

Wykaz osiągnięć naukowych

1 Wykaz osiągnięć naukowych albo artystycznych, o których mowa w art. 219 ust. 1. pkt 2 Ustawy

W skład przedłożonego do oceny osiągnięcia zatytułowanego **Modelowanie i symulacje nanomagnetyków molekularnych o różnych topologiach oddziaływań i wartościach spinu** wchodzi:

- cykl powiązanych tematycznie 10 artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2b Ustawy,

- osiągnięcie technologiczne, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2c Ustawy.

1.1 Monografia naukowa, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2a Ustawy

Nie dotyczy.

1.2 Cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2b Ustawy

— po uzyskaniu stopnia doktora

- A1. G. Kamieniarz, W. Florek, and M. Antkowiak, “Universal sequence of ground states validating the classification of frustration in antiferromagnetic rings with a single bond defect,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, no. 14, p. 140411, 2015. DOI: 10.1103/PhysRevB.92.140411.
- A2. W. Florek, M. Antkowiak, and G. Kamieniarz, “Sequences of ground states and classification of frustration in odd-numbered antiferromagnetic rings,” *Phys. Rev. B*, vol. 94, no. 22, p. 224421, 2016. DOI: 10.1103/PhysRevB.94.224421.
- A3. M. Sobocińska, M. Antkowiak, M. Wojciechowski, G. Kamieniarz, J. Utko, and T. Lis, “New tetranuclear manganese clusters with $[\text{Mn}_3^{\text{II}}\text{Mn}^{\text{III}}]$ and $[\text{Mn}_2^{\text{II}}\text{Mn}_2^{\text{III}}]$ metallic cores exhibiting low and high spin ground state,” *Dalton Trans.*, vol. 45, no. 17, 7303–7311, 2016. DOI: 10.1039/c5dt04869a.
- A4. M. C. Majee, S. M. T. Abtab, D. Mondal, M. Maity, M. Weselski, M. Witwicki, A. Bieńko, M. Antkowiak, G. Kamieniarz, and M. Chaudhury, “Synthesis and magneto-structural studies on a new family of carbonato bridged 3d-4f complexes featuring a $[\text{Co}_3^{\text{II}}\text{Ln}_3^{\text{III}}(\text{CO}_3)]$ (Ln = La, Gd, Tb, Dy and Ho) core: slow magnetic relaxation displayed by the cobalt(II)-dysprosium(III) analogue,” *Dalton Trans.*, vol. 47, no. 10, 3425–3439, 2018. DOI: 10.1039/c7dt04389a.
- A5. W. Florek, M. Antkowiak, and G. Kamieniarz, “The Kahn degenerate frustration points and the Lieb-Mattis level order in heterometallic wheel molecules with competing interactions,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 487, UNSP 165326, 2019. DOI: 10.1016/j.jmmm.2019.165326.

- A6. M. Antkowiak, G. Kamieniarz, G. A. Timco, F. Tuna, and R. E. P. Winpenny, “Transferability of the anisotropic spin model coupling parameters in a family of doped chromium-based molecular rings,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 479, 166–169, 2019. DOI: 10.1016/j.jmmm.2019.01.106.
- A7. S. Weissman, M. Antkowiak, B. Brzostowski, G. Kamieniarz, and L. Kronik, “Accurate Magnetic Couplings in Chromium-Based Molecular Rings from Broken-Symmetry Calculations within Density Functional Theory,” *J. Chem. Theory Comput.*, vol. 15, no. 9, 4885–4895, 2019. DOI: 10.1021/acs.jctc.9b00459.
- A8. M. Antkowiak, M. C. Majee, M. Maity, D. Mondal, M. Kaj, M. Lesiów, A. Bieńko, L. Kronik, M. Chaudhury, and G. Kamieniarz, “Generalized Heisenberg-Type Magnetic Phenomena in Coordination Polymers with Nickel-Lanthanide Dinuclear Units,” *J. Phys. Chem. C*, vol. 125, no. 20, 11182–11196, 2021, ISSN: 1932-7447. DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c01947.
- A9. M. Antkowiak, B. Brzostowski, W. Florek, and G. Kamieniarz, “Metallic core $[\text{Ni}_6^{\text{II}}\text{Cr}^{\text{III}}]$ as an example of centered heterometallic rings displaying quantum effects,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 544, p. 168701, 2022, ISSN: 0304-8853. DOI: 10.1016/j.jmmm.2021.168701.
- A10. R. Lemański and M. Antkowiak, “Description of magnetic nanomolecules by the extended multi-orbital hubbard model: Perturbative vs numerical approach,” in *Parallel Processing and Applied Mathematics. PPAM 2022. Lecture Notes in Computer Science*, R. Wyrzykowski, J. Dongarra, E. Deelman, and K. Karczewski, Eds., vol. 13827, Cham: Springer International Publishing, 2023, pp. 382–391, ISBN: 978-3-031-30445-3.

Opis wkładu habilitanta w powstanie poszczególnych prac podano w punkcie 4 autoreferatu stanowiącego załącznik nr 3 do wniosku. Cały cykl dotyczy badań nanomagnetyków molekularnych, jednak można go podzielić na dwie części tematyczne mogące stanowić odrębne osiągnięcia w rozumieniu wymienionej ustawy. Część zawierająca artykuły [A1, A2, A5] dotyczy podejścia teoretycznego, w którym wykonane zostały symulacje i analizy modelowych układów, natomiast w części zawierającej artykuły [A3, A4, A6-A10] dokonano modelowania istniejących molekuł syntetyzowanych w znacznej części przez współautorów prac. Ze względu na topologie badanych układów można wyróżnić prace dotyczące pierścieni [A1, A2, A6, A7, A10], pierścieni centrowanych [A1, A2, A5, A9] i łańcuchów koordynacyjnych [A8].

1.3 Wykaz zrealizowanych oryginalnych osiągnięć projektowych, konstrukcyjnych, technologicznych lub artystycznych, zgodnie z art. 219 ust. 1. pkt 2c Ustawy

— po uzyskaniu stopnia doktora

Zaprojektowanie, stworzenie i wdrożenie narzędzia badawczego w postaci autorskiego oprogramowania *clique* do modelowania i symulacji nanomagnetyków molekularnych o dowolnej topografii oddziaływań i wartości spinów z wykorzystaniem metody ścisłej diagonalizacji. Oprogramowanie umożliwia wykonywanie obliczeń równoległych w środowisku komputerów dużej mocy i zostało wdrożone w wielu krajowych i europejskich centrach superkomputerowych. Uzyskane przy pomocy *clique* wyniki zostały wykorzystane w pracach [A1-A9] wymienionych w punkcie 1.2. Program został szczegółowo opisany w publikacji [5] wymienionej w pkt 2.2.

2 Wykaz aktywności naukowej albo artystycznej

2.1 Wykaz opublikowanych monografii naukowych (z zaznaczeniem pozycji wymienionych w pkt 1.1).

Nie dotyczy.

2.2 Wykaz opublikowanych rozdziałów w monografiach naukowych.

Wszystkie pozycje w tej części są materiałami opublikowanymi w ramach kolejnych edycji konferencji PPAM wymienionej w wykazie recenzowanych materiałów z konferencji międzynarodowych MEiN z dnia 17.07.2023. Pozycje [1]–[4] są indeksowane w bazie Web of Science (WoS).

— po uzyskaniu stopnia doktora

1. P. Kozłowski, G. Musiał, M. Haglauer, W. Florek, M. Antkowiak, F. Esposito, and D. Gatteschi, “Non-perturbative methods in phenomenological simulations of ring-shape molecular nanomagnets,” in *Parallel Processing and Applied Mathematics. PPAM 2013. Lecture Notes in Computer Science*, R. Wyrzykowski, J. Dongarra, K. Karczewski, and J. Waśniewski, Eds., vol. 8385, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014, pp. 438–447, ISBN: 978-3-642-55195-6.
2. P. Kozłowski, G. Musiał, M. Antkowiak, and D. Gatteschi, “Effective parallelization of quantum simulations: Nanomagnetic molecular rings,” in *Parallel Processing and Applied Mathematics. PPAM 2013. Lecture Notes in Computer Science*, R. Wyrzykowski, J. Dongarra, K. Karczewski, and J. Waśniewski, Eds., vol. 8385, Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2014, pp. 418–427, ISBN: 978-3-642-55195-6.
3. M. Antkowiak, Ł. Kucharski, and G. Kamieniarz, “Genetic algorithm and exact diagonalization approach for molecular nanomagnets modelling,” in *Parallel Processing and Applied Mathematics. PPAM 2015. Lecture Notes in Computer Science*, R. Wyrzykowski, E. Deelman, J. Dongarra, K. Karczewski, J. Kitowski, and K. Wiatr, Eds., vol. 9574, Cham: Springer International Publishing, 2016, pp. 312–320, ISBN: 978-3-319-32152-3.
4. M. Antkowiak, “Parallel exact diagonalization approach to large molecular nanomagnets modelling,” in *Parallel Processing and Applied Mathematics. PPAM 2017. Lecture Notes in Computer Science*, R. Wyrzykowski, J. Dongarra, E. Deelman, and K. Karczewski, Eds., vol. 10778, Cham: Springer International Publishing, 2018, pp. 351–358, ISBN: 978-3-319-78054-2.
5. M. Antkowiak, Ł. Kucharski, and M. Haglauer, “clique: A parallel tool for the molecular nanomagnets simulation and modelling,” in *Parallel Processing and Applied Mathematics. PPAM 2019. Lecture Notes in Computer Science*, R. Wyrzykowski, E. Deelman, J. Dongarra, and K. Karczewski, Eds., vol. 12044, Cham: Springer International Publishing, 2020, pp. 312–322, ISBN: 978-3-030-43222-5.

6. R. Lemański and M. Antkowiak, “Description of magnetic nanomolecules by the extended multi-orbital hubbard model: Perturbative vs numerical approach,” in *Parallel Processing and Applied Mathematics. PPAM 2022. Lecture Notes in Computer Science*, R. Wyrzykowski, J. Dongarra, E. Deelman, and K. Karczewski, Eds., vol. 13827, Cham: Springer International Publishing, 2023, pp. 382–391, ISBN: 978-3-031-30445-3.

2.3 Wykaz członkostwa w redakcjach naukowych monografi.

Nie dotyczy.

2.4 Wykaz opublikowanych artykułów w czasopismach naukowych (z zaznaczeniem pozycji wymienionych w pkt 1.2).

Wszystkie wymienione w tej części artykuły zostały opublikowane w czasopismach indeksowanych w bazie WoS lub w wykazie czasopism naukowych MEiN z dnia 17.07.2023. Pozycje [19], [20], [22], [25]–[27], [29], [31], [32], [6] zostały też wymienione w pkt 1.2.

— przed uzyskaniem stopnia doktora

7. G. Kamieniarz, P. Kozłowski, G. Musiał, W. Florek, M. Antkowiak, M. Haglauer, A. C. D’Auria, and F. Esposito, “Phenomenological modeling of molecular-based rings beyond the strong exchange limit: Bond alternation and single-ion anisotropy effects,” *Inorg. Chim. Acta*, vol. 361, no. 12-13, 3690–3696, 2008. DOI: 10.1016/j.ica.2008.03.106.
8. P. Kozłowski, G. Kamieniarz, M. Antkowiak, F. Tuna, G. A. Timco, and R. E. P. Winpenny, “Phenomenological modeling of the anisotropic molecular-based ring Cr_7Cd ,” *Polyhedron*, vol. 28, no. 9-10, SI, 1852–1855, 2009. DOI: 10.1016/j.poly.2009.02.022.
9. M. Antkowiak, P. Kozłowski, G. Musiał, W. Florek, G. Kamieniarz, and F. Esposito, “Modeling of the Experimental Molecular-Based Ring-Shaped Nanomagnets,” *Acta Phys. Pol. A*, vol. 118, no. 5, 965–966, 2010. DOI: 10.12693/APhysPolA.118.965.
10. P. Kozłowski, M. Antkowiak, and G. Kamieniarz, “Frustration signatures in the anisotropic model of a nine-spin $s=3/2$ ring with bond defect,” *J. Nanopart. Res.*, vol. 13, no. 11, SI, 6093–6102, 2011. DOI: 10.1007/s11051-011-0337-8.
11. M. L. Baker, G. A. Timco, S. Piligkos, J. S. Mathieson, H. Mutka, F. Tuna, P. Kozłowski, M. Antkowiak, T. Guidi, T. Gupta, H. Rath, R. J. Woolfson, G. Kamieniarz, R. G. Pritchard, H. Weihe, L. Cronin, G. Rajaraman, D. Collison, E. J. L. McInnes, and R. E. P. Winpenny, “A classification of spin frustration in molecular magnets from a physical study of large odd-numbered-metal, odd electron rings,” *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, vol. 109, no. 47, 19113–19118, 2012. DOI: 10.1073/pnas.1213127109.
12. W. Florek, L. A. Kaliszan, K. Jaśniewicz-Pacer, and M. Antkowiak, “Numerical analysis of magnetic states mixing in the Heisenberg model with the dihedral symmetry,” *EPJ Web of Conferences*, vol. 40, UNSP 14003, 2012. DOI: 10.1051/epjconf/20134014003.

13. G. Kamieniarz, P. Kozłowski, M. Antkowiak, P. Sobczak, T. Ślusarski, D. M. Tomecka, A. Barasiński, B. Brzostowski, A. Drzewiński, A. Bieńko, and J. Mroziński, “Anisotropy, Geometric Structure and Frustration Effects in Molecule-Based Nanomagnets,” *Acta Phys. Pol. A*, vol. 121, no. 5-6, 992–998, 2012. DOI: 10.12693/APhysPolA.121.992.
14. M. Antkowiak, P. Kozłowski, and G. Kamieniarz, “Zero Temperature Magnetic Frustration in Nona-Membered $s=3/2$ Spin Rings with Bond Defect,” *Acta Phys. Pol. A*, vol. 121, no. 5-6, 1102–1104, 2012. DOI: 10.12693/APhysPolA.121.1102.
15. M. Antkowiak, P. Kozłowski, and G. Kamieniarz, “Detection of ground states in frustrated molecular rings by in-field local magnetization profiles,” *Phys. Rev. B*, vol. 87, no. 18, p. 184430, 2013. DOI: 10.1103/PhysRevB.87.184430.

— po uzyskaniu stopnia doktora

16. R. Matysiak, P. Gegenwart, A. Ochiai, M. Antkowiak, G. Kamieniarz, and F. Steglich, “Specific heat of segmented Heisenberg quantum spin chains in $(\text{Yb}_{1-x}\text{Lu}_x)(4)\text{As-3}$,” *Phys. Rev. B*, vol. 88, no. 22, p. 224414, 2013. DOI: 10.1103/PhysRevB.88.224414.
17. Ł. Kucharski, G. Kamieniarz, M. Antkowiak, and A. Drzewiński, “Single-Ion Anisotropy Estimates for the Rhenium(IV-Based) Molecular Magnets: Modeling and Simulations Studies,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol. 83, no. 6, p. 064702, 2014. DOI: 10.7566/JPSJ.83.064702.
18. M. Antkowiak, Ł. Kucharski, and G. Kamieniarz, “Non-uniform coupling model of the frustrated chromium-based ring Cr_8Ni ,” *EPJ Web of Conferences*, vol. 75, p. 05007, 2014. DOI: 10.1051/epjconf/20147505007.
19. G. Kamieniarz, W. Florek, and M. Antkowiak, “Universal sequence of ground states validating the classification of frustration in antiferromagnetic rings with a single bond defect,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, no. 14, p. 140411, 2015. DOI: 10.1103/PhysRevB.92.140411.
20. W. Florek, M. Antkowiak, and G. Kamieniarz, “Sequences of ground states and classification of frustration in odd-numbered antiferromagnetic rings,” *Phys. Rev. B*, vol. 94, no. 22, p. 224421, 2016. DOI: 10.1103/PhysRevB.94.224421.
21. M. Antkowiak, Ł. Kucharski, R. Matysiak, and G. Kamieniarz, “Highly Scalable Quantum Transfer Matrix Simulations of Molecule-Based Nanomagnets on a Parallel IBM BlueGene/P Architecture,” *CMST*, vol. 22, no. 2, 87–93, 2016. DOI: 10.12921/cmst.2016.22.02.003.
22. M. Sobocińska, M. Antkowiak, M. Wojciechowski, G. Kamieniarz, J. Utko, and T. Lis, “New tetranuclear manganese clusters with $[\text{Mn}_3^{\text{II}}\text{Mn}^{\text{III}}]$ and $[\text{Mn}_2^{\text{II}}\text{Mn}_2^{\text{III}}]$ metallic cores exhibiting low and high spin ground state,” *Dalton Trans.*, vol. 45, no. 17, 7303–7311, 2016. DOI: 10.1039/c5dt04869a.
23. M. Antkowiak, W. Florek, and G. Kamieniarz, “Universal Sequence of the Ground States and Energy Level Ordering in Frustrated Antiferromagnetic Rings with a Single Bond Defect,” *Acta Phys. Pol. A*, vol. 131, no. 4, 1, 890–892, 2017, ISSN: 0587-4246. DOI: 10.12693/APhysPolA.131.890.

24. W. Florek, M. Antkowiak, G. Kamieniarz, and K. Jaśniewicz-Pacer, “Highly Degenerated Ground States in Some Rings Modeled by the Ising Spins with Competing Interactions,” *Acta Phys. Pol. A*, vol. 133, no. 3, 411–413, 2018. DOI: 10.12693/APhysPolA.133.411.
25. M. C. Majee, S. M. T. Abtab, D. Mondal, M. Maity, M. Weselski, M. Witwicki, A. Bieńko, M. Antkowiak, G. Kamieniarz, and M. Chaudhury, “Synthesis and magneto-structural studies on a new family of carbonato bridged 3d-4f complexes featuring a $[\text{Co}_3^{\text{II}}\text{Ln}_3^{\text{III}}(\text{CO}_3)]$ (Ln = La, Gd, Tb, Dy and Ho) core: slow magnetic relaxation displayed by the cobalt(II)-dysprosium(III) analogue,” *Dalton Trans.*, vol. 47, no. 10, 3425–3439, 2018. DOI: 10.1039/c7dt04389a.
26. W. Florek, M. Antkowiak, and G. Kamieniarz, “The Kahn degenerate frustration points and the Lieb-Mattis level order in heterometallic wheel molecules with competing interactions,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 487, UNSP 165326, 2019. DOI: 10.1016/j.jmmm.2019.165326.
27. M. Antkowiak, G. Kamieniarz, G. A. Timco, F. Tuna, and R. E. P. Winpenny, “Transferability of the anisotropic spin model coupling parameters in a family of doped chromium-based molecular rings,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 479, 166–169, 2019. DOI: 10.1016/j.jmmm.2019.01.106.
28. M. Antkowiak, G. Kamieniarz, and W. Florek, “Comment on “Magnetostructural correlations in isolated trinuclear iron(III) oxo acetate complexes” by J. Lang, J. M. Hower, J. Meyer, J. Schuchmann, C. van Wullen and G. Niedner-Schatteburg, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, 20, 16673,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 21, no. 1, p. 504, 2019. DOI: 10.1039/c8cp04691c.
29. S. Weissman, M. Antkowiak, B. Brzostowski, G. Kamieniarz, and L. Kronik, “Accurate Magnetic Couplings in Chromium-Based Molecular Rings from Broken-Symmetry Calculations within Density Functional Theory,” *J. Chem. Theory Comput.*, vol. 15, no. 9, 4885–4895, 2019. DOI: 10.1021/acs.jctc.9b00459.
30. W. Florek, A. Marlewski, G. Kamieniarz, and M. Antkowiak, “The Lagrange variety approach applied to frustrated classical wheels,” *Nanosyst.-Phys. Chem. Math.*, vol. 11, no. 1, 30–35, 2020. DOI: 10.17586/2220-8054-2020-11-1-30-35.
31. M. Antkowiak, M. C. Majee, M. Maity, D. Mondal, M. Kaj, M. Lesiów, A. Bieńko, L. Kronik, M. Chaudhury, and G. Kamieniarz, “Generalized Heisenberg-Type Magnetic Phenomena in Coordination Polymers with Nickel-Lanthanide Dinuclear Units,” *J. Phys. Chem. C*, vol. 125, no. 20, 11182–11196, 2021, ISSN: 1932-7447. DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c01947.
32. M. Antkowiak, B. Brzostowski, W. Florek, and G. Kamieniarz, “Metallic core $[\text{Ni}_6^{\text{II}}\text{Cr}^{\text{III}}]$ as an example of centered heterometallic rings displaying quantum effects,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 544, p. 168701, 2022, ISSN: 0304-8853. DOI: 10.1016/j.jmmm.2021.168701.

2.5 Wykaz osiągnięć projektowych, konstrukcyjnych, technologicznych (z zaznaczeniem pozycji wymienionych w pkt 1.3).

Jedno osiągnięcie, wymienione w pkt 1.3.

— po uzyskaniu stopnia doktora

Zaprojektowanie, stworzenie i wdrożenie narzędzia badawczego w postaci autorskiego oprogramowania *clique* do modelowania i symulacji nanomagnetyków molekularnych o dowolnej topografii oddziaływań i wartości spinów z wykorzystaniem metody ścisłej diagonalizacji. Oprogramowanie umożliwia wykonywanie obliczeń równoległych w środowisku komputerów dużej mocy i zostało wdrożone w wielu krajowych i europejskich centrach superkomputerowych. Uzyskane przy pomocy *clique* wyniki zostały wykorzystane w pracach [A1-A9] wymienionych w punkcie 1.2. Program został szczegółowo opisany w publikacji [5] wymienionej w pkt 2.2.

2.6 Wykaz publicznych realizacji dzieł artystycznych (z zaznaczeniem pozycji wymienionych w pkt 1.3).

Nie dotyczy.

2.7 Wykaz wystąpień na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych lub artystycznych, z wyszczególnieniem przedstawionych wykładów na zaproszenie i wykładów plenarnych.

Lista wystąpień została oznaczona według następującego klucza: **(W)** wykład, **(P)** poster, **(Z)** wykład na zaproszenie, **(I)** wykład na zaproszenie w instytucjach naukowych.

— po uzyskaniu stopnia doktora

1. **(P)** *Simulations of molecular nanomagnets with various metallic cores and topologies.* **M. Antkowiak**, B. Brzostowski, S. Weissman, G. Kamieniarz, W. Florek, L. Kronik, G. A. Timco, F. Tuna, R. E. P. Winpenny. The European Conference Physics of Magnetism PM'23, Poznań, 26-30.06.2023.
2. **(I)** *Numerical simulation and modeling of molecular nanomagnets.* **M. Antkowiak**. Wydział Chemii, Uniwersytet w Barcelonie, Hiszpania, dwa wykłady 14.02.2023 i 25.04.2023.
3. **(W)** *Simulations of the magnetic properties of doped chromium-based molecular rings.* **M. Antkowiak**. 14th International Conference on Parallel Processing & Applied Mathematics, Gdańsk, 11-14.09.2022.
4. **(Z)** *Symulacje nanomagnetyków molekularnych o różnych topologiach.* **M. Antkowiak**. XXV Minisymposium Fizyki Statystycznej, Kraków, 4.07.2022.
5. **(Z)** *Simulations of molecular nanomagnets with various metallic cores and topologies.* **M. Antkowiak**, B. Brzostowski. The International Conference Simulations of Functional Materials (SFM'22), Ciężen, 20-22.01.2022
6. **(P)** *Generalized heisenberg-type magnetic phenomena in nickel-lanthanide dinuclear units assembled in coordination polymers by dicyanomide ligands.* **M. Antkowiak**, M. C. Majee, M. Maity, D. Mondal, M. Kaj, M. Lesiów, A. Bieńko, L. Kronik, M. Chaudhury, G. Kamieniarz. The European Conference Physics of Magnetism PM'21, Poznań, 28.06-02.07.2021.

7. **(W)** *clique: a Parallel Tool for the Molecular Nanomagnets Simulation and Modelling.* **M. Antkowiak**, Ł. Kucharski. 13th International Conference on Parallel Processing & Applied Mathematics, Białystok, 8-11.09.2019.
8. **(Z)** *Numerical analysis of magnetic properties of polynuclear molecular clusters.* **M. Antkowiak**. International HPC Summer School on Challenges in Computational Sciences (IHPCSS), Kobe, Japonia, 7-12.07.2019.
9. **(W)** *Parallel Exact Diagonalization Approach to Large Molecular Nanomagnets Modelling.* **M. Antkowiak**. 12th International Conference on Parallel Processing & Applied Mathematics, Lublin, 10-13.09.2017.
10. **(P)** *Sequences of ground states in frustrated rings disturbed by a single bond defect or additional central spin.* **M. Antkowiak**, W. Florek., G. Kamieniarz. The European Conference Physics of Magnetism PM'17, Poznań, 26-30.06.2017.
11. **(P)** *The low and high spin ground states in molecules containing $[Mn_3^{II}Mn^{III}]$ and $[Mn_2^{II}Mn_2^{III}]$ metallic cores.* **M. Antkowiak**, M. Sobocińska, M. Wojciechowski, G. Kamieniarz, J. Utko, T. Lis. The European Conference Physics of Magnetism PM'17, Poznań, 26-30.06.2017.
12. **(W)** *Uniwersalna sekwencja stanów podstawowych i uporządkowanie poziomów energetycznych w sfrustrowanych pierścieniach antyferromagnetycznych z defektem jednego wiązania.* **M. Antkowiak**, G. Kamieniarz, W. Florek. XXI Minisymposium Fizyki Statystycznej, Poznań, 9.12.2016.
13. **(W)** *Universal sequence of ground states in antiferromagnetic frustrated rings with a single bond defect.* **M. Antkowiak**, G. Kamieniarz, W. Florek. CSMAG'16: 16th Czech and Slovak Conference on Magnetism, Koszyce, Słowacja, 13-17.06.2016.
14. **(P)** *The low and high spin ground states in new tetranuclear manganese molecules with $[Mn_3^{II}Mn^{III}]$ and $[Mn_2^{II}Mn_2^{III}]$ metallic cores.* **M. Antkowiak**, M. Sobocińska, M. Wojciechowski, G. Kamieniarz, J. Utko, T. Lis. CSMAG'16: 16th Czech and Slovak Conference on Magnetism, Koszyce, Słowacja, 13-17.06.2016.
15. **(W)** *Genetic algorithm and exact diagonalization approach for molecular nanomagnets modelling.* **M. Antkowiak**, Ł. Kucharski. 11th International Conference on Parallel Processing & Applied Mathematics, Kraków, 6-9.09.2015.
16. **(W)** *Efektywność zrównoleglenia diagonalizacji macierzy w środowisku KDM i jego znaczenie w symulacji magnetyków kwantowych.* **M. Antkowiak**. Konferencja użytkowników KDM, Poznańskie Centrum Superkomputerowo-Sieciowe, Poznań, 11-12.05.2015.
17. **(P)** *Non-uniform coupling model of the Cr_3Ni ring.* **M. Antkowiak**, Ł. Kucharski, G. Kamieniarz. The European Conference Physics of Magnetism PM'14, Poznań, 23-27.06.2014.
18. **(I)** *Analiza numeryczna własności magnetycznych wielocentrowych klastrów molekularnych.* **M. Antkowiak**. Instytut Fizyki Jądrowej PAN, Kraków, 5.11.2013.

— przed uzyskaniem stopnia doktora

19. **(W)** *Simulations of molecular rings*. **M. Antkowiak**. EU-US Summer School on HPC Challenges in Computational Sciences, Dublin, Irlandia, 24-28.06.2012.
20. **(W)** *Analiza numeryczna własności magnetycznych pierścieni zawierających jony chromu*. **M. Antkowiak**. XVII Minisymposium Fizyki Statystycznej, Wrocław, 11.06.2012.
21. **(P)** *Modeling of the experimental molecular chromium-based rings*. **M. Antkowiak**, P. Kozłowski, G. Kamieniarz, F. Tuna, G. A. Timco, R. E. P. Winpenny. CSMAG'10: 14th Czech and Slovak Conference on Magnetism, Koszyce, Słowacja, 6-9.07.2010.
22. **(P)** *Multi-Aspect Modelling and Quantum Effects in Molecular Nanomagnets*. G. Kamieniarz, **M. Antkowiak**, P. Sobczak, T. Ślusarski, D. M. Tomecka, P. Kozłowski, A. Barasiński, A. Drzewiński, J. Kłak, A. Bieńko, J. Mroziński, V. Bellini, F. Troiani, F. Manghi, M. Affronte, A. Olivieri, F. Tuna, G. A. Timco, R. E. P. Winpenny. European Conference on Molecular Magnetism ECMM, Wrocław, 4-7.10.2009.
23. **(P)** *Magnetic Measurements and Modeling of the Anisotropic Molecular-Based Ring Cr₇Cd*. P. Kozłowski, G. Kamieniarz, **M. Antkowiak**, F. Tuna, G. A. Timco, R. E. P. Winpenny. 5th International School and Conference on Spintronics and Quantum Information Technology (Spintech 5), Kraków, 7-11.07.2009.
24. **(W)** *Analiza numeryczna wielocentrowych klastrów molekularnych bazujących na pierścieniu chromu Cr₈*. **M. Antkowiak**. XIV Minisymposium Fizyki Statystycznej, Częstochowa, 15.06.2009.
25. **(W)** *Grid computing applications in modeling and simulations of molecular nanomagnets and classical charged particles*. P. Sobczak, **M. Antkowiak**, P. Kozłowski, G. Musiał, G. Kamieniarz, B. Błaszkiwicz. 4th EGEE User Forum/OGF 25 and OGF Europe's 2nd International Event, Katania, Włochy, 02-06.03.2009.
26. **(W)** *Analysis of chromium and vanadium based molecular rings by non-perturbative simulation techniques*. **M. Antkowiak**, G. Kamieniarz, P. Kozłowski, G. Musiał, W. Florek, M. Haglauer, A. Caramico D'Auria, F. Esposito. ESMolNa 2008: 1st European School on Molecular Nanoscience, Gandia, Hiszpania, 26-31.10.2008.

2.8 Wykaz udziału w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych, z podaniem pełnionej funkcji.

— po uzyskaniu stopnia doktora

1. XXI Minisymposium Fizyki Statystycznej, Poznań, 9.12.2016, członek lokalnego komitetu organizacyjnego
2. The International Conference "Simulations of Functional Materials" (SFM'22), Ciężen, 20-22.01.2022, sekretarz
3. 14th International Conference on Parallel Processing & Applied Mathematics, Gdańsk, 11-14.09.2022, współprzewodniczący 5th Minisymposium of HPC Applications in Physical Sciences

2.9 Wykaz uczestnictwa w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych, z podziałem na projekty zrealizowane i będące w toku realizacji, oraz z uwzględnieniem informacji o pełnionej funkcji w ramach prac zespołów.

Wszystkie wymienione projekty zostały zrealizowane.

— **po uzyskaniu stopnia doktora**

1. Kierownik grantu NCN Miniatura nr 2022/06/X/ST3/00108: „Modelowanie i projektowanie nanomagnetyków molekularnych o określonych właściwościach”
2. Wykonawca w grantie międzywydziałowym (współpraca z Wydziałem Chemii UAM): „Projektowanie materiałów o wysokiej barierze energetycznej w molekularnych kompleksach makrocyclicznych z wbudowanymi jonami ziem rzadkich” (kierownicy: prof. Violetta Patroniak, prof. Grzegorz Kamieniarz)

— **przed uzyskaniem stopnia doktora**

3. Wykonawca w grantie MNiSW nr N519 579138: „Opracowanie wieloaspektowych metod symulacji magnetyków molekularnych i ich implementacja w heterogenicznym środowisku obliczeniowym” (kierownik: prof. Grzegorz Kamieniarz)
4. Wykonawca w grantie MNiSW nr N202 230137: „Wieloaspektowe modelowanie i efekty kwantowe w nanomagnetykach molekularnych” (kierownik: prof. Grzegorz Kamieniarz)
5. Wykonawca w grantie obliczeniowym konsorcjum DEISA: Extreme Computing Initiative (DECI), projekt QUNA - Quantum phenomena in molecular-based nanomagnets
6. Wykonawca w grantach obliczeniowych konsorcjum PRACE: SIMONA, ELORBIC, 2010PA0420 (Prep. Call) oraz projektach realizowanych w Poznańskim Centrum Superkomputerowo-Sieciowym i Centrum Informatycznym Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej
7. Główny wykonawca w grantie promotorskim nr N202 290438: „Analiza numeryczna własności magnetycznych wielocentrowych klastrów molekularnych” (kierownik: prof. Grzegorz Kamieniarz)
8. Wykonawca w grantie europejskim NoE MAGMANet nr NMP3-CT-2005-515767 realizowanym w okresie 1 maja 2005 do 31 października 2009.

2.10 Wykaz członkostwa w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych wraz z informacją o pełnionych funkcjach.

Nie dotyczy.

2.11 Wykaz staży w instytucjach naukowych lub artystycznych, w tym zagranicznych, z podaniem miejsca, terminu, czasu trwania stażu i jego charakteru.**— po uzyskaniu stopnia doktora**

1. 30.01-03.05.2023 (3 miesiące) naukowiec wizytujący na Wydziale Chemii Nieorganicznej Uniwersytetu w Barcelonie, Group of Magnetism and Functional Molecules, kierownik: prof. Guillem Aromí. Staż został zrealizowany dzięki uzyskaniu finansowania w programie Miniatura NCN.
2. 7-12.07.2019 (1 tydzień) mentor na International HPC Summer School 2019, RIKEN CCS, Kobe, Japonia.

— przed uzyskaniem stopnia doktora

3. 27.09-23.12.2011 (3 miesiące) stażysta w Instytucie Fizyki i Chemii Materiałowej w Strasburgu (Uniwersytet w Strasburgu i CNRS - Centre National de la Recherche Scientifique) pod kierunkiem prof. Marca Drillona. Staż został zrealizowany dzięki uzyskaniu stypendium z programu „UAM: Unikatowy Absolwent = Możliwości”.
4. 01.09.2004-16.06.2005 (2 semestry) pobyt na stypendium Erasmus na Wydziale Informatyki Uniwersytetu w Umeå, Szwecja.

2.12 Wykaz członkostwa w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism wraz z informacją o pełnionych funkcjach (np. redaktora naczelnego, przewodniczącego rady naukowej, itp.).

Nie dotyczy

2.13 Wykaz recenzowanych prac naukowych lub artystycznych, w szczególności publikowanych w czasopismach międzynarodowych.**— po uzyskaniu stopnia doktora**

1. International Journal of High Performance Computing Applications - 3 recenzje.
2. Lecture Notes in Computer Science - 2 recenzje.

2.14 Wykaz uczestnictwa w programach europejskich lub innych programach międzynarodowych.**— przed uzyskaniem stopnia doktora**

1. Udział w programie European Doctorate in Molecular Magnetism w ramach współpracy z European Institute of Molecular Magnetism we Florencji.

2.15 Wykaz udziału w zespołach badawczych, realizujących projekty inne niż określone w pkt. 2.9.**— przed uzyskaniem stopnia doktora**

1. Zespół prof. Winpenny'ego z Uniwersytetu w Manchesterze.
2. Zespół prof. Gegenwarta z Instytutu Maxa Plancka w Dreźnie.

— **po uzyskaniu stopnia doktora**

3. Zespół prof. Winpenny'ego z Uniwersytetu w Manchesterze.
4. Zespół prof. Bieńko z Uniwersytetu Wrocławskiego.
5. Zespół prof. Kronika z Instytutu Weizmanna w Rehovot.
6. Prof. Lemański z Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych PAN we Wrocławiu.
7. Zespół prof. Guillema Aromí z Uniwersytetu w Barcelonie.

2.16 Wykaz uczestnictwa w zespołach oceniających wnioski o finansowanie badań, wnioski o przyznanie nagród naukowych, wnioski w innych konkursach mających charakter naukowy lub dydaktyczny.

— **po uzyskaniu stopnia doktora**

1. Członek Krajowej Komisji Konkursowej w XIV edycji konkursu Studencki Nobel 2023 organizowanego przez Niezależne Zrzeszenie Studentów.

3 Współpraca z otoczeniem społecznym i gospodarczym

3.1 Wykaz dorobku technologicznego.

Nie dotyczy.

3.2 Współpraca z sektorem gospodarczym.

— **przed uzyskaniem stopnia doktora**

1. W latach 2006-2007 praca w sektorze komercyjnym na stanowisku programisty.

3.3 Wykaz uzyskanych praw własności przemysłowej, w tym uzyskanych patentów krajowych lub międzynarodowych.

Nie dotyczy.

3.4 Wykaz wdrożonych technologii.

Nie dotyczy.

3.5 Wykaz wykonanych ekspertyz lub innych opracowań wykonanych na zamówienie instytucji publicznych lub przedsiębiorców.

Nie dotyczy.

3.6 Wykaz udziału w zespołach eksperckich lub konkursowych.

Nie dotyczy.

3.7 Wykaz projektów artystycznych realizowanych ze środowiskami pozaartystycznymi.

Nie dotyczy.

4 Dane naukometryczne

Łączna liczba publikacji w czasopismach indeksowanych w bazie WoS lub w wykazie czasopism naukowych MEiN : 32,
w tym przed uzyskaniem stopnia doktora: 9,
po uzyskaniu stopnia doktora: 23.

4.1 Impact Factor oraz punkty MEiN.

W poniższej tabeli przedstawiono wszystkie czasopisma wymienione w częściach 2.2 i 2.4 wraz z liczbą publikacji (l.p.) w danym czasopiśmie, wskaźnikami Impact Factor z bazy WoS oraz punktami z wykazu czasopism naukowych i recenzowanych materiałów z konferencji międzynarodowych z dnia 17.07.2023 MEiN. Ostatni wiersz zawiera sumaryczną wartość IF oraz punktów ministerialnych dla wszystkich publikacji.

czasopismo	l.p.	IF-2022	5-Year IF	pkt. MEiN 2023
Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.	1	11,1	12,0	200
J. Chem. Theory Comput.	1	5,5	5,8	140
Dalton Trans.	2	4,0	3,7	140
J. Phys. Chem. C	1	3,7	3,9	140
Phys. Rev. B	4	3,7	3,6	140
Phys. Chem. Chem. Phys.	1	3,3	3,3	100
J. Magn. Magn. Mater.	3	2,7	2,5	100
Polyhedron	1	2,6	2,2	100
Inorg. Chim. Acta	1	2,8	2,3	70
J. Nanopart. Res.	1	2,5	2,3	70
J. Phys. Soc. Jpn.	1	1,7	1,5	70
Acta Phys. Pol. A	5	0,7	0,7	70
Nanosyst.-Phys. Chem. Math.	1	0,9	0,8	20
Lect. Notes Comput. Sci.	6	—	—	20
CMST	1	—	—	20
EPJ Web of Conferences	2	—	—	—
SUMA	32	68,5	66,9	2540

4.2 Liczba cytowań publikacji wnioskodawcy, z oddzielnym uwzględnieniem autocytowań.

Liczba cytowań według bazy Web of Science: 354 (bez autocytowań: 231)

Liczba cytowań według bazy Google Scholar: 485

4.3 Indeks Hirscha.

Indeks Hirscha według bazy Web of Science: 10

Indeks Hirscha według bazy Google Scholar: 11