

Prof. dr hab. Artur Michalak
Zakład Chemii Teoretycznej
Wydział Chemii
Uniwersytet Jagielloński
ul. Gronostajowa 2, 30-387 Kraków
tel. +48-12-686-
fax. +48-12-686-2750
e-mail:



UNIWERSYTET
JAGIELLOŃSKI
W KRAKOWIE

Kraków, 26 sierpnia 2026 r.

Wydział Chemii

**Ocena dorobku naukowego dr. Szymona Filipa Śmigi
oraz jego osiągnięcia naukowego stanowiącego
podstawę postępowania habilitacyjnego**

Dr Szymon Filip Śmiga ukończył studia magisterskie z fizyki na Uniwersytecie Mikołaja Kopernika w Toruniu w 2009 r., przedstawiając pracę magisterską pt. „*Analiza efektywności różnych wariantów metody OEP zastosowanej do układów atomowych i molekularnych*”, napisaną pod kierunkiem prof. dr. hab. Ireneusza Grabowskiego. **Stopień doktora nauk fizycznych uzyskał w dniu 17 września 2014 r. na Uniwersytecie Mikołaja Kopernika w Toruniu** na podstawie rozprawy doktorskiej pt. „*Efektywny opis korelacji elektronowej w funkcjonalach wymiennokorelacyjnych, w teorii funkcjonalów gęstości*”, której promotorem był także prof. dr hab. Ireneusz Grabowski. Po doktoracie był zatrudniony jako asystent w Instytucie Fizyki UMK w latach 2014–2018, gdzie od lutego 2018 r. jest zatrudniony na stanowisku adiunkta.

Z uznaniem należy odnotować znaczącą aktywność zagraniczną Habilitanta, zapoczątkowaną jeszcze przed doktoratem dwumiesięcznym stażem w **grupie prof. Rodneya Bartletta w Quantum Theory Project w Gainesville**, a więc w jednym z najważniejszych ośrodków badawczych w zakresie chemii kwantowej na świecie. Po uzyskaniu stopnia doktora Habilitant odbył **trzy staże podoktorskie**: w National Nanotechnology Laboratory, Lecce, Włochy (współpraca z prof. Fabio Della Sala, wrzesień 2014 - listopad 2014), w National Research Council (CNR), (Lecce, Włochy; w grupie prof. Fabio Della Sali; grudzień 2015 - listopad 2016) oraz w Italian Institute of Technology w Arnesano (we współpracy z prof. Fabio Della Salą, dr. Eduardo Fabiano i dr.

ul. Gronostajowa 2

30-387 Kraków

tel. +48 12 686 26 00

fax +48 12 686 27 50

sekretar@chemia.uj.edu.pl

www.chemia.uj.edu.pl

Lucianem A. Constantinem; styczeń 2015 - listopad 2015; w ramach programu WZROST). Dodatkowo **Habilitant odbywał krótsze wizyty naukowe** m.in. w KTH Royal Institute of Technology w Sztokholmie, Italian Institute of Technology w Arnesano oraz na University of Erlangen, **co potwierdza konsekwentnie międzynarodowy charakter jego kariery naukowej.**

Na osiągnięcie habilitacyjne dr. Szymona Śmigi składają się wyniki badań przedstawione w cyklu 8 spójnych tematycznie artykułów poświęconych rozwojowi zaawansowanych funkcjonalów wymiennie-korelacyjnych w ramach teorii funkcjonalu gęstości Kohna-Shama. Badania Habilitanta dotyczą zatem tematyki lokującej się na pograniczu fizyki teoretycznej i chemii teoretycznej.

Niestety, w przedłożonej dokumentacji pojawia się bardzo niefortunna niespójność tytułu osiągnięcia habilitacyjnego. Mianowicie, w dokumencie zestawiającym wykaz osiągnięć naukowych tytuł osiągnięcia habilitacyjnego brzmi „*Rozwój zaawansowanych funkcjonalów wymiennie-korelacyjnych w ramach teorii funkcjonalu gęstości Kohna-Shama*”, ale we wniosku przewodnim oraz w autoreferacie: „*Rozwój zaawansowanych funkcjonalów wymiennie-korelacyjnych w ramach teorii funkcjonalu gęstości Kohna-Shama*” (podkreślenie moje). Należy podkreślić, że poza tymi dwoma wystąpieniami, w całej dokumentacji Autor konsekwentnie używa poprawnego terminu „*funkcjonal/-ły wymiennie-korelacyjny/-e*”. Zatem uważam, że ten niefortunny błąd we wniosku przewodnim oraz autoreferacie należy potraktować jako oczywistą omyłkę i przyjmuję, że niniejszym dokonuję oceny osiągnięcia zatytułowanego „*Rozwój zaawansowanych funkcjonalów wymiennie-korelacyjnych w ramach teorii funkcjonalu gęstości Kohna-Shama*”.

Prace stanowiące podstawę osiągnięcia habilitacyjnego dr. Szymona Śmigi ukazały się w latach 2016-2025 **w renomowanych czasopismach międzynarodowych:** *The Journal of Chemical Physics* (dwie prace: H1, H3), *Journal of Chemical Theory and Computation* (pięć prac: H2, H5-H8) oraz *The Journal of Physical Chemistry A* (H4), a zatem **w wiodących czasopismach w zakresie tematyki badań Autora.** **We wszystkich tych publikacjach Habilitant wskazany jest jako autor korespondujący, a w sześciu również jako pierwszy na liście autorów.** Przedłożona dokumentacja zawiera oświadczenia Habilitanta oraz współautorów dotyczące ich wkładu w pozostałe prace cyklu habilitacyjnego, z których jasno wynika dominujący wkład Habilitanta. Cele badawcze oraz wyniki osiągnięcia habilitacyjnego oraz innych istotnych osiągnięć naukowych dr. Szymona Śmigi podsumowane zostały w Autoreferacie (33 strony tekstu).

Cykl prac stanowiących podstawę osiągnięcia habilitacyjnego poświęcony jest konstrukcji, implementacji oraz szczegółowej, krytycznej analizie zaawansowanych funkcjonalów wymiennie-korelacyjnych (XC), mającej na celu głębokie zrozumienie źródeł dobrej dokładności i niepowodzeń stosowanych przybliżeń.

W publikacji H1 (*J. Chem. Phys.*, 2016) przedstawiono w pełni samouzgodnioną realizację funkcjonałów podwójnie hybrydowych (DH) w formalizmie Kohna-Shama (KS), opartą na metodzie zoptymalizowanego potencjału efektywnego (OEP), po raz pierwszy w literaturze. Także po raz pierwszy w literaturze, uzyskano wiarygodne potencjały wymiennie-korelacyjne oraz skorelowane gęstości elektronowe dla funkcjonałów typu DH. Wyniki mają duże znaczenie dla dalszych badań nad opracowaniem nowych funkcjonałów wymiennie-korelacyjnych. Publikacja H1 cytowana była dotychczas 31 razy (wg *Scopus*, w momencie przygotowywania recenzji).

Praca H2 (*J. Chem. Theory Comp.* 2020) przedstawia pierwszą w literaturze implementację metody typu RS-OEP2 (*range-separated-OEP2*), w której orbitale wyznaczone są z lokalnego potencjału efektywnego uwzględniającego dalekozasięgowy wkład wymiany z metody Hartree-Focka oraz wkład korelacyjny typu MP2. Publikacja H2 cytowana była dotychczas 22 razy.

W pracy H3 (*J. Chem. Phys.*, 2020) w oparciu o zaimplementowaną po raz pierwszy metodę OEP2-sc, przeprowadzono systematyczną analizę dokładności tego podejścia w obliczeniach potencjałów jonizacji, energii atomizacji i energii reakcji. Publikacja H3 cytowana była do tej pory 23 razy.

Praca H4 (*J. Phys. Chem A*, 2020) dotyczy wyjaśnienia fizycznych podstaw działania funkcjonałów hybrydowych opartych na metodzie OEP oraz mechanizmów kompensacji błędów w funkcjonałach semilokalnych. Publikacja ta cytowana była dotychczas 36 razy.

Publikacja H5 (*J. Chem. Theory Comp.* 2020) dotyczy związków pomiędzy teorią zaburzeń Görlinga-Levy'ego (GL) a parametryzacją funkcjonałów podwójnie hybrydowych w ramach formalizmu połączenia adiabaticznego (*adiabatic connection*). Podejście zaproponowane w pracy umożliwia rozwój nielokalnych postaci funkcjonałów z wykorzystaniem coraz dokładniejszych i bardziej zaawansowanych funkcjonałów semilokalnych. Publikacja H5 cytowana była do tej pory 18 razy.

Publikacje H6 (*J. Chem. Theory Comp.* 2020) oraz H7 (*J. Chem. Theory Comp.* 2022) związane są z opracowaniem oraz szczegółową analizą własności funkcjonałów typu ACM (*Adiabatic Connection Models*) ze szczególnym uwzględnieniem opisu granicy silnego oddziaływania oraz możliwości przeprowadzania w pełni samouzgodnionych obliczeń z zastosowaniem tych funkcjonałów. Prace H6 i H7 cytowane były dotychczas po 19 razy.

Ostatnia (najnowsza) publikacja w cyklu habilitacyjnym H8 (*J. Chem. Theory Comp.* 2025) dotyczy systematycznej analizy ograniczeń funkcjonałów XC opartych na drugim rzędzie rachunku zaburzeń, z uwzględnieniem funkcjonałów *ab initio*, ACM oraz DH oraz wskazuje na możliwe kierunki dalszego rozwoju funkcjonałów. Ponieważ publikacja ta

ukazała się niedawno, do tej pory pojawiło się tylko jedno cytowanie niezależne; można spodziewać się, że doczeka się istotnej liczby cytowań w przyszłości.

Inne istotne osiągnięcia naukowe dr. Szymona Śmigi związane są m.in. z rozwojem funkcjonałów energii kinetycznej, nowymi metodami obliczania potencjałów jonizacji oraz opracowania uproszczonych schematów w ramach metody sprzężonych klasterów, a także opracowaniem wariantu *subsystem*-TD-DFT, który Habilitant zaimplementował w szeroko używanym pakiecie TURBOMOLE.

Całkowity dorobek naukowy dr. Szymona Śmigi obejmuje w chwili obecnej 50 publikacji naukowych, w tym 45 prac opublikowanych po uzyskaniu stopnia doktora oraz 5 prac sprzed doktoratu (wg *Scopus*, w momencie przygotowywania recenzji). Łączny **współczynnik oddziaływania (*Impact Factor*)** prac Habilitanta wynosi **ponad 170**, w tym ponad 41 dla publikacji przedstawiających osiągnięcie habilitacyjne (całkowita liczba punktów ministerialnych wynosi 4385, z czego 935 przypada na cykl habilitacyjny). **Publikacje Habilitanta ukazały się w renomowanych czasopismach międzynarodowych**, takich jak *Journal of Chemical Theory and Computation*, *The Journal of Chemical Physics*, *The Journal of Physical Chemistry A*, *The Journal of Physical Chemistry Letters*, *Physical Review B*, *New Journal of Physics*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, *Molecular Physics*, *Advances in Quantum Chemistry* oraz *Advanced Science*. **Biorąc pod uwagę liczbę publikacji, ich spójność tematyczną, rangę czasopism oraz udział prac po doktoracie, całkowity dorobek Habilitanta oceniam jako wyróżniający na etapie habilitacji.**

Wyniki badań naukowych dr. Szymona Śmigi znajdują wyraźny oddźwięk w literaturze, czego dowodem jest **indeks Hirscha równy 18** przy całkowitej liczbie cytowań wynoszącej 766 (wg *Scopus*, w momencie przygotowywania recenzji). **Wartości te świadczą o rozpoznawalności dorobku Habilitanta w międzynarodowym środowisku fizyki teoretycznej / chemii teoretycznej.**

Dr Szymon Śmiga przedstawiał wyniki swoich badań na licznych konferencjach krajowych i międzynarodowych, w tym w formie 5 wykładów na zaproszenie, 8 referatów po uzyskaniu stopnia doktora oraz 8 posterów po uzyskaniu doktoratu, a także wielu wystąpień sprzed doktoratu. Szczególnie warto odnotować wystąpienia na zaproszenie na ważnych konferencjach naukowych: ACS Fall w Waszyngtonie (2025), Current Trends in Theoretical Chemistry w Krakowie (2024), EMN Meeting on Computation and Theory (2018, 2019) oraz Molecular Electronic Structure Buenos Aires (2016).

Zgodnie z dokumentacją, **działalność badawcza dr. Szymona Śmigi była wielokrotnie wyróżniana**: Habilitant otrzymał stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla wybitnych młodych naukowców, Nagrodę im. prof. Jacka Rychlewskiego za najlepszą pracę magisterską oraz kilka Nagród Rektora UMK za osiągnięcia naukowe i

organizacyjne, w tym nagrody II i III stopnia oraz wyróżnienie za indywidualne osiągnięcia naukowe.

Omawiając dorobek naukowy Habilitanta, **ze szczególnym uznaniem należy odnotować fakt kierowania przez niego szeregiem projektów badawczych finansowanych w trybie konkursowym, w tym projektami NCN PRELUDIUM, ETIUDA, SONATA, OPUS oraz SONATA BIS.**

Warto podkreślić, że w ostatnio rozstrzygniętym konkursie NCN OPUS 30, **kolejny projekt dr. Szymona Śmigi uzyskał finansowanie, zajmując drugą pozycję na liście rankingowej. Sukcesy Habilitanta w pozyskiwaniu środków finansowych na własne projekty badawcze godne są szczególnego podkreślenia w kontekście bardzo niskich wartości współczynnika sukcesu w konkursach NCN. Świadczą one zarówno o zdecydowanie ponadprzeciętnej wartości naukowej tych projektów, jak i o bardzo wysokiej ocenie dotychczasowego dorobku naukowego Autora.** Oczywiście dr Szymon Śmiga był także wykonawcą wielu projektów badawczych kierowanych przez jego mentora, prof. Ireneusza Grabowskiego; w tym także projektów międzynarodowych.

Warto także podkreślić, że **dr Szymon Śmiga prowadzi szeroką i wielowątkową współpracę naukową z wiodącymi grupami badawczymi z zagranicy, obejmującą m.in. zespoły prof. Fabio Della Sali w CNR/Istituto Nanoscienze w Lecce, prof. Prasanjita Samala w NISER w Bhubaneswar, prof. Martina Kauppa i dr. Artura Wodyńskiego w Technische Universität Berlin, prof. Rodneya Bartletta w Quantum Theory Project w Gainesville, prof. So Hirata na University of Illinois at Urbana-Champaign, prof. Pavla O. Drala na Xiamen University, prof. Julien Toulouse'a na Sorbonne Université oraz prof. Paoli Gori-Giorgi związanej z Microsoft Research AI for Science. Współpraca międzynarodowa Habilitanta zaowocowała licznymi wspólnymi publikacjami.**

Wyrazem rozpoznawalności Habilitanta jako naukowca jest także działalność recenzencka. Dr Szymon Śmiga recenzował artykuły dla międzynarodowych czasopism naukowych, takich jak *Nature Communications*, *Journal of Chemical Theory and Computation*, *Chemical Physics Letters*, *Computation*, *Theoretical Chemistry Accounts* oraz *Computational and Theoretical Chemistry*. Ponadto pełnił funkcję recenzenta dla Narodowego Centrum Nauki w konkursie MINIATURA w latach 2023–2025 oraz dla Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej w 2018 r.

Dr Szymon Śmiga od wielu lat prowadzi zajęcia dydaktyczne w Instytucie Fizyki UMK. Aktualnie prowadzi m.in. wykład *Introduction to density functional theory* w języku angielskim (od 2022/23) oraz ćwiczenia z przedmiotów *Systemy operacyjne*, *Wstęp do systemu UNIX* i *Metody numeryczne*. Wcześniej — jeszcze przed doktoratem — prowadził zajęcia z *Metod matematycznych fizyki I*, *Matematyki elementarnej*, *Fizyki w symulacji komputerowej i modelowaniu komputerowym*, *Pracowni komputerowej III - UNIX i Internet*, *Kursu wyrównawczego z fizyki*, *Języków programowania*, *Kursu HTML5* oraz *Kursu Qt*. Działalność

dydaktyczna Habilitanta obejmuje więc zarówno zajęcia specjalistyczne z teorii funkcjonału gęstości, jak i praktyczne kształcenie studentów w zakresie przedmiotów podstawowych, metod numerycznych, systemów operacyjnych i narzędzi obliczeniowych.

Najistotniejszym elementem osiągnięć dydaktycznych, szczególnie ważnym u progu pełnej samodzielności oraz uzyskania prawa do prowadzenia doktoratów, jest opieka nad studentami i doktorantami. **W tym kontekście warto podkreślić, że Habilitant aktywnie współpracuje naukowo ze studentami na wszystkich etapach kształcenia. Jest promotorem pomocniczym trzech doktorantów:** Vignesha Balaji Kumara i Gabriela Chirchira w Szkole Doktorskiej Nauk Ścisłych i Przyrodniczych Academia Scientiarum Thoruniensis oraz Igora Sawickiego w Interdyscyplinarnej Szkole Doktorskiej Academia Copernicana. **Był lub jest promotorem licznych prac dyplomowych:** prac magisterskich Katarzyny Leonarcik, Sylwii Siecińskiej, Igora Sawickiego i Bogumiły Jezierskiej, a także prac licencjackich / inżynierskich Igora Sawickiego, Bogumiły Jezierskiej oraz Yana Lukashevicha. Opiekował się również studentami w ramach Toruń Students Summer Programs w latach 2020–2025, a **studenci pozostający pod jego opieką uzyskiwali wyróżnienia**, w tym stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz wyróżnienie pracy magisterskiej w Instytucie Fizyki UMK.

Na podkreślenie zasługuje również aktywność popularyzatorska Habilitanta. Dr Szymon Śmiga był wykładowcą podczas inicjatywy *Digital Nanoscience-CNN* organizowanej dla uczniów szkół ponadpodstawowych, uczestniczył w dniach otwartych Instytutu Fizyki UMK, **był inicjatorem i współorganizatorem** pokazów fizycznych *Małe eksperymenty – wielkie odkrycia!* dla przedszkolaków i dzieci z klas 1–3 oraz wykładowcą szkoły letniej *Toruń Astrophysics, Spectroscopy, and Quantum Chemistry School – TASQ*.

Należy podkreślić także dorobek organizacyjny dr. Szymona Śmigi, ponadprzeciętny na tym etapie kariery. Habilitant pełni obecnie funkcję dyrektora ds. naukowych Instytutu Fizyki UMK, zastępcy przewodniczącego Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne, przedstawiciela pracowników ze stopniem doktora w Kolegium Elektorów UMK, członka Rektorskiej Komisji ds. Nagród dla Nauczycieli Akademickich oraz członka Komisji ds. Okresowej Oceny Nauczycieli Akademickich w dyscyplinie Nauki Fizyczne. **Powierzenie Habilitantowi tych funkcji świadczy o wysokim uznaniu, jakim cieszy się on na macierzystej uczelni.** Od 2018 r. Habilitant jest także administratorem serwerów HPC i oprogramowania naukowego w Instytucie Fizyki UMK, a ponadto współorganizował konferencję QSCP 2022, był głównym organizatorem warsztatów *Quantum Chemistry Workshop in Toruń* oraz członkiem komitetu organizacyjnego szkoły letniej TASQ.

Podsumowując, uważam, że przedstawione jako podstawa osiągnięcia habilitacyjnego wyniki badań dr. Szymona Filipa Śmigi stanowią istotny wkład w rozwój fizyki teoretycznej / chemii teoretycznej. Podobnie należy ocenić inne jego prace opublikowane po doktoracie, które nie zostały umieszczone w cyklu habilitacyjnym. Aktywność naukowa Habilitanta, jak również jego aktywność dydaktyczna i organizacyjna, świadczą pozytywnie o jego wysokich kwalifikacjach do samodzielnej pracy naukowo-badawczej. W mojej opinii spełnione są wszystkie przesłanki wymienione w art. 219 aktualnie obowiązującej ustawy, wymagane do uzyskania stopnia naukowego doktora habilitowanego. Uważam więc także, że nadanie panu dr. Szymonowi Filipowi Śmidze stopnia doktora habilitowanego w dyscyplinie nauki fizyczne jest w pełni uzasadnione.

Jednocześnie, mając na uwadze duże znaczenie naukowe osiągnięć Habilitanta i jego międzynarodową rozpoznawalność, potwierdzoną m.in. licznymi cytowaniami jego publikacji, znaczącymi sukcesami w pozyskiwaniu środków na finansowanie projektów badawczych, zaproszeniami do recenzowania prac naukowych oraz oceniania projektów badawczych czy wykładami na zaproszenie na znaczących konferencjach międzynarodowych, niniejszym wnioskuję do Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne UMK o wyróżnienie osiągnięć dr. Szymona Filipa Śmigi stanowiących podstawę ubiegania się o nadanie stopnia doktora habilitowanego.

Prof. dr hab. Artur Michalak