

Dr hab. Janina Kopyra, prof. UwS
Instytut Nauk Chemicznych
Wydział Nauk Ścisłych i Przyrodniczych
Uniwersytet w Siedlcach

POLITECHNIKA GDAŃSKA	
BIURO RADY DZIEDZINY NAUKOWEJ	
NAUKI ŚCISŁE	
Wpłynęło dnia	29.01.2026
L.dz.	4/2026
Podpis	UW

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr. Michała Kordiana Jurkowskiego pt. „*Wpływ układu wiązań chemicznych na rozpad sześcioczłonowych cząsteczek heterocyklicznych*”

Przedstawiona mi do zaopiniowania rozprawa doktorska mgr. Michała Jurkowskiego poświęcona jest problematyce rozpraszania elektronów na cząsteczkach heterocyklicznych, stanowiącej jedno z istotnych i aktualnych zagadnień współczesnej fizyki i chemii molekularnej. Badania oddziaływania elektronów z materią od wielu lat budzą szerokie zainteresowanie przedstawicieli różnych dyscyplin naukowych, w tym chemii, fizyki oraz biologii, ze względu na ich fundamentalne znaczenie poznawcze, jak również liczne implikacje aplikacyjne. Zrozumienie procesów fizykochemicznych inicjowanych przez elektrony o niskich energiach ma kluczowe znaczenie m.in. dla interpretacji mechanizmów uszkodzeń radiacyjnych materii biologicznej, rozwoju nowoczesnych metod diagnostycznych i terapeutycznych w medycynie, a także dla badań nad właściwościami materiałów oraz projektowania nowych technologii materiałowych. Procesy te odgrywają również istotną rolę w wielu obszarach technologii, takich jak fizyka plazmy, nanotechnologia czy chemia atmosfery.

Z powyższych względów istnieje wyraźna potrzeba zarówno jakościowego, jak i ilościowego opisu procesów inicjowanych przez elektrony, w szczególności w odniesieniu do złożonych układów molekularnych. W tę aktualną i ważną tematykę badawczą wpisuje się rozprawa doktorska mgr. Michała Jurkowskiego, która została zrealizowana na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej, pod kierunkiem dr. hab. Tomasza Wąsowicza, prof. PG.

Rozprawa dostarcza nowych i istotnych informacji dotyczących efektywności procesów rozpraszania elektronów na wybranych związkach heterocyklicznych, poszerzając istniejący stan wiedzy w tym zakresie. Uzyskane wyniki mają znaczenie zarówno poznawcze,

jak i aplikacyjne, a zastosowane podejście badawcze wpisuje się w aktualne trendy badań nad oddziaływaniem elektronów z układami molekularnymi.

Układ rozprawy jest zgodny z powszechnie stosowanym schematem prac doktorskich. Praca podzielona została na następujące rozdziały: „Wstęp” – 4 str., „Wiązania chemiczne” – 2 str., „Cząsteczki heterocykliczne” – 12 str., „Zderzenia elektronów z cząsteczkami” – 13 str., „Cele pracy” – 2 str., „Opis aparatury i doświadczenia” – 16 str., „Opis metod teoretycznych” – 3 str., „Wyniki i dyskusja” – 79 str.. Całość poprzedza Wykaz wybranych skrótów i symboli w pracy, a kończy „Podsumowanie”, „Bibliografia”, Tabele, Rysunki oraz Załączniki do rozprawy. Sumarycznie praca przedstawiona jest na 229 stronach, zawiera 118 rysunków, 17 tabel oraz 187 pozycji literaturowych. Należy podkreślić, że cytowane prace w przeważającej większości są pracami wydanymi w ostatnich kilkunastu latach, co wskazuje na dobre rozeznanie autora w aktualnej literaturze przedmiotu.

Rozprawę doktorską rozpoczyna „Wstęp”, który stanowi wprowadzenie do tematyki pracy i prezentuje aktualny stan wiedzy w zakresie spektroskopii elektronowej oraz jej zastosowań w badaniach związków heterocyklicznych. Autor omawia rozwój metod spektroskopowych oraz ich znaczenie dla nauk przyrodniczych. Jasno sformułowano hipotezy badawcze, logicznie powiązane z doбором badanych cząsteczek oraz zastosowanymi metodami eksperymentalnymi i obliczeniowymi. Interdyscyplinarne podejście, łączące spektrometrię mas, symulacje QCxMS i techniki uczenia maszynowego, stanowi solidną podstawę dla dalszych analiz.

Kolejny rozdział „Wiązania chemiczne”, zawiera zwięzłe omówienie podstawowych typów wiązań chemicznych oraz ich właściwości istotnych dla dalszych analiz. Autor w syntetyczny sposób omawia zależność energii i długości wiązań od ich krotności oraz formułuje hipotezę dotyczącą wpływu tego parametru na stabilność cząsteczek.

Rozdział „Cząsteczki heterocykliczne” zawiera omówienie wybranych sześcioczłonowych związków heterocyklicznych, obejmujące ich budowę chemiczną, znaczenie biologiczne oraz zakres zastosowań. Autor przedstawia aktualny stan badań nad tetrahydro-2H-piraniem, 3,4-dihydro-2H-piraniem i pirydyną, dokonując przeglądu wyników eksperymentalnych i teoretycznych dotyczących ich struktury, jonizacji oraz mechanizmów fragmentacji pod wpływem oddziaływania z promieniowaniem. Szczególną uwagę poświęcono analizie literaturowych danych spektroskopowych i masowych, a także identyfikacji dominujących kanałów fragmentacji wyżej wymienionych cząsteczek. Należy jednak zauważyć, że w rozdziale pojawiają się również wyniki badań własnych nad pirydyną;

dla zachowania klarowności pracy i logicznej struktury rozprawy, oryginalne dane eksperymentalne powinny zostać przedstawione w rozdziale „Wyniki i dyskusja”.

Rozdział „Zderzenia elektronów z cząsteczkami” przedstawia analizę zjawisk zachodzących podczas takich zderzeń, obejmując zarówno teoretyczne podstawy, jak i mechanizmy reakcji elektronów z neutralnymi cząsteczkami. Autor omawia procesy elastyczne i nieelastyczne, w tym wzbudzenie, dysocjację, jonizację oraz wychwyt elektronów, wraz z ich charakterystycznymi parametrami energetycznymi, takimi jak energia dysocjacji, próg jonizacji czy energia potrzebna do powstawania jonów fragmentacyjnych.

W dalszej części rozdziału wprowadzono pojęcie przekroju czynnego jako miary prawdopodobieństwa zajścia określonego procesu zderzeniowego, a także sposób jego wyznaczania na podstawie krzywych wydajności jonów. Rozdział zawiera również obszerną klasyfikację mechanizmów fragmentacji cząsteczek w wyniku zderzeń z elektronami, w tym rozpad hemolityczny (α), heterolityczny (i), dysocjację sigma (σ), procesy specyficzne dla związków pierścieniowych oraz reakcje otwarcia pierścienia indukowane transanularnym napięciem.

Całość stanowi dobre wprowadzenie teoretyczne do eksperymentalnych badań nad fragmentacją cząsteczek heterocyklicznych pod wpływem elektronów.

W kolejnym rozdziale pt. „Cele pracy” sprecyzowano główne cele rozprawy oraz pytania badawcze, których realizacja ma prowadzić do weryfikacji hipotez sformułowanych we Wstępie. Autor wskazuje, że analiza fragmentacji pirydyny, prowadzona w porównaniu do THP i DHP, umożliwia ocenę wpływu stopnia nasycenia oraz liczby wiązań podwójnych na przebieg procesów fragmentacyjnych.

Przedstawione pytania badawcze obejmują zagadnienia o charakterze eksperymentalnym, związane z lokalizacją jonizacji, mechanizmami rozpadu oraz analizą widm masowych badanych cząsteczek, jak i aspekty teoretyczne, w tym opracowanie i weryfikację algorytmów komputerowych do wyznaczania energii progowych, symulacje MD/QCxMS oraz zastosowanie metod uczenia maszynowego do przewidywania przekrojów czynnych. Tak sformułowany zakres badań wskazuje na interdyscyplinarny charakter rozprawy oraz na spójne powiązanie części eksperymentalnej z obliczeniową.

Cele pracy zostały sformułowane w jasny sposób, a zaproponowane metody badawcze są adekwatne do postawionych pytań. Rozdział ten w sposób logiczny wprowadza dalsze części rozprawy i jasno określa zakres oraz kierunek prowadzonych badań.

W rozdziale „Opis aparatury i doświadczenia” szczegółowo przedstawiono zastosowaną aparaturę oraz stosowane procedury eksperymentalne. Autor opisuje spektrometr

mas, źródło jonizacji, którego działanie oparte na termoemisji, kwadrupolowy analizator mas oraz detektor, wyjaśniając zasadę działania każdego z elementów i procesy prowadzące do powstania i selekcji jonów fragmentacyjnych. Szczegółowo omówiono stanowisko badawcze, przygotowanie próbek, oczyszczanie linii gazowej oraz warunki pomiarów, w tym rejestrację widm masowych i krzywych wydajności kationów w funkcji energii elektronów. Rozdział zawiera również opis procedury wyznaczania przekrojów czynnych i energii progowych fragmentów jonowych, w tym kalibracji za pomocą argonu, oraz metodę dopasowania danych eksperymentalnych z wykorzystaniem autorskiego oprogramowania ThreSpect©. Opis wskazuje na staranne przygotowanie badań, łączące zaawansowaną aparaturę z precyzyjnymi procedurami analitycznymi i automatyzacją przetwarzania danych, co stanowi solidną podstawę do dalszej interpretacji wyników i formułowania wniosków.

Rozdział „Opis metod teoretycznych” przedstawia podejście teoretyczne zastosowane do interpretacji i analizy danych eksperymentalnych uzyskanych widm masowych. Autor opisuje współpracę z grupą teoretyków i wyjaśnia zastosowane metody komputerowe, w tym program QCxMS do generacji teoretycznych widm masowych oparty na dynamice molekularnej Born-Oppenheimer, oraz metodę GFN-xTB do określania struktur, częstotliwości drgań i oddziaływań niekowalencyjnych w cząsteczkach badanych związków heterocyklicznych. Dodatkowo, w wybranych przypadkach przeprowadzono obliczenia ab initio metodą PBE0/def2-SVP z korekcją dyspersji DFT-D4, co umożliwia wiarygodne odwzorowanie intensywności fragmentów oraz ich potencjałów jonizacji.

W kolejnym etapie Autor omawia zastosowanie algorytmów uczenia maszynowego do przewidywania całkowitych przekrojów czynnych na jonizację. Przedstawiono architekturę sieci neuronowej, proces jej treningu i walidacji oraz dokładność przewidywań w odniesieniu do danych eksperymentalnych. Uzyskana zgodność wyników obliczeniowych z danymi doświadczalnymi, sięgająca w wielu przypadkach około 10–30%, potwierdza użyteczność zaproponowanego podejścia. Całość rozdziału ukazuje umiejętne połączenie metod eksperymentalnych z nowoczesnymi narzędziami obliczeniowymi, podkreślając ich znaczenie w interpretacji wyników oraz w szacowaniu wielkości trudnych do bezpośredniego wyznaczenia doświadczalnego.

Rozdział „Wyniki i dyskusja” jest najbardziej obszerną częścią pracy, zawierającą bogaty materiał doświadczalny. Obejmuje analizę procesów jonizacji i fragmentacji trzech heterocyklicznych związków organicznych: aromatycznej pirydyny oraz nienasyconego i nasyconego eteru pierścieniowego, odpowiednio 3,4-dihydro-2H-piranu i tetrahydro-2H-piranu. Przyjęta strategia badawcza, oparta na pomiarach widm masowych w szerokim

zakresie energii elektronów, wyznaczaniu energii progowych oraz analizie przekrojów czynnych, umożliwia szczegółową charakterystykę poszczególnych cząsteczek oraz ocenę wpływu ich struktury chemicznej na mechanizmy fragmentacji..

Analiza pirydyny stanowi punkt odniesienia do oceny poprawności procedury eksperymentalnej i wiarygodności użytego oprogramowania obliczeniowego. Zbieżność uzyskanych widm z danymi literaturowymi i bazą NIST potwierdza wysoką jakość pomiarów, a szczegółowa charakterystyka energii progowych i intensywności fragmentów pozwala zidentyfikować zarówno dominujące kanały rozpadu, jak i mniej intensywne procesy fragmentacji. Istotną obserwacją jest sekwencyjna dehydrogenacja pierścienia aromatycznego w mechanizmie typu „shake-off”, prowadząca do powstania jonów o m/z 60–64. Interpretacja oparta na delokalizacji ładunku w układzie π oraz relaksacji geometrycznej po jonizacji wprowadza nowy element naukowy i pogłębia opis mechanizmów fragmentacji heteroaromatycznych układów pierścieniowych.

Analiza wyników dla 3,4-dihydro-2H-piranu (DHP) została rozszerzona o obliczenia teoretyczne QCxMS, które umożliwiły identyfikację możliwych struktur kationów i rekonstrukcję konkurencyjnych kanałów fragmentacji. Dane eksperymentalne zestawiono z wynikami symulacji, zachowując krytyczne podejście do ich ograniczeń, szczególnie w odniesieniu do intensywności fragmentów oraz wpływu parametrów początkowych na dynamikę rozpadu. Szczegółowa analiza przekrojów czynnych i energii progowych pozwala ocenić energetyczną dostępność poszczególnych reakcji oraz wskazać rolę migracji atomów wodoru i przegrupowań strukturalnych w procesach poprzedzających fragmentację.

Analiza tetrahydro-2H-piranowi (THP) stanowi uzupełnienie badań DHP, umożliwiając bezpośrednie porównanie wpływu stopnia nasycenia pierścienia na mechanizmy jonizacji i fragmentacji. Zastosowano spójną metodykę badawczą, łącząc analizę widm masowych, przekrojów czynnych i energii progowych z wynikami symulacji teoretycznych. Omówiono rolę jonizacji z orbitalu niewiążącego na atomie tlenu, prowadzącej do osłabienia wiązań C–O i inicjacji otwierania pierścienia. Wyznaczenie podwójnych progów energetycznych dla wybranych fragmentów wskazuje na współistnienie różnych mechanizmów fragmentacji, w tym procesów pierwotnych i wtórnych.

Całość analizy ma charakter porównawczy i uwidacznia, w jaki sposób aromatyczność pirydyny, częściowe nienasycenie DHP oraz pełne nasycenie THP determinują stabilność jonów, dostępność procesów dehydrogenacji oraz złożoność ścieżek fragmentacji.

Według mojej oceny do najważniejszych osiągnięć doktoranta należy zaliczyć:

1. Systematyczne badania eksperymentalne procesów jonizacji i fragmentacji pirydyny, 3,4-dihydro-2H-piranu oraz tetrahydro-2H-piranu, obejmujące pomiary widm masowych oraz krzywych wydajności jonów w szerokim zakresie energii elektronów. Uzyskane dane cechują się wysoką jakością i kompletnością.
2. Wyznaczenie przekrojów czynnych na jonizację oraz energii pojawiania się jonów fragmentacyjnych, w tym wartości całkowitych przekrojów czynnych dla DHP i THP, co stanowi istotny wkład do badań zderzeń elektron–cząsteczka.
3. Opracowanie autorskiego programu komputerowego ThreSpect©, umożliwiającego precyzyjne wyznaczanie energii progowych jonów. Algorytm został przetestowany na różnych klasach atomów i cząsteczek, wykazując skuteczność porównywalną lub wyższą od metod konwencjonalnych.
4. Przekonującą interpretację mechanizmów fragmentacji w ujęciu elektronowym i strukturalnym, wykazującą wpływ lokalizacji jonizacji oraz stopnia nasycenia i aromatyczności pierścienia heterocyklicznego na przebieg procesów dysocjacyjnych.
5. Krytyczne porównanie wyników eksperymentalnych z obliczeniami teoretycznymi, obejmującymi symulacje dynamiki molekularnej QCxMS oraz metody uczenia maszynowego. Autor w sposób rzetelny wykazał zarówno użyteczność, jak i istotne ograniczenia tych podejść.

W tym miejscu chciałabym wskazać kilka uwag merytorycznych dotyczących sformułowań występujących w pracy oraz dodatkowych pytań do doktoranta, na które chciałabym uzyskać odpowiedzi:

(1) str. 27 „...Wykonano pomiary widm masowych oraz krzywych wydajności dla zidentyfikowanych kationorodników pojawiających się w widmie..” – proszę o doprecyzowanie, czy w widmie zidentyfikowano wyłącznie kationorodniki, czy również inne typy jonów.

(2) str. 42 „...Dodatkowo, aromatyczny charakter pirydyny może wpływać na stabilność powstających fragmentów, co odróżnia ją od mniej nasyconych pierścieni, takich jak THP i DHP..” – Autor stwierdza, że pierścienie THP i DHP są mniej nasycone niż pirydyna. Sformułowanie to wymaga weryfikacji, aby prawidłowo odzwierciedlało stopień nasycenia poszczególnych pierścieni.

(3) str. 85 „...Przeprowadzona analiza wykazała, że jonizacja DHP w wyniku zderzeń z elektronami prowadzi do powstania dwóch jonów macierzystych oraz 38 jonów fragmentacyjnych..” – klasycznie w spektrometrii mas i fizyce zderzeń elektronowych termin

jon macierzysty odnosi się do pierwotnie zjonizowanej cząsteczki (np. M^+). W związku z tym występuje jeden jon macierzysty dla danego procesu jonizacji.

(4) str. 97 „...Pozostałe fragmenty nie przekraczają 7 % i zachowują swoje proporcje podczas zwiększania energii wiązki jonizującej..” – Autor podaje, że pozostałe fragmenty nie przekraczają 7 %, jednak w tekście nie jest określone, czy wartość ta odnosi się do całkowitej intensywności widma, czy do intensywności jonu macierzystego. Dla pełnej przejrzystości wniosek ten należałoby doprecyzować.

(5) str. 102 „...Warto zauważyć, że jon o m/z 14 jest najlżejszym wykrytym fragmentem w tej grupie pików. Oznacza to, że nie występuje jego dalsza dehydrogenacja. Może to potwierdzać sugerowany, bardziej złożony proces formowanie się tego jonu..” – Autor interpretuje brak obserwowanej dalszej fragmentacji jonu o m/z 14 jako przesłankę wskazującą na bardziej złożony mechanizm jego powstawania. Należy jednak zaznaczyć, że sam brak fragmentów o niższych wartościach m/z nie stanowi jednoznacznego dowodu na istnienie złożonego mechanizmu. Może on wynikać również z energetyki procesu jonizacji, preferencji kanałów rozpadu lub ograniczeń aparatury pomiarowej. Z tego względu wnioski w tym zakresie należałoby sformułować w sposób bardziej warunkowy.

(6) str. 116 „...W szczególności w przypadku fragmentu o m/z 28 model teoretyczny przeszacowuje jego intensywność na poziomie 100%, podczas gdy w widmie eksperymentalnym intensywność ta wynosi jedynie 60 %. Fragment o m/z 28 (identyfikowany jako $C_2H_4^+$) nie powstaje więc z tak dużą wydajnością jak sugeruje teoria. Jest to o tyle zaskakujące, że model redukuje wtórną fragmentację – a tylko w ten sposób mogłaby powstać nadwyżka kationów o m/z 28..” – jak należy rozumieć przeszacowanie na poziomie 100%? Jaka jest proponowana interpretacja występujących rozbieżności?

(7) str. 116 „...Obecność dwóch progów wskazuje na różne procesy jonizacji: pierwszy to minimalna energia potrzebna do utworzenia podstawowego jonu, a drugi to energia, przy której pojawiają się kolejne procesy, takie jak jonizacja do stanów wzbudzonych, fragmentacja cząsteczki lub podwójna jonizacja..” – wyjaśnienie to nie jest w pełni klarowne, proszę o doprecyzowanie, które procesy odpowiadają za powstanie dwóch progów jonizacji i w jaki sposób są one obserwowane w widmach.

(8) str. 125 „...Wyznaczona dla tego jonu wartość przekroju czynnego należy do najniższych w całym widmie, co oznacza niskie prawdopodobieństwo jego powstawania i sugeruje, że fragment o masie m/z 64 jest produktem ubocznym wysokoenergetycznych kanałów fragmentacji, a niedominującym mechanizmem rozpadu THP..” – Autor interpretuje fragment o masie m/z 64 jako produkt uboczny wysokoenergetycznych kanałów fragmentacji THP.

Należy jednak podkreślić, że niski przekrój czynny jonu wskazuje jedynie na jego stosunkowo rzadkie powstawanie, a nie stanowi jednoznacznego dowodu na charakter dominujący czy uboczny mechanizmu fragmentacji. Jak należy tutaj rozumieć sformułowanie: „jest produktem ubocznym wysokoenergetycznych kanałów fragmentacji”?

(9) str. 125 Autor dyskutuje wtórną fragmentację kationu $C_5H_4^+$ (Reakcje 7.3.2-7.3.4), która zgodnie z przedstawioną propozycją ma charakter sekwencyjny. Proszę o zweryfikowanie produktów wymienionych powyżej reakcji sekwencyjnych.

(10) str. 133 Autor dyskutuje powstawanie jonu o m/z 43 wskazując na udział „mechanizmu acyliowego” – proszę o wyjaśnienie, co to jest za mechanizm?

(11) str. 134 „...W efekcie powstają dwa izobaryczne fragmenty: jon węglowodorowy o m/z 41 oraz jon zawierający atom tlenu o m/z 45..” – jony fragmentacyjne o różnych wartościach m/z nie są izobaryczne, termin „izobaryczny” oznacza identyczną masę jonu.

Z formalnego obowiązku recenzenckiego odnotowuję występujące w tekście uchybienia redakcyjne, drobne błędy oraz nieprecyzyjne sformułowania, które nie wpływają ani na poziom merytoryczny rozprawy, ani na jej pozytywną ocenę, m.in.: str. 12 „...wpływu **charakterystyki** wiązań..” → „...wpływu **rodzaju** wiązań..”; str. 15 „...ze wzrostem **wielokrotności** wiązań..” → „...ze wzrostem **krotności** wiązań..”; str. 17 „...Molekuły tego typu występują w większości znanych związków chemicznych..” → *niefortunne sformułowanie*; str. 18 „...nieliczne **monotarpeny**..” → „...nieliczne **monoterpeny**..”; str. 21 „...Zidentyfikowano **fragmenty zjonizowane** oraz wyznaczono wartości ich energii progowych, które **wylistowano** w Tabeli 2.2..” → „...Zidentyfikowano **jony fragmentacyjne** oraz wyznaczono wartości ich energii progowych, które **zebrano** w Tabeli 2.2..”; str. 27 „...**przechodzić** izomeryzację..” → „...**ulegać** izomeryzacji..”; str. 29 „...Elektrony odgrywają ważną rolę w przebiegu wielu reakcji związanych z reaktywnością cząsteczek..” → *niefortunne sformułowanie*; str. 38 „...**W tych związkach rozpad alfa może być inicjowany heteroatomem lub w jego wyniku może zostać zerwane wiązanie węgiel - heteroatom**..” → *niefortunne sformułowanie*; str. 39 „...**najbardziej wytrzymałych** wiązań..” → „...**najbardziej trwałych** wiązań..”; str. 40 „...powstania **kationoronika**..” → „...powstania **kationorodnika**..”; str. 46 „...jonów fragmentacyjnych ze względu na stosunek ich masy atomowej do wielkości ładunku (m/z)..” → „...jonów fragmentacyjnych **według stosunku masy tych jonów w jednostkach masy atomowej do ich ładunku (m/z)**..”; str. 81 „...eksperymentalne widmo **THP**..” → „...eksperymentalne widmo **DHP**..”; str. 91 „...nie został wykryty w **przebadanych** widmach..” → „...nie został wykryty w **zarejestrowanych** widmach..”; str. 91 „...jony o m/z 65-68 oraz 70

wykazują **znikomy sygnał**..” → „...jony o m/z 65-68 oraz 70 wykazują **znikomą intensywność**..”; str. 94 „...**Układ** cząsteczki DHP..” → „...**Struktura** cząsteczki DHP..”; str. 97 „...przy energii 70 eV (patrz **Rysunek 7.27**)..” → „...przy energii 70 eV (patrz **Rysunek 7.2.7**)..”; str. 97 „...**były by**..” → „...**byłyby**..”; str. 99 „...wartości **zmieszczone**..” → „...wartości **zamieszczone**..”; str. 99 „...Wynik teoretycznej symulacji wykonanej dla jonu o m/z 43 przypisał mu również jon izobaryczny..” → **niefortunne sformułowanie**; str. 99 „...Dane przedstawione w Tabeli 7.2.1 dotyczące jonu o m/z 43 **świadczą o 83,5 % wkładzie fragmentu m/z C₂H₃O⁺ w sygnał jonu o m/z 43**..” → „...Dane przedstawione w Tabeli 7.2.1 dotyczące jonu o m/z 43 **wskazują, że fragment C₂H₃O⁺ odpowiada za 83,5% całkowitej intensywności sygnału tego jonu**..”; str. 100 „...prawdopodobnie jony: formylowy (HCO⁺), **formaldehyd** (H₂CO⁺)..” → „...prawdopodobnie jony: formylowy (HCO⁺), **formaldehydowy** (H₂CO⁺)..”; str. 102 „...**świadczą o bardziej zaawansowanym procesie**..” → „...**świadczą o bardziej złożonym procesie**..”; str. 122 „...Z tego względu tlen **pełni funkcję głównego miejsca jonizacji**..” → „...Z tego względu tlen **stanowi główne miejsce jonizacji**..”; str. 127 „...Pierwszy mechanizm zakłada, że po jonizacji z orbitalu niewiążącego (n) na atomie tlenu O(1) jako pierwszy etap zachodzi rozerwanie wiązania C-C przy współdzielonego z atomem tlenu, czyli tzw. **α-cleavage**, np. rozerwanie wiązania C(2)-C(3) lub C(6)-C(5)..” → **niejasne sformułowanie**; str. 130 „...Powstały jon o m/z 56 **przypisano wzorowi sumarycznemu C₄H₈⁺ (72,9 %), co sugeruje jego alifatyczną strukturę karbokationową**..” → „...Powstały jon o m/z 56, **odpowiadający wzorowi sumarycznemu C₄H₈⁺ (72,9%), jest karbokationem o strukturze alifatycznej**...”; str. 130 „...prowadzących do izobarycznych jonów o identycznym stosunku m/z..” → „...prowadzących do powstania jonów izobarycznych..”; str. 133 „...Izobaryczny mniejszy udział jonu C₂H₃O⁺ powstaje alternatywnie w wyniku rozerwania wiązań z udziałem tlenu po otwarciu pierścienia i bez pełnej migracji wodoru..” → **niejasne sformułowanie**; str. 136 „...Proces ten zachodzi poprzez **zerwanie** wiązania typu α, **prowadzące do eliminacji fragmentu etenu**..” → „...Proces ten zachodzi poprzez **rozerwanie** wiązania typu α, **co prowadzi do powstania jonu winylowego**..”; str. 141 „...Przy czym wiązania C-N w pirydynie są szczególnie wrażliwe na utratę aromatyczności..” → **błędne sformułowanie** (aromatyczność stanowi właściwość całego układu pierścieniowego, a nie pojedynczego wiązania chemicznego); str. 144 „...spektrometria **masowa**..” → „...spektrometria **mas**..”; a także inne, niewymienione powyżej. Ponadto należy zauważyć, że w pracy występują liczne zdania bardzo długie i wielokrotnie złożone, zawierające wiele informacji, co ogranicza ich czytelność i utrudnia odbiór treści.

Reasumując, rozprawa doktorska mgr. Michała Jurkowskiego obejmuje badania nad procesami rozpraszania elektronów na heterocyklicznych związkach organicznych, prowadzone z wykorzystaniem komplementarnych metod badawczych. W pracy przedstawiono wyniki eksperymentalne, które zostały uzupełnione obliczeniami teoretycznymi wykonanymi we współpracy z zespołem teoretyków, a także analizami opartymi na metodach uczenia maszynowego. Takie podejście umożliwiło wieloaspektowe ujęcie badanego problemu oraz porównanie wyników uzyskanych różnymi technikami.

Zastosowane metody zostały odpowiednio dobrane do postawionych celów badawczych, a otrzymane rezultaty poddano analizie i interpretacji w kontekście dostępnych danych literaturowych. Praca świadczy o umiejętności prowadzenia badań o charakterze interdyscyplinarnym oraz efektywnej współpracy naukowej. Przedstawione wyniki potwierdzają realizację założonych celów badawczych i stanowią wartościowe uzupełnienie wiedzy dotyczącej oddziaływania elektronów z heterocyklicznymi cząsteczkami w fazie gazowej.

Mając na uwadze powyższe, stwierdzam, że przedstawiona mi do oceny **rozprawa doktorska mgr. Michała Kordiana Jurkowskiego pt. „Wpływ układu wiązań chemicznych na rozpad sześcioczłonowych cząsteczek heterocyklicznych”** spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim, określone w Ustawie z dnia 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 późn. zm.), i **wnoszę do Rady Dziedziny Naukowej Nauki Ścisłe Wydziału Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej o dopuszczenie jej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

(dr hab. Janina Kopyra, prof. UwS)



Siedlce, 26 stycznia 2026