



UNIwersytet
Warszawski

Wydział Chemii



Warszawa, 28 września 2026

dr hab. Michał Lesiuk, prof. ucz.

Wydział Chemii

Uniwersytet Warszawski

ul. Pasteura 1

02-093 Warszawa

Recenzja rozprawy habilitacyjnej dr. Szymona Śmigi

Dnia 6 lipca 2026 roku została mi przedstawiona do recenzji rozprawa habilitacyjna dr. Szymona Śmigi zatytułowana *"Rozwój zaawansowanych funkcjonalów wymianokorelacyjnych w ramach teorii funkcjonału gęstości Kohna-Shama"*. Odpowiedni wniosek o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauk fizycznych został złożony dnia 6 maja 2026 roku do Rady Doskonałości Naukowej.

Przebieg dotychczasowej kariery dr. Szymona Śmigi obejmuje kształcenie i pracę naukową w Polsce oraz liczne staże w zagranicznych ośrodkach badawczych. Tytuł magistra fizyki uzyskał on w 2009 roku na Uniwersytecie Mikołaja Kopernika w Toruniu (UMK), broniąc pracy dotyczącej analizy wariantów metody OEP pod kierunkiem prof. dr. hab. Ireneusza Grabowskiego. Pod opieką tego samego promotora w 2014 roku uzyskał stopień doktora nauk fizycznych na UMK na podstawie rozprawy poświęconej efektywnemu opisowi korelacji elektronowej w teorii funkcjonalów gęstości. Swoją główną ścieżkę zawodową dr Śmiga związał z Instytutem Fizyki UMK, gdzie od października 2014 roku do stycznia 2018 roku pracował jako asystent, a od lutego 2018 roku jest zatrudniony na stanowisku adiunkta. Kluczowym elementem jego rozwoju naukowego były wyjazdy zagraniczne, z których pierwszy, dwumiesięczny staż, odbył jeszcze przed obroną doktoratu w Quantum Theory Project w Gainesville w USA, współpra-

cując z grupą prof. Rodneya Bartletta. Bezpośrednio po uzyskaniu stopnia doktora, w okresie od września do listopada 2014 roku, odbył trzymiesięczny staż podoktorski w National Nanotechnology Laboratory w Lecce we Włoszech, w grupie badawczej prof. Fabio Della Sali. Współpracę z włoskimi instytucjami kontynuował podczas jedenastomiesięcznego stażu podoktorskiego (od stycznia do listopada 2015 roku) w Italian Institute of Technology w Arnesano, a następnie pracując przez rok, od grudnia 2015 do listopada 2016 roku, na stanowisku badawczym we Włoskiej Narodowej Radzie Badań (CNR) w Lecce. Rozwój jego kariery dopełniają także krótkoterminowe wizyty badawcze realizowane w kolejnych latach m.in. w Italian Institute of Technology w Arnesano (2018, 2019), w KTH Royal Institute of Technology w Sztokholmie (2024) oraz na University of Erlangen w Niemczech (2024).

Dorobek naukowy dr. Śmigi jest niezwykle bogaty na danym etapie kariery naukowej. O ile nie pomyliłem się w rachunkach obejmuje on 49 opublikowanych prac, z czego 44 ukazały się po uzyskaniu stopnia doktora (wliczając w to 8 stanowiących podstawę osiągnięcia habilitacyjnego). Zgodnie ze stanem na 23 kwietnia 2026 roku, wskaźniki bibliometryczne kandydata są bardzo dobre: jego prace były cytowane 690 razy według bazy Scopus (w tym 369 razy bez autocytowań) i 699 razy według bazy Web of Science (383 bez autocytowań). Indeks Hirscha wynosi 17 w obydwu bazach. Artykuły były publikowane w renomowanych czasopismach naukowych, co przekłada się na sumaryczny wskaźnik Impact Factor (IF) równy 170,536, z czego ponad 41 punktów IF przypada na prace wchodzące w skład cyklu habilitacyjnego. Dorobek ten przekłada się również na wysoką punktację ministerialną.

Dr Śmiga wykazuje się dużą aktywnością w pozyskiwaniu finansowania na badania, co potwierdza kierowanie wieloma projektami przyznanymi w ramach konkursów Narodowego Centrum Nauki (NCN). Obecnie (od marca 2022 roku) realizuje jako kierownik prestiżowy, 60-miesięczny projekt SONATA BIS pt. *"Chemia kwantowa w warunkach ograniczenia przestrzennego"*, prowadzony we współpracy z partnerami z Włoch i Indii. Wcześniej kierował m.in. 36-miesięcznym grantem OPUS *"Opracowanie nowej klasy funkcjonalów hybrydowych w ramach teorii funkcjonatu gęstości"*, grantem SONATA poświęconym funkcjonalom energii kinetycznej oraz rozliczonymi już projektami z konkursów ETIUDA i PRELUDIUM (ten ostatni jeszcze przed uzyskaniem stopnia doktora). Posiada również bogate doświadczenie jako wykonawca w dużych projektach, np. w ramach konsorcjum budującego *"Polską Sieć Infrastruktury Badawczej dla nauk ścisłych wspomaganych sztuczną inteligencją"* (FENG-PLAI4SCIENCE, 2025-2029) oraz

w europejskim projekcie PIAST AI Factory (2026-2029). Był także zaangażowany w międzynarodowe programy wymiany bilateralnej, w tym polsko-włoski CANALETTO i polsko-francuski POLONIUM, oraz w kilka innych grantów NCN i MNiSW, kierowanych m.in. przez prof. Ireneusza Grabowskiego. W uznaniu swoich osiągnięć, dr Śmiga w 2021 roku otrzymał prestiżowe, 3-letnie stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla wybitnych młodych naukowców. Do jego wczesnych wyróżnień należy Nagroda im. prof. Jacka Rychlewskiego za najlepszą pracę magisterską (2010), a jego praca na UMK była wielokrotnie doceniana Nagrodami Rektora za osiągnięcia naukowe i organizacyjne (m.in. w latach 2018, 2021, 2022, 2024).

Chociaż formalnie ten aspekt działalności habilitanta nie jest brany pod uwagę przy ocenie wniosku habilitacyjnego, warto wspomnieć również o działalności dydaktycznej. Działalność dydaktyczna dr. Śmigi w Instytucie Fizyki UMK obejmuje prowadzenie zarówno wykładów, jak i ćwiczeń. Od roku akademickiego 2022/2023 prowadzi po angielsku wykład *"Introduction to density functional theory"*, a także uczy na ćwiczeniach z systemów operacyjnych (od 2025/2026), wstępu do systemu UNIX i metod numerycznych (od 2017/2018) i inne. Ważnym elementem jego pracy jest opieka naukowa nad studentami i doktorantami – jest on m.in. promotorem pomocniczym trzech doktorantów oraz opiekunem prac magisterskich, inżynierskich i licencjackich. Dodatkowo angażuje się w popularyzację nauki, np. wygłaszając wykłady dla młodzieży szkolnej w ramach *"Digital Nanoscience"* czy organizując pokazy *"Małe eksperymenty - wielkie odkrycia!"* dla dzieci.

Podstawą do ubiegania się o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego jest cykl ośmiu powiązanych tematycznie prac (oznaczonych H1–H8 we wniosku habilitacyjnym), których wspólny mianownik stanowi tytuł autoreferatu *"Rozwój zaawansowanych funkcjonałów wymiano-korelacyjnych w ramach teorii funkcjonału gęstości Kohna-Shama"*.

Praca H1 przedstawia pierwszą w literaturze, w pełni samouzgodnioną realizację funkcjonałów podwójnie hybrydowych (DH) w formalizmie Kohna-Shama (KS), bazującą na metodzie zoptymalizowanego potencjału efektywnego (OEP) z uwzględnieniem korelacji na poziomie drugiego rzędu (MP2). Wykazano, że pełna samouzgodnioność pozwala uzyskać wiarygodne potencjały wymiennie-korelacyjne, poprawia ocenę powinowactwa elektronowego i przywraca fizyczny sens energii orbitalu LUMO. Dr Śmiga (pierwszy i korespondencyjny autor) zainicjował badania, wyprowadził równania OEP, zaimplementował je w kodzie ACESII oraz przeprowadził analizę wyników.

Publikacja H2 rozszerza koncepcję z pracy H1 na funkcjonały DH z rozdzieleniem zasięgu (range-separated, RS-OEP2). Badania na atomach i małych molekułach pokazały, że mimo poprawy opisu potencjałów i LUMO, standardowe parametry rozdzielania zasięgu nie poprawiają całkowitych energii, co ujawniło konieczność dalszego rozwoju tych funkcjonałów. Wkład habilitanta (pierwszy i korespondencyjny autor) obejmował m.in. wyprowadzenie równań, implementację całek z rozdziałem zasięgu w ACESII oraz napisanie pracy.

W pracy H3 przeprowadzono systematyczne testy spinowo-spolaryzowanego funkcjonału OEP2-sc dla układów otwartopowłokowych. Autorzy pokazali, że metoda ta osiąga dokładność konkurencyjną dla metod typu orbital-optimized MP2, a jej jakość wynika z fizycznych podstaw, a nie tylko z przypadku kompensacji błędów. Habilitant (pierwszy i korespondencyjny autor) wyprowadził odpowiednie równania dla układów spinowo-spolaryzowanych, jako pierwszy zaimplementował tę metodę dla układów otwartopowłokowych i nadzorował całość analiz.

Artykuł H4 analizuje fizykę ukrytą za funkcjonałami hybrydowymi, dowodząc, że generują one potencjały poprawnie opisujące proces zwany *quantum shell oscillation* w atomach i molekułach wieloelektronowych. Na podstawie analizy kompensacji błędów zaproponowano prosty semilokalny model potencjału korelacji. Dr Śmiga (pierwszy i korespondencyjny autor) odpowiadał za inicjację pomysłu, formalne wyprowadzenia OEP, walidację numeryczną i główny tekst publikacji.

Praca H5 uogólnia funkcjonały DH, łącząc ich parametry z wyższymi rzędami (GL3, GL4) rachunku zaburzeń Görlinga-Levy’ego w ramach formalizmu połączenia adiabatyicznego (AC). Umożliwiło to nadanie parametrom empirycznym twardego, fizycznego sensu. Dr Śmiga dzieli w tej pracy równorzędny wkład z pierwszym autorem (S. Janą), jest autorem korespondencyjnym i odpowiadał w szczególności za część formalną dotyczącą wyrazów GL wyższych rzędów oraz analizę numeryczną.

W pracy H6 zaproponowano zmodyfikowaną metodę interpolacji siły oddziaływania (mISI), która poprawia zachowanie funkcjonałów w obszarach dużych gradientów i w ogonie asymptotycznym gęstości, co było krytycznym krokiem do wykonania obliczeń samouzgodnionych w takich metodach. Dr Śmiga (pierwszy i korespondencyjny autor) zdefiniował problem, wniósł główny wkład w konstrukcję modelu mPC i przeprowadził pełną implementację w programie ACESII.

Praca H7 jest w mojej opinii przełomowa z punktu widzenia dziedziny w jakiej habi-

litant prowadził prace, a także w szerszym kontekście w chemii kwantowej. Zasluguje ona tam na wyróżnienie spośród zbioru pozostałych publikacji włączonych do rozprawy. Opisuje ona pierwszą w pełni samouzgodnioną implementację modeli połączenia adiabatycznego (ACM) w formalizmie KS. Opracowano nowy wariant hPC dla granicy silnego oddziaływania, co drastycznie ustabilizowało obliczenia, m.in. dla dysocjacji cząsteczki wodoru. Nie mam wątpliwości, że praca ta znajdzie dalsze rozszerzenia i będzie inspiracją również dla innych badawczy. Dr Śmiga (pierwszy i korespondencyjny autor) wyprowadził formalne równania, zaprojektował model hPC i dokonał implementacji do oprogramowania.

Praca H8 to obszerna synteza badająca źródła niedokładności w funkcjonałach opartych na drugim rzędzie rachunku zaburzeń (ab initio, ACM, DH). Wprowadzono nowatorską, hierarchiczną dekompozycję błędów (na te pochodzące od samego funkcyjnału, orbitali oraz energii orbitalnych), wykazując dominującą rolę wartości własnych. Dr Śmiga jako autor korespondencyjny nadzorował całe przedsięwzięcie, współtworzył program do ekstrakcji błędów oraz odpowiadał za formalną interpretację ograniczeń tych funkcyjnałów.

Wyżej wymienione prace tworzą wysoce spójną, logicznie zaplanowaną i konsekwentnie zrealizowaną całość naukową. Tematem łączącym wszystkie osiem publikacji jest dążenie do pełniejszego, fizycznego zrozumienia zaawansowanych przybliżeń na IV i V szczeblu tzw. drabiny Jakuba (funkcyjnały hybrydowe, podwójnie hybrydowe, "ab initio" DFT oraz modele ACM). Dr Śmiga metodycznie przechodził od rozwiązań technicznych (jako pierwszy wdrażając procedurę pełnego samouzgodnienia z wykorzystaniem niezwykle trudnej numerycznie metody OEP w pracach H1, H2 i H7), poprzez rygorystyczne wyprowadzenia fizyczne modeli opartych na połączeniu adiabatycznym (H5, H6, H7), aż do stworzenia kompleksowych ram diagnostycznych, które pozwalają dekomponować błędy na czynniki pierwsze (H4, H8). Wyniki uzyskane w jednej pracy często naturalnie stanowiły bazę metodyczną dla kolejnych analiz kandydata. Taka konstrukcja dorobku pokazuje celową strategię poznawczą - nie jest to zbiór oderwanych publikacji, lecz wieloletni, zamknięty logicznie program badawczy.

Stopień samodzielności naukowej dr. Śmigi należy ocenić jako wybitny. Świadczą o tym następujące fakty. We wszystkich 8 publikacjach stanowiących osiągnięcie habilitacyjne kandydat pełni rolę autora korespondencyjnego, co zwyczajowo oznacza, że był on główną osobą odpowiedzialną za kierowanie procesem badawczym. Ponadto, w sześciu z nich (H1, H2, H3, H4, H6, H7) jest pierwszym autorem. W pracy H5 ma rów-

norzędny wkład z pierwszym autorem, a w pracy H8 widnieje na pozycji ostatniego, nadzorującego autora, co jest naturalnym etapem budowania własnej grupy (publikacja ta powstała m.in. z bezpośrednim udziałem współpracowników/studentów). Z analizy oświadczeń wkładu autorskiego jednoznacznie wynika, że to dr Śmiga inicjował problemy badawcze, wyprowadzał skomplikowane aparaty matematyczne (równania dla metody zoptymalizowanego potencjału efektywnego) oraz samodzielnie dokonywał trudnej implementacji tych wzorów na poziomie kodu źródłowego (modyfikując zaawansowane środowisko ACESII). Samodzielność badacza potwierdzają także zdobyte kierownictwa w kilku projektach krajowych (w tym w prestiżowym programie SONATA BIS z NCN) ugruntowujących niezależne finansowanie jego badań. W tym miejscu warto nadmienić, że monotematyczny cykl prac opatrzone zostały bardzo przejrzystym komentarzem w dołączonym do wniosku autoreferacie, który czyta się z przyjemnością. Może on być w przyszłości użyty np. jako źródło wiedzy o temacie przekazane w bardziej pedagogiczny sposób niż w typowych publikacjach naukowych o charakterze badawczym, albo może być podstawą artykułu przeglądowego.

Po dokonaniu całościowej analizy zarówno osiągnięcia naukowego, jak i całkowitego dorobku naukowego dr. Szymona Śmigi, jak również jego dodatkowej działalności, stwierdzam, że z bardzo dużym nadmiarem spełniają one wymagania zwyczajowe i ustawowe stawiane kandydatom ubiegającym się o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego. Habilitant jest w pełni dojrzałym i samodzielnym naukowcem, dysponuje potężnym warsztatem naukowym i ogromnym potencjałem intelektualnym. Tak więc z pełnym przekonaniem stwierdzam, iż spełnione są wymagania określone w artyku 219. Ust. 1 Ustawy z dn. 20 lipca 2018 r. Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce (z późniejszymi zmianami). Niniejszym gorąco popieram wniosek dr. Szymona Śmigi o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego w dyscyplinie nauki fizyczne i tym samym wnoszę o dopuszczenie go do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego. Dodatkowo, ze względu na uzasadnioną w treści recenzji doniosłość osiągnięcia w skali międzynarodowej, wnoszę wniosek o wyróżnienie niniejszej rozprawy.

Michał Lesiuk