



**AGH**

AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA  
IM. STANISŁAWA STASZICA W KRAKOWIE

Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska

Kraków, 10.12.2018 r.

dr hab. inż. Tomasz Bajda, prof. AGH  
Akademia Górniczo-Hutnicza  
im. Stanisława Staszica w Krakowie  
Wydział Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska  
bajda@agh.edu.pl

## **RECENZJA**

### **osiągnięcia naukowego pt.**

#### **„Struktura cząsteczek polarnych interkalowanych w minerałach ilastych”**

oraz ocena istotnej aktywności naukowej dr. inż. Marka Szczerby w związku z wszczęciem postępowania habilitacyjnego kandydata w dziedzinie nauk o Ziemi w dyscyplinie geologia

Niniejszą opinię przygotowano na zlecenie Dyrektora Instytutu Nauk Geologicznych z dnia 29 października 2018 roku, wydane na podstawie decyzji Centralnej Komisji do Spraw Stopni i Tytułów z dnia 4 października 2018 roku w sprawie powołania komisji habilitacyjnej w celu przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego dr. Marka Szczerby.

#### 1. Uwagi wstępne

Pan dr inż. Marek Szczerba zdobył wszechstronne wykształcenie z geologii (geochemia i mineralogia) i chemii (fizyka chemiczna). Multidyscyplinarność zaowocowała działalnością naukową na styku nauk o Ziemi i nauk chemicznych. Gdy do tego dołączy się wykształcenie z informatyki kreuje się postać wszechstronnego naukowca, który rozwiązuje problemy interdyscyplinarne. Jest to postać, którą porównałbym do sylwetki naszych nauczycieli i ich nauczycieli, którzy dla pogłębienia wiedzy i uzyskania wszechstronności naukowej podejmowali studia w kilku specjalizacjach. Sylwetka skrajnie rzadko dzisiaj spotykana. I taki też wątek interdyscyplinarności przewija się w ocenianym osiągnięciu naukowym i pozostałym dorobku

naukowym dr. M. Szczerby. Pracę doktorską obronił rozwiązując problem z dziedziny nauk o Ziemi z wykorzystaniem warsztatu z dziedziny nauk chemicznych.

Od czasu ukończenia studiów zawodowo związany jest z Instytutem Nauk Geologicznych Polskiej Akademii Nauk, gdzie realizował studia doktoranckie, był zatrudniony na stanowisku technicznym, następnie asystenta, adiunkta, obecnie pełni funkcję Kierownika Zakładu Badań Minerałów Ilastych. W czasie pracy naukowej podejmuje tematykę naukową realizowaną we współpracy, w tym międzynarodowej, odbywa staże zagraniczne. Zdobywa fundusze na projekty badawcze, którymi kieruje samodzielnie, lub bierze udział w ich realizacji. Wyniki badań prezentuje na licznych konferencjach międzynarodowych i w postaci publikacji naukowych. Jego osiągnięcia naukowe znajdują oddźwięk w środowisku naukowym, czego miarą są liczne cytowania jego prac. Te pokrótce zaprezentowane osiągnięcia przedstawiają w bardzo jasnym świetle sylwetkę dr. inż. Marka Szczerbę, kandydata do uzyskania stopnia doktora habilitowanego.

## 2. Ocena osiągnięcia naukowego

Podstawą przyznania stopnia doktora habilitowanego jest osiągnięcie naukowe, które w przypadku dr. M.Szczerby stanowi cykl czterech jednotematycznych publikacji pod zbiorczym tytułem „Struktura cząsteczek polarnych interkalowanych w minerałach ilastych”. We wszystkich publikacjach Habilitant jest pierwszym autorem z udziałem procentowym w powstaniu prac z zakresu 60-85%, ze średnią wynoszącą 75%. Jest to niepodważalny dowód, że dr inż. Marek Szczerba był liderem prowadzonych badań. Prace zostały opublikowane w czasopismach specjalizujących się w zagadnieniach związanych z minerałami ilastymi, dwie publikacje w *Clays and Clay Minerals*, dwie publikacje w *Applied Clay Science*. Są to absolutnie topowe czasopisma w środowisku mineralogów ilastych. W *Clays and Clay Minerals* publikowane są artykuły stricte naukowe a w *Applied Clay Science* o większym znaczeniu praktycznym.

W opisanych czasopismach opublikowane zostały 4 artykuły współautorstwa dr. M.Szczerby dotyczące struktury cząsteczek wody i glikolu etylenowego interkalowanych w minerałach ilastych. Tytuł osiągnięcia został tak trafnie dobrany, że nawet nie sposób go sparafrazować, czy bardziej rozwinąć. Z jednej strony zagadnienie ułożenia, rozmieszczenia i związania w minerałach ilastych dwóch wymienionych cząsteczek polarnych znane jest już od dawna, to jednak wciąż pozostają wątpliwości, które Habilitant starał się rozwiązać w toku prac analitycznych i modelowych. Już samo połączenie dwóch wymienionych typów działań, analizy i modelowania, jest nie często spotykane. Naukowcy dzielą się na eksperymentatorów i modelarzy. Ten podział tak głęboko zakorzenił się w naszej codzienności naukowej, że często słyszymy pytania na konferencjach „eksperymentujesz, czy modelujesz”, które pozwala pytającemu zakwalifikować pytanego do odpowiedniej kategorii. Dr Szczerba wymyka się temu swoistemu zasufladkowaniu. Zajmuje się bowiem eksperymentowaniem, analizą, badaniem i weryfikowaniem wyników poprzez stworzenie modelu. I na odwrót, stworzony model weryfikuje

przy pomocy badań analitycznych. Zdobyte wykształcenia z geologii, chemii i informatyki pozwala mu na swobodne poruszanie się na polu jego działalności naukowej. W opisywanym cyklu publikacji rozwiązuje nietrywialny problem specyficznego zachowania się cząsteczek wody i glikolu etylenowego w strukturze minerałów z grupy smektytu. Wyznaczenie parametrów determinujących określone zachowania cząsteczek polarnych pozwoliło nie tylko na rozwiązanie ambitnego problemu naukowego. Stwierdzone zależności pozwalają także na określenie lub doprecyzowanie wybranych właściwości minerałów ilastych, głównie z grupy smektytu. Docelowo mogą one pomóc w odkryciu lub przewidzeniu nowych możliwości praktycznego zastosowania tych minerałów.

W pracy [M. Szczerba, A. Kuligiewicz, A. Derkowski, V. Gionis, G.D. Chryssikos, A.G. Kalinichev, 2016: Structure and dynamics of water-smectite interfaces: Hydrogen bonding and the origin of the sharp O-Dw/O-Hw infrared band from molecular simulation. *Clays and Clay Minerals*, 64, 452-471] Habilitant skupia się na wytłumaczeniu jednego z aspektów struktury cząsteczki wody interkalowanej w smektytach. Z jednej strony wydaje się, że problem jest przedstawiony w nieco sztuczny sposób. Wymienione jest jedno z pasm na widmie IR, którego geneza nie została do końca poznana. A proces modelowania miał dać odpowiedź na pytanie o przyczynę występowania tego pasma. Z drugiej jednak strony tak właśnie rodzą się problemy badawcze, które staramy się rozwiązywać. To znaczy obserwujemy pewien efekt, zjawisko czy parametr uwidaczniający się podczas wykonywania takiej, czy innej analizy i staramy się odpowiedzieć na pytanie, co determinuje jego wystąpienie. Dotychczasowe badania prowadzone przez innych badaczy umożliwiły niemalże kompletny opis struktury cząsteczki wody interkalowanej w smektycie, za wyjątkiem tego jednego efektu na widmie IR. Dr Szczerba metodą modelowania tłumaczy go zlokalizowaniem cząsteczki wody bezpośrednio na powierzchni minerału. Ma to niebagatelne znaczenie, bowiem położenie tego pasma pozwala na określenie ładunku powierzchniowego pakietów 2:1 smektytów.

Celem pracy [M. Szczerba, Z. Kłapyta, A. Kalinichev, 2014: Ethylene glycol intercalation in smectites. *Molecular dynamics simulation studies. Applied Clay Science*, 91-92, 87-97] było zbadanie struktury cząsteczki glikolu etylenowego interkalowanego w smektycie. Każdy szanujący się mineralog ilasty wie, po co do przestrzeni międzypakietowej minerałów ilastych wprowadza się glikol etylenowy. Tym większym zaskoczeniem jest fakt, że ostatnie badania dotyczące struktury interkalowanego glikolu pochodzą sprzed ponad 50 lat. Habilitant wykazał metodami symulacji i modelowania naturę oddziaływania glikolu w smektycie i jego konkurencyjność względem cząsteczek wody. Efektem jest stwierdzenie potrzeby poprawy rozmieszczenia obydwu cząsteczek polarnych w dotychczasowych modelach używanych do modelowania dyfraktogramów.

Jak stwierdza Habilitant, przyjęty model oddziaływań międzycząsteczkowych – pól siłowych wpływa na wartość odległości  $d_{001}$  oraz struktury interkalatów smektytów. Zagadnieniu temu poświęcił pracę [M. Szczerba, A.G. Kalinichev, 2016: Intercalation of ethylene glycol in smectites: Several molecular simulation models verified by X-ray diffraction data. *Clays and*

Clay Minerals, 64, 488-502]. Wyzaczył optymalny zestaw parametrów pól siłowych do modelowań molekularnych oddziaływań cząsteczek organicznych z minerałami ilastymi. Wnioski z pracy mają niebagatelne znaczenie, ponieważ struktury i przemiany kompleksów mineralnoorganicznych są jednym z najczęściej badanych współcześnie zagadnień w mineralogii ilastej.

Zamknięciem cyklu publikacji składających się na osiągnięcie naukowe dr. inż. Marka Szczerby jest praca [M. Szczerba, K. Ufer, 2018: New model of ethylene glycol intercalate in smectites for XRD modeling. Applied Clay Science, 153, 113-123], w której przedstawił sposób wyznaczenia oraz przeniesienie nowej struktury interkalowanego glikolu do programu BGMN do modelowania dyfraktogramów, między innymi minerałów ilastych. Zagadnienie jest o tyle istotne, że prawidłowy wynik opracowania struktury dwóch badanych cząsteczek polarnych wpływa na uzyskany model struktury minerału, a tym samym na wyznaczone właściwości smektytu oraz minerałów mieszanopaketowych.

Wyniki opublikowane w cyklu czterech artykułów można podsumować, jako połączenie teoretycznych badań modelowych i symulacyjnych z badaniami eksperymentalnymi. Całość skupia się na zagadnieniach badania struktury cząsteczek polarnych wody i glikolu etylenowego interkalowanych w minerałach ilastych. W mojej ocenie jest to dojrzałe studium, znamionujące naukowca wysokiej klasy.

*Podsumowując uważam, że przedstawiony przez dr. inż. Marka Szczerbę jako osiągnięcie naukowe cykl publikacji pod wspólnym tytułem Struktura cząsteczek polarnych interkalowanych w minerałach ilastych”, spełnia wymagania zawarte w art. 16 ust. 1 i 2 ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki z dnia 14 marca 2003 roku (Dz. U. Nr 65, poz. 595, z późn. zm.).*

### 3. Ocena pozostałej aktywności naukowej

Pozostałe osiągnięcia naukowe i badawcze dr inż. Marka Szczerby składają się na dość ciekawy obraz efektów Jego pracy, jako naukowca. Występują tu artykuły opublikowane w czasopismach o bardzo wysokich współczynnikach wpływu, mierzonych wartością Impact Factor. Każdy, podejmowany przez Habilitanta problem badawczy kończył się publikacją. Jest to nie często spotykany model pracy. Zwykle, pracując nad konkretnym problemem naukowcy i badacze publikują wiele prac w kilku periodykach. Rozdrobnienie wynika z chęci, czy potrzeby zaprezentowania pewnych grup wyników, wydzielonych w obrębie rozwiązywanego zagadnienia. Daje to efekt wielu publikacji, wielu punktów (MNiSW), czy wysoką sumaryczną wartość IF, ale często żadna z tych publikacji lub tylko niektóre zawierają przełomowe odkrycia. Wydaje się, że dr M.Szczerba obrał inną drogę. Całość wyników powstałych w wyniku opracowanego tematu publikuje w jednym, czasem w dwóch artykułach. W efekcie powstaje może mniej publikacji, ale za to skoncentrowanych na całościowym podejściu do tematu, przez co potencjalnie zawierających przełomowe odkrycia. Miarą wartości jest postrzeganie publikacji przez środowisko, co uzewnętrznia się w ilości cytowań. Dotychczas (wg stanu na 6 grudnia

2018 r.) 17 prac (wliczając prace, które powstały po złożeniu wniosku habilitacyjnego) dr Szczerby było cytowanych 150 razy (bez autocytowań) a indeks Hirscha wynosi 8. Sumaryczny Impact Factor publikacji przedstawionych w dokumentacji złożonej przez Kandydata wynosi 32,788. Wymienione powyżej wskaźniki bibliometryczne uważam za bardzo wysokie, odpowiednie dla kandydata na doktora habilitowanego. Spośród 14 publikacji z listy A MNiSW przedstawionych w Autoreferacie Habilitant jest pierwszym autorem w 8 publikacjach.

Dr M.Szczerba brał udział w blisko 40 konferencjach, niemal wyłącznie zagranicznych, na których osobiście wygłosił 20 referatów. Po doktoracie uczestniczył w 17 konferencjach międzynarodowych, na których osobiście przedstawił 11 referatów. Jest także autorem publikacji z listy B MNiSW, w jakże ważnym dla mineralogów czasopiśmie MINERALOGIA.

Doktor Szczerba kierował/kieruje jednym projektem badawczym finansowanym z NCN, dwoma wewnętrznymi grantami ING PAN oraz jednym międzynarodowym finansowanym przez American Association of Petroleum Geologists. Ponadto był wykonawcą w 8 innych projektach badawczych. Po doktoracie regularnie jest nagradzany Nagrodami Dyrektora ING PAN za publikacje naukowe. Ma swoim dorobku takie nagrody, jak prestiżowa Nagroda Prezesa Rady Ministrów za najlepszą pracę doktorską, czy stypendium naukowe dla wybitnych młodych naukowców przyznawane przez MNiSW. To bardzo cenne laury, które przypadają w udziale wybitnym naukowcom. Nie sposób nie wspomnieć o osiągnięciach sprzed doktoratu. Za najcenniejsze uznaję stypendium „Program START” fundowane przez FNP.

Praca w Polskiej Akademii Nauk wyklucza zasadniczo działalność dydaktyczną. Dlatego za istotną należy uznać działalność dr Szczerby na polu popularyzacji nauki. Kimże jest bowiem nawet wysokiej klasy naukowiec, jeżeli nie potrafi w sposób przystępny zaprezentować wyników swojej pracy niespecjalistom czy laikom. Habilitant brał udział w pracach organizacyjnych Nocy Muzeów i Małopolskiej Nocy Naukowców, a także popularyzował efekty swojej działalności naukowej w materiałach udostępnionych na kanale YouTube.

To, co dla naukowca najcenniejsze, to zdobywanie doświadczeń na drodze współpracy z koleżankami i kolegami z innych ośrodków naukowych, zwłaszcza zagranicznych. Na tym polu dorobek dr Szczerby prezentuje się wyjątkowo dobrze. Ponad połowa jego publikacji powstała z udziałem kolegów z zagranicy a tylko dwie publikacje powstały z udziałem kolegów z jednostki, w której dr Szczerba jest zatrudniony. W okresie po doktoracie brał udział w parodniowych wizytach w jednostkach zagranicznych i jednym pięciomiesięcznym pobycie w University of Nantes we Francji.

Wydawać by się mogło, że przy działalności stricte naukowej, którą prowadzi Habilitant nie ma już miejsca na prace na zlecenie podmiotów przemysłowych i zlecanych z innych jednostek. Biorąc jednak pod uwagę, że dr Marek Szczerba pełni funkcję Kierownika Zakładu Badań Mineralów Ilastych nie jest to wniosek oczywisty. Działalność Zakładu nie sprowadza się bowiem tylko do realizacji prac naukowych, ale także wykonywania analiz i badań na zlecenie. Dr Szczerba kierował dotychczas sześcioma takimi umowami.

Zlecenie naukowcowi wykonania recenzji manuskryptów publikacji naukowych, czy wniosków grantowych, to przede wszystkim wyróżnienie i dostrzeżenie jego dorobku naukowego i pozycji eksperta w jego dziedzinie. Dr Szczerba osiągnął ten poziom, czego dowodem jest 17 wykonanych recenzji dla czasopism międzynarodowych o wysokim Impact Factor oraz 3 recenzje projektów badawczych, zlecone przez NCN i National Science Fundation (USA).

#### 4. Wnioski końcowe.

Podsumowując recenzję, z pełnym przekonaniem stwierdzam, że dr inż. Marek Szczerba przedstawił oryginalny dorobek naukowy kwalifikujący Go, do uzyskania stopnia doktora habilitowanego. Jego dorobek został już doceniony w kraju i na świecie. Habilitant jest samodzielnym naukowcem, autorem nowatorskich badań i rozwiązań. Przedstawiony jako osiągnięcie badawcze cykl jednotematycznych publikacji spełnia wymogi merytoryczne i formalne stawiane kandydatom do stopnia doktora habilitowanego. Wnoszą one znaczący wkład do dziedziny nauk o Ziemi, dyscypliny geologia, uprawianej przez Habilitanta.

Stwierdzam, że zostały spełnione wszystkie warunki Ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. nr 65, poz. 595 wraz z późniejszymi zmianami). W związku z tym przedkładam komisji habilitacyjnej niniejszą, pozytywną recenzję w celu przeprowadzenia dalszego postępowania habilitacyjnego.

