



Prof. dr hab. inż. Robert Zaleśny

Wydział Chemiczny

Politechnika Wrocławska

Wyb. Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Polska

E-mail:

27 sierpnia 2026 r.

RECENZJA

**dorobku naukowego oraz osiągnięcia habilitacyjnego dr. Szymona Śmigi
przedłożonych w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego**

Informacje ogólne oraz omówienie całkowitego dorobku naukowego

Kandydat do stopnia doktora habilitowanego uzyskał tytuł magistra fizyki w 2009 r. na podstawie pracy zatytułowanej: “Analiza efektywności różnych wariantów metody OEP zastosowanej do układów atomowych i molekularnych”, której promotorem był prof. dr hab. Ireneusz Grabowski. Stopień doktora nauk fizycznych, pod opieką tego samego promotora, Kandydat uzyskał w 2014 r. na podstawie rozprawy doktorskiej pt.: “Efektywny opis korelacji elektronowej w funkcjonalach wymiennie-korelacyjnych, w teorii funkcjonałów gęstości”. Ścieżka akademicka Kandydata związana jest z Uniwersytetem Mikołaja Kopernika w Toruniu, gdzie jest zatrudniony od 2014 r. (od 2018 r. zatrudnienie na stanowisku adiunkta). W okresie grudzień 2015 - listopad 2016 Kandydat zatrudniony był na stanowisku badawczym w Istituto Nanoscienze Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR) w Lecce we Włoszech. Warto nadmienić, że jeszcze przed uzyskaniem stopnia doktora Kandydat odbył dwumiesięczny staż naukowy w Quantum Theory Project w Gainesville w Stanach Zjednoczonych, prowadząc badania w zespole kierowanym przez wybitnego chemika kwantowego prof. Rodneya Bartletta.

Dorobek naukowy Kandydata obejmuje 49 prac, w tym 5 ukazało się przed uzyskaniem stopnia doktora (stan na dzień złożenia wniosku o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego), natomiast cykl 8 publikacji został wskazany przez Kandydata jako osiągnięcie naukowe. W znakomitej większości prace z dorobku Kandydata ukazały się w renomowanych periodykach poświęconych fizyce atomowej i molekularnej, tj. *The Journal of Chemical Physics*, *Physical Review B*, *The Journal of Physical Chemistry Letters* oraz *Journal of Chemical Theory and Computation*. Warto odnotować, że aż 5 publikacji z cyklu habilitacyjnego



ukazało się drukiem w tym ostatnim periodyku, który od 2009 r. przypisany jest do pierwszego kwartyłu (Q1) w obszarze fizyki atomowej, molekularnej i chemicznej. Biorąc pod uwagę charakter badań prowadzonych przez Kandydata, o czym w dalszej części recenzji, cytowalność prac jest bardzo dobra. Istotnym elementem aktywności naukowych Kandydata jest również prezentacja wyników badań w formie wykładów podczas krajowych oraz międzynarodowych konferencji i wizyt w zagranicznych ośrodkach – łącznie ponad 20. Potwierdzeniem uznania dla aktywności naukowych prowadzonych przez Kandydata jest zaproszenie do wygłoszenia 5 referatów na międzynarodowych konferencjach. W autoreferacie Kandydat wykazał współpracę naukowe z uznanymi na arenie międzynarodowej uczonymi a lista publikacji pokazuje, że są to rzeczywiste wspólne aktywności naukowe.

Znaczna część dorobku naukowego Kandydata powstała w wyniku realizacji projektów finansowanych w drodze konkursów. Kandydat był kierownikiem 5 projektów finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki: PRELUDIUM (ed. 2012), ETIUDA (ed. 2013), SONATA (ed. 2016), OPUS (ed. 2020), SONATA BIS (ed. 2021). Aktywność Kandydata w obszarze pozyskiwania środków na badania własne jest imponująca i winna stanowić wzór dla innych uczonych. Warto również odnotować uczestnictwo w kilku projektach w charakterze wykonawcy. Mam nadzieję, że w kolejnych etapach kariery naukowej Kandydat będzie mógł się poszczycić grantami uzyskanymi z Europejskiej Rady ds. Badań Naukowych.

Kandydat odbył łącznie 4 dłuższe (tu: powyżej 2 miesięcy) staże naukowe w zagranicznych ośrodkach, w tym 3 po uzyskaniu stopnia doktora:

- Italian National Research Council (CNR), Lecce, Włochy, współpracownik: prof. Fabio Della Sala, grudzień 2015 - listopad 2016,
- Italian Institute of Technology, Arnesano, Włochy; współpracownicy: prof. Fabio Della Sala, dr Eduardo Fabiano, dr Lucian A. Constantin, styczeń 2015 - listopad 2015,
- National Nanotechnology Laboratory, Lecce, Włochy; współpracownik: prof. Fabio Della Sala, wrzesień 2014 - listopad 2014.

Nazwiska partnerów naukowych, z ośrodków w których staże odbywał Kandydat, pojawiają się w ponad 20 artykułach naukowych (również w cyklu prac wskazanym jako osiągnięcie naukowe). Wyniki zawarte w tych publikacjach są dowodem istotnej aktywności naukowej w więcej niż jednej uczelni/instytucji naukowej i w mojej ocenie Kandydat spełnia wymóg zawarty w art. 219 ust. 1. p. 3 u.p.s.w. Z prawdziwą przyjemnością chciałbym odnotować, że w przypadku Kandydata



staże naukowe to nie konieczność mająca na celu wypełnienie wymagań sformułowanych przez ustawodawcę, lecz bardzo owocna formuła pracy naukowej.

W mojej ocenie całość dorobku naukowego (liczba prac, cytowalność) nie pozostawia wątpliwości, że Kandydat z powodzeniem buduje swoją pozycję w obszarze fizyki atomowej i molekularnej i jest rozpoznawalny na arenie międzynarodowej. Aktywności naukowe Kandydata zostały również docenione w macierzystej jednostce (5 nagród JM Rektora UMK) jak również przez Kapitułę Stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla Wybitnych Młodych Naukowców (ed. 2021).

Ocena osiągnięcia naukowego

Jako osiągnięcie naukowe Kandydat przedłożył cykl publikacji [H1-H8], które ukazały się drukiem w latach 2016-2025. W publikacji [H1] Kandydat zaproponował schemat dla funkcjonałów podwójnie hybrydowych (DH), bazujący na technice zoptymalizowanego potencjału efektywnego (OEP), w którym orbitale optymalizowane są z uwzględnieniem poprawki korelacyjnej. W pracy [H1] energia wymienna z metody Hartree-Focka jak również poprawka korelacyjna z metody MP2 zostały uwzględnione jako jawnie zależne od gęstości. Implementacja ww. schematu wykorzystwała funkcjonal B-LYP i jednoparametrowe przybliżenie dla funkcjonału DH. W publikacji porównane zostały podejścia OEP-1DH i 1DH dla układów atomowych (He, Be, Ne, Ar) i molekularnych (CO, H₂O). Paleta obliczanych wielkości obejmowała m.in. energie całkowite, energie orbitali granicznych i powinowactwa elektronowe. Najważniejszym wnioskiem płynącym z pracy [H1] jest to, że optymalizacja orbitali w ramach OEP nie przynosi poprawy wyników obliczeń całkowitej energii stanu podstawowego ani potencjałów jonizacji. Niemniej jednak zwiększa ona dokładność powinowactwa elektronowego. W porównaniu ze standardowym schematem OEP opartym na rachunku zaburzeń Görlinga-Levy'ego, schemat zaproponowany przez Kandydata jest bardziej stabilny i oferuje dokładniejszy opis efektów korelacyjnych. Choć sukces zaproponowanego schematu był ograniczony w zakresie badanych wielkości/układów to publikacja [H1] stanowi uzupełnienie luki w literaturze przedmiotu.

Publikacja [H2] opiera się na podobnej koncepcji co powyżej omówiona praca i prezentuje rozszerzenie metody RSH+MP2 w wariacie samouzgodnionym, które wykorzystuje technikę OEP. Zaproponowana przez Kandydata metoda RS-OEP2 uwzględnia wkłady wymienny i korelacyjny drugiego rzędu w lokalnym potencjale OEP. Podobnie jak w przypadku publikacji [H1] dokładność



zaproponowanej metody sprawdzono wykonując obliczenia dla tych samych układów atomowych (He, Be, Ne, Ar) i molekularnych (CO, H₂O) z wykorzystaniem funkcjonału PBE. Kandydat wykonał analizy energii całkowitych, energii orbitali granicznych, powinowactwa elektronowego oraz potencjałów wymiennie-korelacyjnych i korelacyjnych. W analizach została również uwzględniona zależność od parametru podziału na część krótko- i dalekozasięgową (μ). Wnioski z pracy [H2] w dużym stopniu pokrywają się z tymi zaprezentowanymi w publikacji [H1], tj. metoda RS-OEP2 nie przynosi istotnej poprawy wyników dla badanych wielkości względem RSH+MP2. Wyjątkiem jest energia LUMO, która w metodzie RS-OEP2 z dobrym przybliżeniem odpowiada energii wzbudzenia (z zachowaniem liczby elektronów w układzie).

Nowe podejścia zaprezentowane w publikacjach [H1] i [H2] mogą sprawdzać się lepiej w przypadku układów otwartopowłokowych, o czym Autorzy wspominają w podsumowaniu obydwu publikacji. Badania nad układami otwartopowłokowymi i z polaryzacją spinową stanowiły przedmiot publikacji [H3], w której Kandydat dokonał szczegółowej analizy funkcjonałów typu “ab initio DFT”. W pracy zostały wyznaczone wertykalne potencjały jonizacji, energie atomizacji oraz energie reakcji dla układów zarówno otwarto- jak i zamkniętopowłokowych. Paleta zastosowanych metod obejmowała: MP2, OO-MP2, OEP2-sc, B2PLYP, PBE0-DH oraz CCSD(T). Jak pokazały wyniki obliczeń przeprowadzonych przez Kandydata, metoda OEP2-sc nie przewyższa dokładnością metod MP2 czy OO-MP2 dla obliczanych wielkości. Przydatnym rezultatem dla szerokiego grona uczonych wykorzystujących teorię funkcjonału gęstości jest wykazanie, że wysoka moc predykcyjna funkcjonałów podwójnie hybrydowych wynika ze znoszenia się błędów.

Przedmiot pracy [H4] stanowi analiza efektów korelacyjnych w funkcjonałach hybrydowych, na potrzeby której zostały wygenerowane potencjały korelacyjne z hybrydowych obliczeń OEP przeprowadzonych w wariantcie pełnego samouzgodnienia. W oparciu o analizy przedstawione w pracy [H4] Kandydat sformułował istotny wniosek, że wpływ na dokładność przewidywań funkcjonałów hybrydowych i podwójnie hybrydowych ma nie tylko wyrażenie na energię, ale również jakość potencjału efektywnego i gęstości.

W publikacji [H5] Kandydat proponował podejście, które łączy formalizm połączenia adiabaticznego (AC) i rachunek zaburzeń Görlinga-Levy’ego. Dzięki takiemu sformułowaniu możliwa jest nie tylko konstrukcja nowych funkcjonałów dobrze umotywowanych na gruncie teorii, ale również pozwala ono na powiązanie struktury zaproponowanych przez innych autorów funkcjonałów podwójnie hybrydowych z rachunkiem zaburzeń. Przykładem mogą być funkcjonały PBE-QIDH i PBE0-2. W pracy [H5] przebadane zostały również funkcjonały PBE-mIDH i



LRC- ω PBE-DH. Bardzo wartościowym elementem pracy [H5] jest również analiza funkcjonałów z poprawkami wyższych rzędów GL3/MP3 oraz GL4/MP4. Uwzględnienie wyrazów wyższego rzędu prowadzi do dokładniejszych energii atomizacji oraz energii wiązań. Choć Kandydat w konkluzjach pracy wskazuje na wysoki koszt obliczeniowy tych podejść, zaprezentowane wyniki są bardzo istotne z poznawczego punktu widzenia.

Kolejna publikacja w dorobku Kandydata poświęcona jest analizie zmodyfikowanej metody ISI (mISI), którą zaproponował w 2019 r. L. A. Constantin, drugi współautor pracy [H6]. Metoda mISI poprawia przewidywania w obszarze dużych gradientów gęstości oraz w ogonie gęstości względem oryginalnego wariantu. Motywacją do podjęcia badań był brak danych uzyskanych metodą mISI dla układów molekularnych. Kandydat uzupełnił tę lukę obliczeniami szeregu wielkości (energije korelacji, energie atomizacji, wertykalne potencjały jonizacji, energie oddziaływań międzycząsteczkowych) dla szerokiej palety układów. Zmodyfikowana metoda stanowi ważny krok w kierunku w pełni samouzgodnionych obliczeń w ramach teorii funkcjonału gęstości.

Publikacja [H7] poświęcona jest zastosowaniu modeli połączenia adiabatycznego (ACM) w wariancie pełnego samouzgodnienia. Praktyczna realizacja obejmowała wykorzystanie funkcjonałów ISI i SPL. Symulacje wykonano dla układów atomowych i molekularnych a paleta wyznaczanych wielkości obejmowała energie całkowite, momenty dipolowe, różnice energii orbitali granicznych, potencjały korelacyjne i gęstości. Praca [H7] to istotny postęp w zastosowaniu funkcjonałów z rodziny ACM, bowiem wyniki uzyskane przez Kandydata dowodzą, że pełne samouzgodnione obliczenia ACM są możliwe do zrealizowania i można za ich pomocą uzyskać wiarygodne wartości energii oraz gęstości. W przypadkach, gdy korelacja elektronowa nie jest istotna, realizacja obliczeń w wariancie samouzgodnionym nie przynosi istotnej poprawy wyników. Ta obserwacja stanowi uzupełnienie wniosków wypływających z publikacji [H1-H2], w których Kandydat analizował funkcjonały podwójnie hybrydowe (również w wariancie RSH).

Publikacja oznaczona jako [H8] poświęcona jest analizie mocy predykcyjnej funkcjonałów opartych na wyrażeniach korelacyjnych drugiego rzędu. Kandydat przeanalizował funkcjonały typu “ab initio” (GL2, SC), ACM (ISI, SPL) oraz funkcjonały podwójnie hybrydowe (B2PLYP, PBE-QIDH, XY-G3, BL1P). Kluczowym aspektem publikacji [H8] jest wyodrębnienie różnych źródeł błędów, pochodzących od funkcjonału i gęstości. W ramach tego ostatniego typu błędów Kandydat dodatkowo wydzielił wkład pochodzący od orbitali i wartości własnych. Analizy oraz wnioski zaprezentowane w pracy mogą być przydatne w projektowaniu nowych typów funkcjonałów.



Kandydat omawia cykl prac [H1-H8] wyróżniając następujące wątki:

- graniczna dokładność funkcjonałów DFT typu ab initio,
- fizycznie motywowane, formalne uzasadnienie konstrukcji funkcjonałów DH,
- przybliżenia dla granicy silnego oddziaływania,
- reprezentacja efektów korelacyjnych w funkcjonałach hybrydowych, DH i ACM,
- wpływ samouzgodnienia na zachowanie funkcjonałów,
- bilans błędów w funkcjonałach drugiego rzędu.

Kandydat przedstawił osiągnięcie w sposób dojrzały, wskazując na wkład własny na szerokim tle rozwoju teorii funkcjonału gęstości. Przygotowany przez Kandydata opis jest znakomicie zrównoważony pod względem omawianych zagadnień i wskazuje na głębokie rozumienie obecnych kierunków rozwoju w tym obszarze. Kandydat w cyklu publikacji skupił się na funkcjonałach z najwyższych szczebli “drabiny Jakuba” a podjęte przez niego zagadnienia są nie tylko bardzo ambitne, ale wpisują się w nurt najbardziej aktualnych badań w obszarze teorii funkcjonału gęstości. Podsumowując ocenę publikacji [H1-H8] z pełnym przekonaniem stwierdzam, że zawarte w nich rezultaty i interpretacje stanowią istotny wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne.

W przypadku większości prac z cyklu [H1-H8] Kandydat uczestniczył w sformułowaniu hipotez badawczych i koncepcji publikacji, odpowiadał za wyprowadzenie równań (kiedy było to konieczne) i rozwój oprogramowania. W mojej ocenie dowodzi to wiodącej roli Kandydata w cyklu prac wskazanych jako osiągnięcie naukowe. Chronologia cyklu publikacyjnego pokazuje, że warsztat badawczy, rozwinięty na wczesnych etapach kariery dzięki pracy pod kierunkiem prof. Ireneusza Grabowskiego, został przez Kandydata poszerzony i jest twórczo wykorzystywany w projektach własnych. Kandydat jest bez wątpienia należycie przygotowany, zarówno pod względem warsztatu jak i dojrzałości pomysłów, do prowadzenia własnego zespołu naukowego.

Na koniec tego zwięzłego podsumowania zawartości cyklu wskazanego jako osiągnięcie naukowe należy podkreślić, że Kandydat może poszczycić się również innymi istotnymi osiągnięciami naukowymi, a podejmowane przez niego wątki obejmują m.in.:

- rozwój i analizy funkcjonałów energii kinetycznej,
- analizę przybliżeń opartych na wielociałowych funkcjach Greena (zastosowania obejmowały obliczeniach pasm walencyjnych łańcuchów węglowodorów nienasyconych),
- analizę przybliżeń w ramach teorii sprzężonych klasterów,
- rozwój technik symulacji sprzężenia plazmonowego w ramach teorii funkcjonału gęstości.



Informacje o dorobku dydaktycznym i organizacyjnym

Paleta zajęć dydaktycznych prowadzonych przez Kandydata, zarówno w języku polskim jak i angielskim, jest dosyć szeroka i obejmuje wykład oraz ćwiczenia (10 kursów). W trakcie kariery akademickiej Kandydat był opiekunem 3 prac licencjackich/inżynierskich (w tym 1 w toku) i 4 prac magisterskich. Ponadto pełni rolę promotora pomocniczego trójki doktorantów. Kandydat aktywnie uczestniczy w działalności mającej na celu popularyzację nauki:

- “Digital Nanoscience - CNN” wydarzenie dla uczniów szkół ponadpodstawowych,
- “Dni Otwarte Instytutu Fizyki UMK”,
- Pokazy “Małe eksperymenty – wielkie odkrycia!” dla przedszkolaków i dzieci z klas 1-3,
- Letnia Szkoła “Toruń Astrophysics, Spectroscopy, and Quantum Chemistry School - TASQ”.

Ponadto równie aktywnie zaangażowany jest w działalność organizacyjną na wielu płaszczyznach życia akademickiego, która obejmuje m.in.: administrację serwerami obliczeniowymi, udział w komitetach organizacyjnych warsztatów, pełnienie odpowiedzialnych funkcji w macierzystej instytucji (Z-ca Przewodniczącego Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne, Instytut Fizyki, UMK (2024-2028); Dyrektor ds. Naukowych Instytutu Fizyki, UMK (2024-2028)).

Wnioski końcowe

Dr Szymon Śmiga przedstawił we wniosku o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego cykl 8 powiązanych tematycznie artykułów naukowych, które ukazały się w renomowanych czasopismach z obszaru fizyki atomowej i molekularnej. Wyniki uzyskane przez Kandydata wniosły istotny wkład w rozwój dyscypliny nauki fizyczne, ze szczególnym uwzględnieniem obszaru rozwoju teorii funkcjonału gęstości. Bardzo wysoko oceniam przebieg kariery naukowej, osiągnięcie zawarte w cyklu 8 publikacji oraz pozostałe dokonania naukowe dr. Szymona Śmigi. Uważam, że Kandydat ubiegający się o nadanie stopnia doktora habilitowanego spełnia wszystkie warunki określone w art. 219 ust. 1 pkt. 1-3 Ustawy z dnia 20.07.2018 r. – Ustawy o szkolnictwie wyższym i nauce, oraz wnoszę o dopuszczenie dr. Szymona Śmigi do dalszych etapów postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.



Podpisano
przez ZALEŚNY
ROBERT w
dniu
27.08.2026
14:02