

dr hab. inż. Maciej Winiarski
tel.: +48 71 3954 131, e-mail: m.winiarski@intibs.pl
Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych
im. Włodzimierza Trzebiatowskiego Polskiej Akademii Nauk
ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław

Recenzja w postępowaniu habilitacyjnym dra Michała Antkowiaka

W skład przedłożonego do oceny osiągnięcia zatytułowanego „*Modelowanie i symulacje nanomagnetyków molekularnych o różnych topologiach oddziaływań i wartościach spinu*” wchodzi cykl 10 powiązanych tematycznie artykułów naukowych (A1-A10) oraz osiągnięcie technologiczne w postaci oprogramowania. Omówienie merytoryczne cyklu publikacji w autoreferacie jest dobrze przemyślane i czytelne, ale wydaje się mało obszerne. W części z prac przedstawiono czysto teoretyczne badania dla hipotetycznych układów. Jednak w większości z nich wyniki modelowania są kluczowym elementem w dyskusji danych eksperymentalnych dla kompleksów zawierających jony metali przejściowych.

W publikacji A1 przedstawiono fundamenty teoretyczne dla dalszej pracy naukowej Habilitanta. Dotyczy ona użycia modelu Heisenberga do badania frustracji w nanomagnetykach. Dla zbioru układów o nieparzystej liczbie jonów i osłabionym pojedynczym wiązaniu wyznaczono uniwersalny charakter sekwencji stanów podstawowych. Materiały takie wykazują uporządkowanie stanów podstawowych typu Lieba-Mattisa pomimo braku dwudzielności, co wydaje się interesującym wynikiem.

W publikacji A2 dokonano kontynuacji i rozszerzenia badań opisanych w pracy A1. Szczególny nacisk położono na własności antyferromagnetycznych pierścieni z dodatkowym spinem w centrum, który oddziałuje z otaczającymi go składnikami układu. Pośrednia dyskusja własności rzeczywistych materiałów (Cr_9 , Cr_8Ni , Fe_{10}) dowodzi uniwersalności wniosków wynikających z modelowania teoretycznego.

Publikacja A3 stanowi przykład udanej współpracy pomiędzy eksperymentalnym zespołem oraz teoretykami. Dla dwóch nowych kompleksów zawierających klastry $[\text{Mn}^{\text{II}}_3\text{Mn}^{\text{III}}]$ i $[\text{Mn}^{\text{II}}_2\text{Mn}^{\text{III}}_2]$ wykonano pomiary oraz modelowanie ich własności magnetycznych. W jednym przypadku oczekiwano najniższego możliwego stanu spinowego, co może być interesujące z punktu widzenia zastosowań w informatyce kwantowej. W drugim przypadku pożądanym stanem podstawowym jest maksymalny stan spinowy, optymalny dla magnezu jednocząsteczkowego. Zaproponowano bardzo uproszczony obraz badanych układów, który doprowadził jednak do dobrego opisu ich magnetycznego stanu podstawowego. Dyskusję wyników dla fenomenologicznego modelu w pewnym stopniu potwierdzono dzięki wynikom równie uproszczonych obliczeń opartych o teorię funkcjonału gęstości (DFT). Pierwsza część dyskusji wskazuje, jak ważna w opisie teoretycznym rzeczywistych układów jest anizotropia, po czym dalsza uwaga skupiona zostaje na izotropowym, ogólnym opisie stanu spinowego. Ostateczne wnioski wydają się niespójne z dyskusją i czytelnik nie uzyskuje jednoznacznej odpowiedzi na pytanie, czy wyniki eksperymentalne świadczą o dobrym potencjale aplikacyjnym badanych kompleksów.

W pracy A4 scharakteryzowano własności magnetyczne rodziny kompleksów zawierających 6 jonów metali (3d-4f): 3 kobaltu i 3 lantanowców (La, Gd, Tb, Dy, Ho). Wykazano antyferromagnetyczne sprzężenie w takich układach (za wyjątkiem ferromagnetycznego $\text{Co}^{\text{II}}_3\text{-Gd}^{\text{III}}_3$). Modelowanie oparte o hamiltonian spinowy wykonano jednak jedynie dla $\text{Co}^{\text{II}}_3\text{-La}^{\text{III}}_3$. Ogólne wnioski i dyskusję wyników dla reszty materiałów sformułowano w oparciu o obliczenia DFT. W przypadku pracy A4 dobrze widoczne są techniczne granice użycia metod naukowych stosowanych przez Habilitanta. Z tego powodu wkład Habilitanta w dyskusję i ostateczne wnioski pracy A4 jest nieznaczny.

Praca A5 ma czysto teoretyczny charakter i stanowi rozszerzenie badań z prac A1-A2, czyli wykazanie uniwersalnego uporządkowania stanów podstawowych w pierścieniowych nanomagnetykach z centrowaniem (materiałach dwuskładnikowych). W tym przypadku modelowanie przeprowadzono dla układów o parzystej liczbie jonów.

W pracy A6 przedstawiono wyniki modelowania i pomiarów własności magnetycznych dla pierścieni Cr_7M , gdzie $\text{M} = \text{Cd}, \text{Ni}, \text{Mn}$. Dzięki uwzględnieniu wielu składowych anizotropii występujących w badanych układach, uzyskano bardzo dobrą zgodność pomiędzy wynikami modelowania i danymi eksperymentalnymi. Praca A6 nie jest obszerna, jednak dobrze przedstawia potencjał naukowy modelowania opartego o hamiltonian

spinowy. Należy też odnotować, że jest to pierwsza praca, w której Habilitant jest wiodącym autorem.

Praca A7 jest ciekawym przykładem zastosowania obliczeń DFT i hamiltonianu spinowego do opisu własności magnetycznych cząsteczek Cr_8 , Cr_7Ni i Cr_7Zn . Wykazano w niej, że zaawansowane obliczenia DFT mogą doprowadzić do wyznaczenia dokładnych wartości całek wymiany, które dalej mogą posłużyć jako parametryzacja dla hamiltonianu spinowego. Uzyskano w ten sposób bardzo dobrą zgodność przewidzianych teoretycznie przebiegów podatności magnetycznej z danymi eksperymentalnymi. Biorąc jednak pod uwagę ogólną charakterystykę metod DFT, pod znakiem zapytania pozostaje kwestia, czy zastosowana w pracy A7 metodologia sprawdzi się w przypadku cząsteczek zbudowanych z innych metali przejściowych.

W pracy A8 zaprezentowano badania własności magnetycznych zbioru polimerów koordynacyjnych zawierającego składowe Ni-Ln ($\text{Ln} = \text{Eu}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}$), które poza Ni-Eu wykazują ferromagnetyczny charakter. Dyskusja wyników modelowania teoretycznego wskazała na dużą przerwę energetyczną (powyżej 10K w odniesieniu do k_B) pomiędzy stanem podstawowym i pierwszym stanem wzbudzonym w Ni-Dy . Jest to pożądana cecha dla magnesów jednocząsteczkowych, którą wykazuje niewiele znanych cząsteczek. Z tego względu praca A8 ma dużo mocniejsze wnioski i większe znaczenie naukowe w porównaniu z pracą A3. Jest to też kolejna praca, w której Habilitant był wiodącym autorem.

Publikacja A9 stanowi teoretyczne studium magnetyzmu w cząsteczce $\text{Ni}^{\text{II}}_6\text{Cr}^{\text{III}}$. Przy pomocy modelowania fenomenologicznego i obliczeń DFT wykazano, że charakterystyczny przebieg podatności magnetycznej takiego układu wynika nie tylko z konkurencyjnych oddziaływań ferro- i antyferromagnetycznych ale również z frustracji spinowej. Dokładnie przedyskutowano wpływ poszczególnych parametrów modelu na możliwy stan podstawowy kompleksu $\text{Ni}^{\text{II}}_6\text{Cr}^{\text{III}}$, co tłumaczy rozbieżności w danych literaturowych. Publikacja jest bardzo krótka, ale jej wiodącym autorem jest Habilitant.

W pracy A10 przedstawiono wyniki modelowania własności magnetycznych cząsteczki Cr_8 , otrzymane przy pomocy względnie zaawansowanego podejścia teoretycznego opartego o wieloorbitalny model Hubbarda. Wykazano, że odpychanie kulombowskie pomiędzy elektronami zlokalizowanymi na sąsiednich jonach wzmacnia antyferromagnetyczne sprzężenie pomiędzy nimi. Skorelowany przeskok elektronów prowadzi tymczasem do osłabienia antyferromagnetyzmu w takim układzie. Praca A10

jest krótkim komunikatem, którego późniejsza rozszerzona forma nie została uwzględniona w cyklu publikacji i nie może być dyskutowana w ramach postępowania habilitacyjnego.

Osiągnięcie technologiczne wymienione w autoreferacie, czyli oprogramowanie "clique" do modelowania i symulacji nanomagnetyków molekularnych, zostało opisane w roku 2019 w mało znanym dla fizyków tytule. Do dnia dzisiejszego nie zostało zacytowane i nie udało mi się go odnaleźć w żadnym repozytorium oprogramowania. Nie jest zatem wykorzystywane przez środowisko naukowe poza samym autorem. Biorąc pod uwagę fakt, że aktualnie wszyscy teoretycy piszą dużą liczbę kodów obliczeniowych na własny użytek, nie jest to osiągnięcie w moim rozumieniu.

Większość publikacji wchodzących w skład cyklu habilitacyjnego dra Michała Antkowiaka trafiła do znanych czasopismach o wysokim wskaźniku wpływu i wysokiej punktacji ministerialnej. Początkowe prace teoretyczne zostały wielokrotnie zacytowane, co może dodatkowo podkreślać aktualność ich tematyki oraz wysoki poziom naukowy przedstawionych w nich wyników.

Jedynie w trzech z prac A1-A10 Habilitant jest pierwszym autorem. W przypadku prac o eksperymentalnym charakterze, teoretycy z oczywistych względów zajmują dalsze miejsca na liście autorów. Jednak moje wątpliwości budzi opis wkładu Habilitanta w powstanie większości przedstawionych prac. W publikacjach A1, A2 i A5, które stanowią podstawę metodologiczną reszty publikacji z cyklu, wiodącymi autorami byli inni naukowcy w tym Promotor doktoratu Habilitanta. Zasadne wydaje się pytanie, czy zadeklarowany wkład dra Michała Antkowiaka w sformułowanie problemu badawczego i stworzenie koncepcji tych prac, a następnie przeprowadzenie dyskusji wyników był znaczący. Podobne pytania można zadać w przypadku pracy A3, w której dyskusja wyników nie jest indywidualna. Wkład Habilitanta w powstanie pracy A4 jest nieznaczący. Praca A10 jest w zasadzie tylko wstępnym komunikatem. Prace A6 i A9 są mało obszerne (3-4 strony, abstrakt A6 składa się dosłownie z jednego zdania). Jedynie praca A7 robi wrażenie naprawdę solidnego dorobku naukowego, który według oświadczeń współautorów jest samodzielnym osiągnięciem Habilitanta.

Biorąc pod uwagę dysertację doktorską, trudno zauważyć postęp w rozwoju naukowym Habilitanta. Używał praktycznie tego samego formalizmu do badania własności magnetycznych takich samych układów (w dysertacji cząsteczki Cr_9 , Cr_8 i Cr_8Ni). Kontynuował pracę naukową wskazaną przez Promotora rozprawy doktorskiej. W przypadku prac zbiorowych wyraźne zdefiniowanie indywidualnego wkładu danego autora jest kluczowe do spełnienia ustawowego wymogu stawianego wobec habilitantów. Samo wykonanie dużej

liczby podobnych obliczeń w moim odczuciu nie stanowi istotnego indywidualnego osiągnięcia, które powinno cechować dojrzałego naukowca aspirującego do stopnia doktora habilitowanego.

Aby uniknąć takich wątpliwości, szeroko praktykowanym zwyczajem związanym z ubieganiem się o stopień naukowy doktora habilitowanego jest jednoznaczne udowodnienie samodzielności naukowej. Można tego dokonać między innymi poprzez samodzielne publikacje, wybór nowej tematyki badawczej po obronie doktoratu lub pracę w innym zespole badawczym. Habilitant nie dokonał żadnej z tych rzeczy. Tymczasem w dziewięciu z dziesięciu prac z cyklu habilitacyjnego i prawie całym dorobku publikacyjnym dra Michała Antkowiaka współautorem jest Promotor doktoratu. To współautorstwo jest tak silne, że zapytanie o Habilitanta w bazie Web of Science prowadzi do nazwiska Promotora w nawiasie, co sugeruje alias tej samej osoby. Mechanizmy stosowane przez naukowe bazy danych często prowadzą do nieścisłości związanych z afiliacją, autorstwem i cytowaniem dorobku danego naukowca, ale z takim wynikiem zapytania o autora spotkałem się pierwszy raz.

Należy też zauważyć, że z całkowitego dorobku publikacyjnego Habilitanta blisko jedna trzecia prac ma postać komunikatów, które trudno w środowisku fizyków traktować jako poważny dorobek naukowy (część z nich nie jest nawet indeksowana w bazie Web of Science). Ponadto 5 prac zostało opublikowanych w Acta Physica Polonica A, które chociaż jest czasopismem szanowanym i chętnie wykorzystywanym przez polskich naukowców, ma relatywnie niski wskaźnik wpływu. Ostatecznie można mieć wrażenie, że tylko połowę dorobku Habilitanta stanowią regularne publikacje naukowe i praktycznie wszystkie po obronie doktoratu trafiły do cyklu habilitacyjnego. Biorąc pod uwagę długość kariery (w tym studia doktoranckie od roku 2007), efektywność pracy naukowej Habilitanta jest relatywnie niska. Całkowita liczba cytowań dorobku publikacyjnego Habilitanta jest typowa dla teoretyków na tym etapie kariery.

Warte podkreślenia jest wszechstronne wykształcenie dra Michała Antkowiaka. Dużym atutem wydaje się doświadczenie zawodowe w dziedzinie informatyki i praca dyplomowa o zastosowaniu metod uczenia maszynowego w diagnostyce medycznej. Biegłe programowanie i prowadzenie obliczeń dużej skali są kluczowymi umiejętnościami dla współczesnych teoretyków. Warta odnotowania jest też aktywna działalność dydaktyczna i popularyzatorska, oraz udział Habilitanta w komitetach organizacyjnych. Do aktywności naukowej należy też zaliczyć kierownictwo małego projektu grantowego (Miniatura)

przyznanego przez Narodowe Centrum Nauki oraz udział w wielu projektach Promotora doktoratu (w tym międzynarodowym projekcie MAGMANet na początku kariery).

Z dokumentacji dołączonej do autoreferatu wynika duża aktywność wyjazdowa dra Michała Antkowiaka, udział w licznych szkoleniach, pobyty w Barcelonie (Hiszpania), Strasburgu (Francja) i Umei (Szwecja). Jednak fakt, że Habilitant w żadnej publikacji w karierze nie wykazał innej afiliacji niż UAM w Poznaniu, sugeruje brak istotnej aktywności poza macierzystą jednostką naukową. Ten ustawowy wymóg jest w praktyce trudny do zdefiniowania i w mojej ocenie liczne wyjazdy Habilitanta można uznać za zauważalną aktywność poza murami UAM w Poznaniu. Dodatkowym atutem dra Michała Antkowiaka mogą być też zagraniczne dyplomy uzyskane na początku kariery naukowej.

Biorąc pod uwagę całość dokumentacji związanej z postępowaniem habilitacyjnym, dr Michał Antkowiak jest dobrym specjalistą w obliczeniach teoretycznych, co potwierdzają liczne publikacje w prestiżowych czasopismach. Moje krytyczne uwagi dotyczące indywidualnego wkładu w powstanie cyklu publikacji naukowych prowadzą jednak do wniosku, że w dorobku habilitacyjnym dra Michała Antkowiaka brakuje indywidualnych osiągnięć. Dodatkowe osiągnięcie w postaci własnego oprogramowania uważam za nieistotne.

W mojej ocenie dr Michał Antkowiak nie spełnia wymagań stawianych kandydatom do stopnia doktora habilitowanego zgodnie z art. 219 ust.1. pkt 2 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce.

dr hab. inż. Maciej Winiarski