

Białystok, 15 czerwca 2024 r.

prof. dr hab. Andrzej Stupakiewicz
Wydział Fizyki
Uniwersytet w Białymstoku

**Recenzja w postępowaniu habilitacyjnym Pana dra Michała Antkowiaka
osiągnięcia pt. „Modelowanie i symulacje nanomagnetyków molekularnych o różnych
topologiach oddziaływań i wartościach spinu”**

Przedmiotem niniejszej oceny jest przedstawione przez dra Michała Antkowiaka jego habilitacyjne osiągnięcie naukowe w związku z postępowaniem w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki fizyczne. Recenzję sporządzono na podstawie wniosku procedowanego zgodnie z art. 221 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce. Równocześnie oświadczam o braku jakiegokolwiek zależności, które mogłyby wpłynąć na obiektywność mojej oceny.

Przebieg pracy naukowej

Pan dr Michał Antkowiak ukończył studia magisterskie na Wydziale Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, w 2006 roku i uzyskał tytuł magistra informatyki (specjalność Informatyka Stosowana). W tym samym roku, w ramach wyjazdu na stypendium Socrates-Erasmus, uzyskał tytuł magistra informatyki na Uniwersytecie w Umea (Szwecja). Studia doktoranckie odbył w latach 2007-2013 na Wydziale Fizyki UAM. W trakcie studiów w 2011 roku odbył trzymiesięczny staż naukowy w Instytucie Fizyki i Chemii Materiałowej w Strasburgu (Uniwersytet w Strasburgu/CNRS) pod kierunkiem prof. Marca Drillona. Staż został zrealizowany w ramach stypendium z programu „UAM: Unikatowy Absolwent = Możliwości”. W czasie studiów doktoranckich otrzymał naukowe nagrody Rektora UAM w 2010 i 2012 oraz stypendium naukowe w okresie 2010-2012.

W 2013 roku uzyskał stopień doktora nauk fizycznych na podstawie rozprawy doktorskiej pt. „Analiza numeryczna własności magnetycznych wielocentrowych klastrów molekularnych”, której promotorem był prof. dr hab. Grzegorz Kamieniarz. W tym samym roku dr M. Antkowiak został zatrudniony na Wydziale Fizyki UAM. Przez cały okres swojej pracy naukowej zajmuje się tematyką związaną z molekularnym magnetyzmem w układach topologicznych.

Ocena osiągnięcia habilitacyjnego

Do ocenianego osiągnięcia naukowego wskazanego we wniosku dr M. Antkowiaka pt. „Modelowanie i symulacje nanomagnetyków molekularnych o różnych topologiach oddziaływań i wartościach spinu” wchodzi: (A) cykl dziesięciu wieloautorskich artykułów naukowych oraz (B) osiągnięcie technologiczne w postaci własnego oprogramowania pt. *clique*, które dotyczy modelowania i symulacji magnetycznych układów molekularnych o różnej topologii.

Wstęp. Tematyka realizowana przez Habilitanta jest niezwykle interesująca oraz dynamicznie się rozwija zwłaszcza w ostatniej dekadzie. Jednym z powodów szerokiego zainteresowania są nowe wytwarzania syntetycznych nanoukładów molekularnych, w których można wprowadzać zmiany topologii. Układy te są fascynujące pod względem badania oddziaływania pojedynczych spinów w zakresie uporządkowania oraz splątania, jak również oddziaływania z

impulsami promieniowania laserowego, prądu spolaryzowanego spinowo, pola magnetycznego i elektrycznego. Bogactwo różnych geometrii i konfiguracji molekuł pozwala na sterowanie ładunkiem topologicznym, oddziaływaniem spinowym i orbitalnym w celu weryfikacji nowych zjawisk fizyki kwantowej. Ponadto układy molekularne umożliwiające sterowanie kierunkiem spinu oraz stanem kwantowym, kryją w sobie olbrzymie możliwości wykorzystania ich do przetwarzania informacji w komputerach kwantowych. Jedną z wielu zalet magnesów molekularnych jest ich rozmaita skalowalność oraz możliwość „zaprogramowania” praktycznie dowolnych konfiguracji spinowych, które są trudne do uzyskania w strukturach materii ciała stałego. Postęp technologii syntezy takich materiałów również wymaga zrozumienia fizyki procesów oddziaływania spinów pojedynczych molekuł uwzględniając anizotropowy wkład jednojonowy. Pod tym względem rozwój metod modelowania jest niezwykle ważny na etapie projektowania i eksperymentalnej weryfikacji właściwości takich układów.

Dr M. Antkowiak w zasadzie od początku swojej kariery naukowej skupił się na teoretycznych aspektach oddziaływań w magnetycznych układach molekularnych, przeprowadzając symulacje numeryczne oraz porównując uzyskane wyniki z molekularnymi związkami badanymi eksperymentalnie. Niewątpliwie w tym przypadku istotny był warsztat programistyczny, który został zainicjowany i opracowany przez Habilitanta.

A. Cykl autorskich publikacji. Ocenę dorobku habilitacyjnego zacznę od cyklu wieloautorskich publikacji [A1-A10] powiązanych tematycznie. Te artykuły zostały opublikowane w rozpoznawanych międzynarodowo bardzo dobrych i dobrych czasopismach: Journal of Physical Chemistry C (IF=3.9), dwie prace w Physical Review B (IF=3.7), Journal of Chemical Theory and Computation (IF=5.8), dwie prace w Dalton Transactions (IF=4), trzy prace w Journal of Magnetism and Magnetic Materials (IF=2.7) oraz rozdział w monografii - Lecture Notes in Computer Science (brak IF). Wymienione wyżej współczynniki czasopism *impact factor* (IF) dotyczą 2024 roku. W trzech pracach Habilitant jest pierwszym autorem (w tym w dwóch w zestawieniu alfabetycznym), w czterech jest drugim autorem i w dwóch jest ostatnim autorem (ze złamanym porządkiem alfabetycznym).

Jak określa Habilitant cykl dziesięciu publikacji należałoby podzielić tematycznie na dwie części zawierające wyłącznie prace teoretyczne modelowanych układów [A1,A2,A5] oraz teoretycznie-eksperymentalne badania bazujące na rzeczywistych układach [A3,A4,A6-A10]. W mojej ocenie ta sugestia jest nieistotna. Przedstawiony cykl publikacji dotyczy badań magnetycznych układów molekularnych o różnej topologii w geometrii pierścieni, pierścieni centrosymetrycznych oraz łańcuchów koordynacyjnych. Po zapoznaniu się z wymienionymi publikacjami, mogę z pełnym przekonaniem stwierdzić, że cały cykl prac jest monotematyczny, tak jak zostało to zatytułowane we wniosku habilitacyjnym.

W pracy [A1] wyniki modelowania oraz symulacje numeryczne układów nanomagnesów z nieparzystą liczbą spinów sprzężonych antyferromagnetycznie. Analizowane w publikacji geometrie pierścieni pozwoliły zaobserwować efekt frustracji magnetycznej. Tak jak zostało to zaprezentowane, modyfikacja wiązań wprowadza zmiany w energii sekwencji stanów podstawowych. Autorzy publikacji zaobserwowali w tych układach występowanie uporządkowania poziomów energii Lieba-Mattisa (LM). Jak podano we wnioskach pracy, zaproponowane modele umożliwiają znalezienie nowych stanów uporządkowania spinowego w syntetycznych magnetykach molekularnych. Kontynuacja tych badań została przedstawiona w pracach [A2,A5]. Dodatkowo uwzględniono efekt symetrii poprzez modyfikację liczby wiązań na wzór wprowadzenia defektów. Te zmiany wywierają wpływ na oddziaływanie oraz

uporządkowanie spinów i w rezultacie obniżają poziomy energetyczne LM. Niezwykle ciekawym rezultatem była weryfikacja poprzednich wyników modelowania na układach rzeczywistych bazujących na jonach Mn [A3]. Wyniki modelowania zostały zweryfikowane eksperymentalnie wyznaczając podatność magnetyczną w funkcji pola magnetycznego i temperatury. Syntezowane związki, jak zaznaczają autorzy publikacji, stanowią przykład dwudzielnych układów spinowych, dla których można uzyskać strukturę najniższych poziomów energetycznych LM.

W pracy [A4] zaprezentowano wyniki syntezowanych związków zawierających jony z grupy 3d-4f. Zarówno moment spinowy oraz moment orbitalny wybranych metali ma istotny wpływ na uporządkowanie magnetyczne, a w konsekwencji zaproponowane związki wykazują szereg interesujących właściwości magnetycznych. Obecność jonów Co, ze względu na ich silny wkład anizotropowy, pozwala uzyskać silne oddziaływanie spinowo-orbitalne w układzie uporządkowanym antyferromagnetycznie. Podobna koncepcja dotyczyła syntezowania dimerów Ni-Ln, gdzie Ln = Eu, Gd, Tb, Dy, Ho [A8]. W celu zrozumienia zjawisk w układach syntezowanych przeprowadzono symulacje numeryczne, których wyniki potwierdziły charakter obserwowanych sprzężeń. Ponadto obliczenia struktur energetycznych oraz energii aktywacji wykazały dla związku Ni-Dy przerwę pomiędzy poziomami w stanie podstawowym. Praca [A6] poświęcona była modelowaniu pierścieni przy zastosowaniu jonów Cr z odpowiednimi domieszkami. Do opisu właściwości układu zaproponowano model Heisenberga uwzględniający anizotropię w przybliżeniu jednojonowym oraz zawierający anizotropię energii wymiany. To podejście pozwoliło wyjaśnić zależności energetycznych widm elektronowego rezonansu paramagnetycznego oraz mikroskopowy charakter zjawisk.

W pracy [A7] zostały omówione układy molekuł zawierające jony Cr oraz heterometaliczne związki Gr-Ni oraz Cr-Zn. Analiza parametrów sprzężeń umożliwiła porównanie struktur energetycznych do wyników eksperymentalnych. Autorzy tej pracy zademonstrowali model zawierający Hamiltonian spinowy, który pozwala na uzyskanie, w wyniku dopasowania, bardzo dobrej zgodności z pomiarami podatności magnetycznej oraz struktury energetycznej. W teoretycznych pracach [A9,A10] badano układy o różnej topologii oraz układy sfrustrowane zawierające jony Cr. Opisując wyniki w zawartości Hamiltonianu uwzględniono anizotropię jednojonową. Uzupełniając wyniki symulacji DFT uzyskano wystarczającą zgodność z eksperymentem (pomiar magnetyzacji, podatności magnetycznej). Jednocześnie zademonstrowano w związkach Ni-Cr schodkowy charakter struktury spinu dla stanu podstawowego w funkcji parametru sprzężeń (zgodnie z twierdzeniem LM). Wyniki modelowania molekularnych układów spinowych o różnej topologii i różnym uporządkowaniu (ferro- i antyferromagnetycznym) oraz stanem spinowym sugerują, że istnieje możliwość ich zastosowania w budowie procesorów kwantowych.

B. Osiągnięcie technologiczne. Drugie osiągnięcie wymienione we wniosku dotyczy autorskiego oprogramowania o nazwie *clique* do modelowania oraz symulacji numerycznych dowolnej geometrii magnetycznych układów molekularnych. Oprogramowanie stworzono pod kątem zastosowania w dużych superkomputerach ze względu na obliczenia równoległe. Oprogramowanie zostało opisane w publikacji nr 5 (lista dodatkowych publikacji wymienionych w wykazie osiągnięć w p.2.2, pełny tekst publikacji znajduje się w załączniku nr 5 na str. 90). Oprogramowanie opiera się na metodzie diagonalizacji w środowisku obliczeń równoległych, co umożliwia przeprowadzanie symulacji numerycznych dla bardziej złożonych układów molekularnych cząsteczek redukując czas symulacji. Jak podaje Habilitant,

zoptymalizowano algorytm diagonalizacji oraz zastąpiono tworzenie macierzy czasochłonnym iloczynem tensorowym poprzez wykorzystanie map elementów niezerowych. Przedstawiona metoda badań pozwoliła na skrócenie czasu obliczeń nawet o dwa rzędy wielkości w stosunku do badań z wykorzystaniem dotychczasowych algorytmów.

Uwagi krytyczne. Przy ocenie wkładu Habilitanta w powstanie cyklu monotematycznych wieloautorskich publikacji mam kilka uwag. Jedną z nich dotyczy określenia wiodącego wkładu Habilitanta w powstanie poszczególnych publikacji [A1-A10]. Zwyczajowo pierwsza pozycja autora w spisie współautorów ze złamanym porządkiem alfabetycznym, a zarazem wskazanie autora jako korespondencyjnego, jednoznacznie sugeruje o jego wiodącej roli w powstaniu pracy. Podczas recenzji tego wniosku zauważyłem, iż tylko w jednej publikacji [A9] z dziesięciu, habilitant występuje jako autor korespondencyjny. Ponadto, zaledwie w trzech pracach jest on pierwszym autorem, natomiast w dwóch z nich występuje raczej ze względu na kolejność alfabetyczną. Analizując deklaracje Habilitanta o wkładzie własnym do każdej publikacji oraz oświadczenia współautorów odnoszę wrażenie, że Habilitant przyczynił się głównie do obliczeń numerycznych oraz modelowania układów molekularnych. Jak podaje Habilitant we wszystkich publikacjach jego wkład polega na „udziale w tworzeniu koncepcji pracy”. W mojej opinii nie jest to wystarczającym określeniem, jak dla autora wiodącego we wniosku habilitacyjnym. Jednocześnie z oświadczeń współautorów wynika, że jedynie w publikacji [A3] trzech z sześciu współautorów określa swój wkład na poziomie ok. 55-60%. W związku z tym wkład Habilitanta w powstanie tej publikacji jest zdecydowanie poniżej 50%. Z innych oświadczeń mogę wywnioskować, że wkład w powstanie pozostałych dziesięciu publikacji z cyklu jest również w okolicach 50% lub mniejszy. Na przykład z tekstu publikacji [A8] wynika, że wkład trzech autorów podano jako równy, co może sugerować, że wkład Habilitanta jest na poziomie ok. 33%. Jednak nie mam wątpliwości, że Habilitant miał wiodący wkład w przeprowadzenie symulacji numerycznych w oparciu o własny program do modelowania magnetycznych układów molekularnych.

Kolejna uwaga jest związana z wyodrębnieniem osobnej kategorii osiągnięcia, która dotyczy autorskiego oprogramowania *clique*, jako osiągnięcia technologicznego (art. 219 ust. 1. pkt 2c Ustawy). Z przedstawionego przez Habilitanta opisu nie widać tzw. składnika technologicznego, czyli nie można określić jaka technologia (mam tu na myśli programistyczna) została opracowana. Także nie ma informacji o wdrożeniu tego oprogramowania. Nie podano czy zostało stworzone oprogramowanie, czy algorytmy lub metody wykorzystane przy tworzeniu oprogramowania zostały skomercjalizowane czy też zaimplementowane w grupach niepowiązanych z autorem lub np. została udostępniona licencja na wykorzystanie oprogramowania.

W mojej opinii jest to bardzo specjalistyczne oprogramowanie do modelowania układów molekularnych, które jest wykorzystane do symulacji na superkomputerach ze względu na zapotrzebowanie dużej mocy obliczeniowych z uwagi na złożoność układu molekuł oraz ich oddziaływanie na poziomie spinowym. Tym niemniej, faktem jest, że wyłącznym autorem oprogramowania jest Habilitant, a podstawowe składniki i możliwości zostały opisane w publikacji nr 5 (z listy dodatkowych publikacji wymienionych w Wykazie osiągnięć w p.2.2, pełny tekst znajduje się w załączniku nr 5 na str. 90). Pozytywnie odbieram fakt, że Habilitant jest pierwszym i wiodącym autorem spośród trzech autorów tej publikacji. Ponadto, jak podaje Habilitant, w dziesięciu [A1-A9] z dziesięciu publikacjach z listy stanowiącej cykl

monotematyczny, jego autorskie oprogramowanie było wykorzystane do uzyskania wyników modelowania na podstawie symulacji numerycznych.

Ocena pozostałego dorobku naukowego i aktywności naukowo-dydaktycznej

Aktywność publikacyjna po doktoracie. Pozytywnie oceniam dorobek publikacyjny oraz aktywność naukową w okresie po uzyskaniu stopnia doktora. Poza listą wybranych 10 prac habilitacyjnych, Habilitant w tym okresie był współautorem 13 prac naukowych (np. trzy publikacje w Phys. Rev. B), w tym 6 monografii (wszystkie wydawnictwa „Springer”). Łącznie na moment złożenia wniosku habilitacyjnego posiada w swoim dorobku 32 prace (w tym 9 prac opublikowano przed doktoratem).

W okresie po uzyskaniu stopnia doktora zaprezentował na konferencjach krajowych i międzynarodowych 3 referaty na zaproszenie, 7 referatów zgłoszonych oraz 6 prezentacji w formie plakatu. Oprócz tego wygłosił 2 wykłady na seminariach w Instytucie Fizyki Jądrowej PAN oraz na Wydziale Chemii Uniwersytetu w Barcelonie.

W latach 2013-2023 brał udział w szkołach oraz szkoleniach zawodowych podnosząc swoje kwalifikacje w ośrodkach krajowych (Gdańsk’2022, Białystok’2019, Kraków’2015) oraz zagranicznych (Niemcy’2022, Japonia’2019). W tym okresie również uczestniczył w pracach komitetów organizacyjnych trzech konferencji (XXI Minisymposium Fizyki Statystycznej, Poznań’2016; The International Conference ”Simulations of Functional Materials” Ciężarów’2022; 4th International Conference on Parallel Processing & Applied Mathematics Gdańsk’2022).

W celu podania ilościowej aktywności publikacyjnej, przytoczę dane bibliometryczne Habilitanta. Według wniosku jego prace były cytowane 354 razy (dane z bazy Web of Science z dnia 17.07.2023), w tym 231 razy bez uwzględnienia autocytowań, a indeks Hirscha osiągnął wartość 10. W mojej opinii jest to dobry wynik na obecnym etapie kariery naukowej.

Współpraca międzynarodowa. Należy podkreślić widoczną aktywność Habilitanta w zakresie współpracy międzynarodowej. Można to zauważyć na podstawie oświadczeń współautorów z ośrodków zagranicznych dotyczących wkładu w publikacje habilitacyjne [A4, A6-A8]. Poza tym do wniosku Habilitant dołączył potwierdzenia prowadzonej współpracy z grupami zagranicznymi z Instytutu Maxa Plancka w Dreźnie, Uniwersytetu w Manchesterze oraz Instytutu Weizmanna. Na szczególną uwagę zasługuje trzymiesięczny zagraniczny staż w 2023 roku w grupie prof. Aromi z Uniwersytetu w Barcelonie. Jak podaje Habilitant współpraca z tą grupą została nawiązana w celu przeprowadzenia modelowania syntetyzowanych układów molekularnych zawierających jony ziem rzadkich.

Udział w realizacji projektów badawczych. W okresie przed uzyskaniem stopnia doktora Habilitant uczestniczył jako wykonawca oraz główny wykonawca w projektach badawczych (głównie finansowanych przez MNiSW), europejskim projekcie NoE MAGMANet oraz kilku lokalnych projektach "obliczeniowych”. Po uzyskaniu stopnia doktora Habilitant jedynie zrealizował w 2022 roku działanie naukowe w ramach MINIATURA 6 NCN (środki na staż naukowy). Natomiast nie jest to projekt badawczy, jak podano we wniosku.

Aktywność dydaktyczna oraz popularyzatorska. Habilitant w okresie swojej pracy na Wydziałach: Fizyki, Chemii, Matematyki i Informatyki, Nauk Geograficznych i Geologicznych UAM prowadził zajęcia dydaktyczne ze studentami oraz zajęcia dla studentów zagranicznych

UAM. Są to m.in. wykłady z „Teorii informacji i kodowania”, „Algorytmy i struktura danych”, „Fizyka przetwarzania dźwięku” oraz „Sztuczna inteligencja”. Oprócz tego realizował ćwiczenia oraz zajęcia laboratoryjne z fizyki oraz z przedmiotów bloku informatycznego. Dziwnie wygląda wypunktowanie przez Habilitanta w postaci osiągnięcia, określonego jako opracowanie sylabusów. Uważam, że należy to do obowiązków każdego nauczyciela akademickiego.

Habilitant ma widoczny udział w promowaniu młodej kadry jako promotor jednej pracy magisterskiej oraz, co jest o wiele bardziej istotne udział promotora pomocniczego w przewodzie doktorskim.

Habilitant aktywnie uczestniczy również w popularyzacji nauki, prezentuje wykłady w ramach Poznańskiego Festiwalu Nauki i Sztuki (głównie w okresie przed doktoratem) oraz bierze udział w akcjach promocyjnych organizowanych na Wydziale Fizyki UAM.

Podsumowanie

Habilitacyjny dorobek naukowy dr Michała Antkowiaka mogę ocenić jako dobry. Cykl publikacji habilitacyjnych jest monotematyczny, a prace zostały opublikowane w dobrych i bardzo dobrych czasopismach, ale nie wybitnych. Trudno było wywnioskować z przedstawionej dokumentacji o wiodącym charakterze udziału w publikacjach habilitacyjnych. Natomiast po zapoznaniu się z pełnymi tekstami publikacji mogę wywnioskować, że jest on wiodącym autorem oraz inicjatorem prac związanych z modelowaniem i symulacjami numerycznymi magnetycznych układów molekularnych. Pozytywnie oceniam to, że Habilitant jest autorem oryginalnego oprogramowania do modelowania układów molekularnych. Program ten był podstawowym narzędziem umożliwiającym uzyskanie wyników symulacji oraz wyjaśnienie eksperymentów w układach syntezowanych, które zostały opracowane w ramach współpracy międzynarodowej. Bardzo dobrze oceniam działalność dydaktyczną i popularyzatorską.

W mojej opinii, przedstawione osiągnięcie naukowe jest wystarczające, zatem spełnia wymagania stawiane przed kandydatami do stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauki fizyczne, zawarte w art. 219 Ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 r. W związku z tym wnioskuję o przyjęcie rozprawy habilitacyjnej dr Michała Antkowiaka i wnioskuję o dopuszczenie do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

A. Stupaiewicz