

Uniwersytet Śląski w Katowicach

INSTYTUT CHEMII

40-006 Katowice, ul. Szkolna 9, tel. 32 359 15 45

e-mail: ich.wnst@us.edu.pl

Prof. dr hab. Monika Musiał

Katowice, 25 lipca 2026

**Recenzja osiągnięć naukowych dr. Szymona Śmigi
zatytułowanych: „Rozwój zaawansowanych funkcjonalów
wymienno-korelacyjnych w ramach teorii funkcjonatu gęstości
Kohna-Shama” oraz całokształtu dorobku naukowego,** w związku z
postępowaniem habilitacyjnym prowadzonym przez Radę Dyscypliny Nauki
Fizyczne Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu

Dr Szymon Śmiga ukończył studia wyższe w Uniwersytecie Mikołaja Kopernika (UMK) w Toruniu w roku 2009, uzyskując tytuł magistra fizyki. Praca magisterska, zatytułowana: „*Analiza efektywności różnych wariantów metody OEP zastosowanej do układów atomowych i molekularnych*”, została wykonana pod kierunkiem prof. dr. hab. Ireneusza Grabowskiego. W roku 2014 Habilitant obronił pracę doktorską „*Efektywny opis korelacji elektronowej w funkcjonatach wymienno-korelacyjnych, w teorii funkcjonalów gęstości*”, zrealizowaną również pod kierunkiem prof. dr. hab. Ireneusza Grabowskiego w Instytucie Fizyki UMK. Od roku 2014 jest zatrudniony w Instytucie Fizyki UMK, najpierw na stanowisku asystenta, a od roku 2018 na stanowisku adiunkta. W latach 2015-2016 był zatrudniony na stanowisku badawczym w Istituto Nanoscienze Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR), Lecce, Włochy.

Dorobek naukowy dr. Szymona Śmigi zamyka się w czterdziestu dziewięciu publikacjach naukowych, w tym czterdzieści cztery po doktoracie, o łącznym współczynniku wpływu $IF=170,536$ (zgodnie z danymi z *Web of Science (WoS)*). Indeks Hirscha Habilitanta wynosi 17 (wg bazy *WoS*), a Jego prace

były cytowane 383 razy (wg tej samej bazy, bez autocytowań). Habilitant prezentował wyniki swoich badań na kilkudziesięciu konferencjach naukowych, krajowych i zagranicznych, m.in. wygłosił pięć wykładów na zaproszenie. Wygłosił również dwa wykłady na zaproszenie w zagranicznych ośrodkach naukowych. Jeden w Friedrich Alexander University Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Niemcy, a drugi w KTH Royal Institute of Technology, Sztokholm, Szwecja.

Habilitant pełnił funkcję kierownika w czterech grantach finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki (NCN), tj.: OPUS (2020/37/B/ST4/02713), SONATA (2016/21/D/ST4/0093), ETIUDA (2013/08/T/ST4/00032) oraz PRELUDIUM (2012/05/N/ST4/02079). Obecnie pełni rolę kierownika w grantie SONATA BIS (2021/42/E/ST4/00096), również finansowanym przez NCN.

Był także beneficjentem grantu MINIATURA, finansowanego przez Narodowe Centrum Nauki (2022-2023) oraz grantu Narodowego Centrum Badań Jądrowych dla młodych naukowców i uczestników studiów doktoranckich. Pełnił również rolę wykonawcy, m.in. w projektach finansowanych przez Unię Europejską w ramach programu *Euratom Research and Training Programme* oraz w kilku grantach finansowanych ze źródeł zewnętrznych, m.in. grantów OPUS, NAWA. Obecnie jest wykonawcą w projektach: *FENG-PLAI4SCIENCE* „Polska Sieć Infrastruktury Badawczej dla nauk ścisłych wspomaganych sztuczną inteligencją” i *PIAST IA Factory*.

Habilitant nawiązał obiecującą współpracę naukową z uczelniami zagranicznymi, w ramach której odbył, m.in. roczny staż podoktorski (grudzień 2015 - listopad 2016) w CNR, Lecce, Włochy oraz kilkumiesięczny (styczeń 2015 - listopad 2015) pobyt w Italian Institute of Technology, Arnesano, Włochy; w Quantum Theory Project, Gainesville, USA i w National Nanotechnology Laboratory (wrzesień 2014 - listopad 2014), Lecce, Włochy. Odnotowuję także kilka kilkudniowych wizyt naukowych, m.in. w Uniwersytecie w Erlangen, Niemcy oraz w KTH Royal Institute of Technology, Sztokholm. Habilitant uczestniczy również w innych projektach w ramach współpracy naukowej, m.in. z prof. Martinem Kaupem z Technische Universität Berlin, Institut für Chemie w Berlinie; z prof. So Hiratą z University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, USA oraz z prof. Paolą Gori-Giorgi z Microsoft Research AI for Science, czego efektem są wspólne publikacje naukowe.

Kompetencje Kandydata zostały docenione także przez redaktorów czasopism naukowych poprzez zaproszenie do recenzowania nadsyłanych manuskryptów. Habilitant wykonał recenzje, m.in. dla takich prestiżowych cza-

sopism jak: *Nature Communications*, *Journal of Chemical Theory and Computation* oraz *Chemical Physics Letters*. Współpracował także m.in. z Narodowym Centrum Nauki wykonując recenzje projektów badawczych.

Dr Szymon Śmiga jest laureatem kilku nagród i wyróżnień, m.in. za osiągnięcia naukowe - zespołowa nagroda II stopnia Rektora UMK (2024), zespołowa nagroda III stopnia Rektora UMK (2022) oraz indywidualna nagroda III stopnia Rektora UMK (2018). Ponadto był też stypendystą Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla wybitnych młodych naukowców (od 2021 roku przez 3 lata).

Ocena osiągnięć naukowych stanowiących podstawę wniosku habilitacyjnego

Wyniki badań, będące przedmiotem recenzji, zamieszczono w ośmiu publikacjach: dwóch dwuautorowych, jednej trójautorowej oraz czterech więcej niż trójautorowych. W sześciu z nich Kandydat jest pierwszym autorem, a w ośmiu (czyli wszystkich z cyklu) autorem korespondencyjnym. Prace ukazały się w czasopismach indeksowanych w *Journal Citation Reports* (jednej w *Journal of Physical Chemistry A*, dwie w *Journal of Chemical Physics* oraz pięć w *Journal of Chemical Theory and Computation*), których współczynnik wpływu mieści się w przedziale od 2,7 do 6,7 i opublikowane zostały w latach 2016-2025.

Cykl prac, będący podstawą wniosku habilitacyjnego, można podzielić na sześć wątków tematycznych:

- graniczna dokładność funkcjonałów typu *ab initio* w metodzie DFT (density functional theory) (H3),
- fizycznie motywowane, formalne uzasadnienie konstrukcji funkcjonałów DH, tj. podwójnie hybrydowych (H5),
- przybliżenia dla granicy silnego oddziaływania (H6, H7),
- reprezentacja efektów korelacyjnych w funkcjonałach hybrydowych oraz podwójnie hybrydowych (H4, H5),
- wpływ samouzgodnienia na zachowanie funkcjonałów (H1-H4, H7),
- bilans błędów w funkcjonałach drugiego rzędu (H8).

Główny temat badawczy, będący podstawą niniejszego wniosku, realizowany przez Habilitanta to rozwój, implementacja i krytyczna analiza zaawansowanych funkcjonałów wymiennie-korelacyjnych (XC) w ramach teorii funkcjonału gęstości Kohna-Shama (KS).

Rezultaty uzyskane przez Habilitanta w pracy [H3] wskazują, iż porównywanie wyłącznie energii względnych może maskować rzeczywiste zachowanie i jakość funkcjonału, co ma zasadnicze znaczenie dla zrozumienia ich parametryzacji. Dlatego też kwantyfikacja i kontrolowanie równowagi błędów są istotne dla racjonalnego opracowywania funkcjonałów XC nowej generacji.

W pracy [H5] wykazano, że znane funkcjonały DH można osadzić w szerszej hierarchii przybliżeń opartych na formalizmie połączenia adiabatycznego (AC) a także to, iż ich parametry można powiązać z rzędami rachunku zaburzeń. Dowiedziono więc, że parametry występujące w funkcjonałach DH nie są jedynie empirycznymi współczynnikami.

Habilitant zajął się również istotnym aspektem, a mianowicie opracowaniem i oceną funkcjonałów ACM (adiabatic connections models) ze szczególnym naciskiem na opis granicy silnego oddziaływania oraz możliwościami przeprowadzenia w pełni samouzgodnionych obliczeń metodą KS z wykorzystaniem tych funkcjonałów [H6, H7]. Dzięki tym badaniom, wiemy, iż opracowywanie modeli ACM wymaga kontroli trzech elementów, tj.: wkładu GL2 (czyli rachunku zaburzeń drugiego rzędu Görlinga-Levy'ego) związanego z granicą słabego oddziaływania, składników granicy silnego oddziaływania a także odpowiadających im pochodnych funkcjonalnych.

Rezultaty uzyskane przez Habilitanta w pracach [H4, H5] są związane z kolejnym istotnym zagadnieniem w ramach zaawansowanych funkcjonałów XC, tj. badaniem reprezentacji efektów korelacyjnych. Wykazano, m.in. że dokładność funkcjonałów hybrydowych i podwójnie hybrydowych zależy nie tylko od wyrażenia na energię, ale związana jest z jakością leżącego u ich podstaw potencjału efektywnego oraz gęstości. Dzięki tym badaniom wiemy, iż analiza potencjałów korelacyjnych dostarcza praktycznej drogi konstrukcji nowych i fizycznie motywowanych aproksymacji, które - co ważne - są dokładne nie tylko dla energii, ale także dla gęstości, energii orbitalnych oraz właściwości molekularnych czułych na poprawność i jakość potencjału XC.

Wyniki badań zaprezentowane w pracach [H1, H2] dotyczą samouzgodnionej realizacji funkcjonałów DH. W pierwszej z nich opracowano samouzgodnioną realizację OEP (optimized effective potential) konwencjonalnego funkcjonału DH, a w pracy drugiej - DH typu "range-separated". Wniosek wypływający z tych badań jest taki, iż samouzgodnienie pełni dwie ro-

le. Pierwsza, bardziej praktyczna, związana jest z tym, że może poprawiać wybrane właściwości, a druga, diagnostyczna, ujawnia czy pochodna funkcjonalna danego przybliżenia jest fizycznie sensowna. W związku z tym samouzgodnienie jest narzędziem niezbędnym do zrozumienia fizycznej treści zaawansowanych funkcjonałów gęstości.

W pracy [H8] przeanalizowano bilans błędów w funkcjonałach opartych na wyrażeniach korelacyjnych drugiego rzędu, tj. zbadano wewnętrzne ograniczenia aproksymacji funkcjonałów gęstości opartych na GL2, a także referencyjnych orbitali i energii orbitalnych użytych do ich obliczenia. Dzięki temu wyprowadzono hierarchię wzorów dekompozycji błędu energii. Dowiedziono również, że funkcjonały zaprojektowane dla konkretnej referencji mogą tracić na dokładności, jeśli zostaną obliczone na innej, nawet dokładniejszej drodze. Wyniki badań zawarte w pracy [H8] dostarczyły nowych ram metodologicznych i pokazały, że kompensacja błędów nie jest drugorzędnym szczegółem, ale centralnym mechanizmem rządzącym wydajnością przybliżeń V szereblu funkcjonałów, czyli tych typu XC zależnych od orbitali i energii orbitalnych.

W podsumowaniu chcę podkreślić, że wysoko oceniam poziom naukowy badań przedstawionych w omówionych powyżej publikacjach. Habilitant zajmuje się konstrukcją fizycznie motywowanych a zarazem obliczeniowo efektywnych przybliżeń do XC funkcjonałów gęstości, ale wykazał się też przy tym znakomitą orientacją, jeżeli chodzi o stosowanie metod obliczeniowych chemii i fizyki kwantowej. Jestem pełna uznania dla osiągnięć naukowych Habilitanta. Reasumując, publikacje składające się na osiągnięcie naukowe, wskazane we wniosku habilitacyjnym, reprezentują cykl powiązanych ze sobą tematycznie artykułów naukowych, w których Habilitant pełnił znaczącą rolę, i stanowią istotny wkład w rozwój dyscypliny *nauki fizyczne* w dziedzinie *nauk ścisłych i przyrodniczych*.

Ocena działalności badawczej Habilitanta nie włączonej do cyklu habilitacyjnego

Tematyka badawcza, realizowana poza badaniami wchodzącymi w zakres głównego osiągnięcia naukowego, była m.in. zogniskowana na rozwoju, analizie i zastosowaniach funkcjonałów energii kinetycznej. W ramach tych badań odnotowuję kilka wartościowych prac (C13-C18) opublikowanych m.in. w *Journal of Chemical Physics* i *Physical Review B*. Dzięki tym badaniom dowiedziono, iż funkcjonał energii kinetycznej powinien być rozwijany i oceniany nie tylko na poziomie energii, ale także na poziomie lokalnych KED (kinetic

energy density) i potencjałów kinetycznych podobnie jak w przypadku funkcjonałów XC z głównego nurtu badawczego Habilitanta, które analizowano nie tylko pod względem energii, ale także potencjałów, gęstości i widm energii orbitalnych.

Badania prowadzone poza głównym nurtem tematycznym Habilitanta dotyczyły również rozwoju prostych i efektywnych metod przewidywania potencjałów jonizacji (IP) (prace: C19-C21) w ramach EPT (electron propagator theory) i powiązanych metod funkcji Greena dla układów wielociałowych. Dzięki tym badaniom stworzono praktyczne narzędzia użyteczne, m.in. w spektroskopii molekularnej, elektronice organicznej i materiałach fotowoltaicznych.

Pozostałe prace Kandydata koncentrują się na badaniach w ramach teorii struktury elektronowej. Wspólnym mianownikiem tych prac jest poprawa dokładności, wydajności i zakresu zastosowań metod chemii kwantowej.

Jak widać z powyższego krótkiego przeglądu, pozahabilitacyjna aktywność naukowa dr. Szymona Śmigi zasługuje na uznanie. Kilkanaście prac, nie włączonych do osiągnięcia naukowego, będącego podstawą wniosku habilitacyjnego, reprezentuje równie wysoki poziom naukowy. Wiele z nich wykonano we współpracy z zagranicznymi ośrodkami naukowymi i opublikowano w renomowanych czasopismach. Podsumowując: ten aspekt aktywności naukowej Habilitanta oceniam bardzo pozytywnie i traktuję go jako istotne wzmocnienie wniosku.

Ocena działalności dydaktycznej, organizacyjnej i popularyzatorskiej

W ramach aktywności dydaktycznej dr Szymon Śmiga prowadził ćwiczenia z systemów operacyjnych, wstępu do systemu UNIX, metod numerycznych, metod matematycznych fizyki I, matematyki elementarnej, fizyki w symulacji komputerowej i modelowaniu komputerowym, języków programowania a także pracownię komputerową III - Unix i Internet oraz kurs wyrównawczy z fizyki, HTML5 i QI. Od roku akademickiego 2022/23 prowadzi wykład *Introduction to density functional theory* w Instytucie Fizyki UMK.

Odnosić należy również aktywność w zakresie kształcenia młodej kadry. Habilitant jest promotorem pomocniczym w dwóch pracach doktorskich. Kandydat był także promotorem w czterech pracach magisterskich i trzech licencjackich. Dr Szymon Śmiga sprawował opiekę nad studentami w ramach programu letniego *Toruń Students Summer Programs*.

Wspomnieć należy również, iż dr Szymon Śmiga prowadzi aktywną działalność organizacyjną. M.in. od 2024 roku sprawuje funkcję dyrektora naukowego w Instytucie Fizyki UMK i od tegoż roku jest zastępcą przewodniczącego Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne i członkiem Rektorskiej Komisji ds. Nagród dla Nauczycieli Akademickich. Od roku 2018 jest administratorem serwerów HPC i oprogramowania naukowego w Instytucie Fizyki UMK. Odnosić należy również udział w Komitecie organizacyjnym warsztatów *Quantum Chemistry Workshop in Toruń* (główny organizator) oraz szkoły letniej *Torun Astrophysics, Spectroscopy, and Quantum Chemistry - TASQ*. Był także współorganizatorem *QSCP 2020 - 25th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry, Physics and Biology*.

Dr Szymon Śmiga zajmuje się również działalnością popularyzatorską, wygłosił kilka wykładów popularno-naukowych oraz przygotował szereg pokazów dla dzieci i młodzieży.

Podsumowanie

Wniosek dr. Szymona Śmigi spełnia formalne wymagania Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. W szczególności Kandydat: i) posiada stopień doktora ii) nie ubiegał się wcześniej o nadanie stopnia doktora habilitowanego iii) przedstawił cykl powiązanych tematycznie artykułów opublikowanych w czasopiśmie naukowych iiii) wykazał się aktywnością naukową realizowaną poza macierzystą jednostką.

Biorąc to pod uwagę oraz wysoki poziom naukowy opublikowanych prac stwierdzam, że dr Szymon Śmiga spełnia wymagania formalne i merytoryczne wynikające z *Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* z dnia 20 lipca 2018 roku odnoszące się do prac habilitacyjnych, i w związku z tym wnoszę o dopuszczenie dr. Szymona Śmigi do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.