metod statystycznych i chemometrycznych do opracowania wyników badań oraz oceny wartości dowodowej badanych śladów w konkretnej sprawie powodują wzrost możliwości wykonania badań identyfikacyjnych o wysokim stopniu zindywidualizowania i pewności końcowych wyników.

W świetle tych informacji tematyka badawcza podjęta w rozprawie doktorskiej mgr Aleksandry Michalskiej jest jak najbardziej uzasadniona i aktualna.

STRUKTURA ORAZ TREŚĆ ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Recenzowana praca mgr Aleksandry Michalskiej ma formę zbioru 6. artykułów naukowych opublikowanych w następujących czasopismach: *Journal of Forensic Sciences* (IF=1,160), *Vibrational Spectroscopy* (IF=2,003), *Journal of Raman Spectroscopy* (IF=2,671), *Analytical and Bioanalytical Chemistry* (IF=3,436), *Analytica Chimica Acta* (IF=4,513), *Forensic Science International* (IF=1,989). Sumaryczny Impact Factor publikacji wynosi 15,772 (210 pkt. MNiSW). Udział Doktorantki w opracowaniu planu badań, wykonaniu eksperymentów, opracowaniu i interpretacji wyników oraz przygotowaniu ww. artykułów był istotny, co potwierdzają oświadczenia współautorów publikacji.

Autorka w 10 rozdziałowej rozprawie zawarła: streszczenie w języku polskim i angielskim, objaśnienia skrótów, wstęp, część teoretyczną opisującą charakterystykę lakierów samochodowych, ich kryminalistyczne badania porównawcze oraz interpretację widm Ramana dla potrzeb wymiaru sprawiedliwości; cel pracy, część eksperymentalną zawierającą przedmiot badań, omówienie badań i wyników przedstawionych w ww. publikacjach, podsumowanie, wykaz 50 cytowanych odnośników literaturowych. 4 załączniki przedstawiają prace wchodzące w cykl rozprawy doktorskiej z oświadczeniami współautorów publikacji określające ich indywidualny wkład w powstanie wspólnych artykułów, życiorys oraz dorobek naukowy, dydaktyczny, organizacyjny i opiniodawczy Doktorantki.

Należy podkreślić, że wszystkie części opiniowanej dysertacji doktorskiej są przygotowane bardzo starannie, zarówno pod względem językowym, jak i graficznym.

Nadrzędnym celem pracy była ocena przydatności spektroskopii Ramana w analizie porównawczej próbek niebieskich lakierów samochodowych prowadzonej dla potrzeb wymiaru sprawiedliwości. Z kolei zakres pracy obejmował m.in.: identyfikację pigmentów determinujących kolor i odcień niebieskich lakierów samochodowych typu metalik i niemetalik, ocenę możliwości dyskryminacyjnych metody spektroskopii Ramana przy zastosowaniu wizualnego porównania widm, opracowanie schematu interpretacyjnego widm Ramana w oparciu o metody statystyczne i chemometryczne, ocenę przydatności metody wstępnego naświetlania (*photobleaching*) lakierów samochodowych oraz czynników mogących mieć wpływ na interpretację widm Ramana w ramach problemu porównawczego rozwiązywanego z zastosowaniem podejścia opartego na ilorazie wiarygodności (wpływ powiększenia obiektywu stosowanego do ogniskowania się lasera na powierzchni próbki, wpływ parametrów metody naświetlania - mocy lasera i czasu naświetlania próbki).

OCENA MERYTORYCZNEJ STRONY ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Oceniając merytorycznie wyniki i dyskusję rozprawy za najbardziej wartościowe w przedstawionej pracy uznaję:

- zastosowanie modeli opartych na ilorazie wiarygodności LR (Likelihood Ratio) do interpretacji widm Ramana uzyskanych dla próbek niebieskich lakierów samochodowych w celu rozwiązania tzw. problemu porównawczego,
- rozwiązanie problemu wielowymiarowości poprzez zastosowanie 3. metod redukcji liczby zmiennych (wykorzystanie pola powierzchni pod wybranymi pasmami w widmie, dyskretna transformacja falkowa, wybrane metody chemometryczne, w tym wzajemne podobieństwo próbek wyrażone miarami odległości), pozwalających na zachowanie istotnych informacji umożliwiających rozwiązanie problemu porównawczego próbek niebieskich lakierów samochodowych,
- wykazanie, że wykorzystanie modeli LR jest bardziej efektywne od wizualnego porównywania widm,
- stwierdzenie przydatności procesu wstępnego naświetlania w uzyskiwaniu informatywnych widm Ramana dla lakierów samochodowych, które w standardowych pomiarach ramanowskich charakteryzują się jedynie fluorescencją,
- wykazanie, że w ogniskowaniu promienia lasera na powierzchni próbki należy stosować obiektyw powiększający 50-krotnie.

UWAGI

Rozprawę mgr Aleksandry Michalskiej traktuję jako bardzo dobrą i jest to podsumowanie rzetelnej pracy badawczej. Jednakże, Doktorantka nie ustrzegła się przed drobnymi nieścisłościami. Wśród nich można wymienić:

- W wykazie skrótów nazwa lead chromate powinna być jako lead (II) chromate lub konsekwentnie jako pigment chrome yellow, tłumaczony jako żółcień chromowa;
- Rys. 2, str.15 - „zmiana długości lasera” powinno być „zmiana długości fali lasera”;
- Str. 26 - „stosowanej długości lasera” powinno być „stosowanej długości fali lasera”;
- Rys. 14, str. 61 - brak niebieskich punktów, do których jest odniesienie w podpisie, niedokładne przeniesienie rysunku 7 z publikacji przedstawionego na str. 92;
- Numeracja podrozdziałów w pracy jest zbyt skomplikowana, np. 8.2.2.3.3., należałoby to uprościć;
- Brak spisu tabel i rysunków z części teoretycznej i eksperymentalnej;
- Stosowanie słowa „metodologia” do określenia metod jest nieprawidłowe – powinno się używać słowa „metodyka” – metodologia to nauka o metodach.

Proszę, aby Doktorantka nie ustosunkowywała się bezpośrednio podczas publicznej obrony do ww. uwag, gdyż mają one tylko wskazać pewne nieprawidłowości i w żadnym wypadku nie obniżają wysokiej wartości recenzowanej pracy.

Praca doktorska nasuwa mi natomiast pewne pytania:

1. Jak można porównać podejście do analizy próbek lakierów samochodowych przedstawione w pracy doktorskiej z innymi ścieżkami postępowania wykorzystującymi różne metody oraz techniki pomiarowe?
2. Jaka jest ocena Doktorantki dotycząca zastosowania oraz przydatności, z podaniem zalet oraz wad, metod statystycznych i chemometrycznych w kryminalistyce?

PODSUMOWANIE RECENZJI

Oceniając pracę dokorską mgr Aleksandry Michalskiej stwierdzam, że dotyczy ona bardzo aktualnej tematyki, zarówno pod względem merytorycznym, poznawczym, jak i praktycznym oraz wnosi elementy nowości dla nauk sądowych i sądownictwa. Praca spełnia warunki określone w art. 13 ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym (Dz. U. z 2003 r., nr 65 poz. 595 wraz z późniejszymi zmianami).

Doktorantka posiada duży dorobek publikacyjny. Jest współautorką 8. artykułów z tzw. listy filadelfijskiej o łącznym IF = 18,4 (262 pkt. MNiSW); 2 publikacji spoza listy (*Problems of Forensic Sciences, Forensic Science and Technology*), rozdziału "Scanning Electron Microscopy in Forensic Analysis" w monografii "Analytical Techniques in Forensic Sciences" wyd. Wiley oraz 64. wystąpień konferencyjnych (ustnych i posterowych) o zasięgu krajowym i międzynarodowym. Na podkreślenie zasługuje udział mgr Aleksandry Michalskiej w 2 grantach naukowych oraz 6. tematach badawczych Instytutu Ekspertyz Sądowych w Krakowie, jak również Jej działalność dydaktyczna i organizacyjna. Niezwykle istotny jest również fakt uzyskania przez Doktorantkę w dniu 1 lipca 2017 tytułu biegłego Instytutu Ekspertyz Sądowych im. Prof. dra Jana Sehna w Krakowie z zakresu fizykochemicznych badań kryminalistycznych (ze szczególnym uwzględnieniem badań dotyczących włókien, śladów powystrzałowych oraz drobin szkła).

WNIOSEK KOŃCOWY

Wyrażam przekonanie, że recenzowana rozprawa doktorska mgr Aleksandry Michalskiej „Zastosowanie spektrometrii Ramana w badaniu niebieskich lakierów samochodowych - ocena wartości dowodowej widm w podejściu klasycznym oraz z zastosowaniem metod chemometrycznych i statystycznych” spełnia całkowicie wymogi stawiane pracom doktorskim i wnoszę o jej dopuszczenie do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Biorąc pod uwagę zakres, poziom oraz istotne znaczenie wykonanych badań, które moim zdaniem przekraczają zwyczajowe wymagania stawiane pracom doktorskim oraz bardzo dużą aktywność naukową Doktorantki stawiam wniosek o wyróżnienie opiniowanej pracy doktorskiej.

Praca zasługuje na wyróżnienie, gdyż:

1. Dotyczy wysoce aktualnych badań zarówno pod względem poznawczym, jak i praktycznym oraz wnosi elementy nowości w zakresie omawianej tematyki.
2. Zawiera obszerny i ciekawy materiał doświadczalny oparty na rzetelnych wynikach uzyskanych przy wykorzystaniu różnorodnej metodyki badawczej.
3. Wyniki w wielu miejscach mają charakter pionierski i poszerzają wiedzę w zakresie przydatności spektroskopii Ramana w analizie niebieskich lakierów samochodowych dla potrzeb wymiaru sprawiedliwości.
4. Doktorantka posiada bardzo dobry dorobek naukowy, na który składa się 8 prac w czasopiśmie z tzw. listy filadelfijskiej o łącznym IF = 18,4, 2. publikacje spoza listy, 64 wystąpienia na konferencjach międzynarodowych i krajowych.
5. Sumaryczny IF publikacji związany z rozprawą doktorską wynosi 15,772.



prof. dr hab. inż. Małgorzata Iwona Szynkowska

Łódź, dn. 22 stycznia 2018 r.