



Kraków, 23 kwietnia 2024

dr hab. Robert Pełka, prof. IFJ PAN
Zakład Magnetyzmu Molekularnego (NZ37)
tel. 12 662 8019, 604 466 150
e-mail: robert.pelka@ifj.edu.pl

Ocena rozprawy habilitacyjnej pt.
Modelowanie i symulacje nanomagnetyków molekularnych o różnych topologiach oddziaływań i wartościach spinu
oraz dorobku naukowego dr. Michała Antkowiaka

Przedstawione do oceny osiągnięcie habilitacyjne to cykl dziesięciu artykułów naukowych opublikowanych w latach 2015-2023 przez wydawnictwa American Physical Society (USA), Royal Society of Chemistry (Anglia), Elsevier (Holandia), American Chemical Society Publications (USA) oraz Springer Verlag (Niemcy). Cykl opisuje między innymi wyniki badań numerycznych nanoskopowych układów molekularnych charakteryzujących się znaczną lokalizacją spinu atomowego. Cykl powyższy jest uzupełniony osiągnięciem technologicznym polegającym na opracowaniu oprogramowania służącego do ścisłej diagonalizacji Hamiltonianów definiowanych przez użytkownika oddziaływujących układów spinowych i dopuszczającego różne wartości zmiennych spinowych.

Oceniane publikacje są powiązane tematycznie przez zastosowaną bogatą metodologię badawczą obejmującą ścisłą numeryczną diagonalizację kwantowych Hamiltonianów dostosowanych do kontekstu fizycznego, obliczenia metodami DFT oraz perturbacyjne i numeryczne podejście zastosowane w rozszerzonym wielo-orbitałym modelu Hubbarda. Powyższe techniki obliczeniowe umożliwiają wgląd w kwantową strukturę stanów energetycznych badanych układów, oszacowanie parametrów modeli opisujących oddziaływanie wymienne pomiędzy spinami, oddziaływanie z zewnętrznym polem magnetycznym oraz lokalną anizotropię magnetyczną w oparciu o dane eksperymentalne dla podatności magnetycznej oraz namagnesowania. Szczegółowa znajomość spektrum energetycznego w zależności od konfiguracji oddziaływań wymiennych układu jest niezwykle cennym atrybutem tych badań umożliwiającym racjonalizację fazy projektowej nowych układów molekularnych o pożądanym własnościach fizycznych. Stąd wynika istotna wartość uzyskanych wyników w kontekście aktualnych prac badawczych podejmowanych w ramach magnetyzmu molekularnego.

Zastosowana metodologia badawcza pozwoliła na dokonanie szeregu odkryć naukowych. Analiza antyferromagnetycznych pierścieni z pojedynczym defektem sprzężenia przedstawiona w publikacji [A1] wykazała występowanie uniwersalnego ciągu stanów podstawowych oraz tak zwanego uporządkowania poziomów Lieb-Mattisa. Ponadto, dyskusja efektów frustracji w kontekście dwudzielności oddziaływujących układów spinowych wskazała, że analogiczne uporządkowanie może pojawić się w układach o topologii pierścieni centrowanych. Te ostatnie układy były analizowane w pracach [A2,A5],



INSTYTUT FIZYKI JĄDROWEJ
im. Henryka Niewodniczańskiego
POLSKIEJ AKADEMII NAUK

w których stwierdzono, że pierścienie o niedwudzielnej strukturze oddziaływań dziedziczą konsekwencje twierdzenia Lieba-Mattisa swoich dwudzielnych archetypów. Praca [A3], w której wykonano modelowanie i analizę własności termodynamicznych dwóch czterojonowych klastrów bazujących na jonach manganu: $Mn^{II}_3Mn^{III}$ i $Mn^{II}_2Mn^{III}_2$, dostarczyła eksperymentalnej weryfikacji twierdzenia Lieba-Mattisa. Ciekawym wnioskiem z tych badań jest możliwość istnienia układu opartego na jonach manganu z relatywnie większą przerwą energetyczną oddzielającą stan podstawowy o spinie 1/2 od stanów wzbudzonych, co jest istotne z punktu widzenia technologii konstrukcji kubitów. W pracy [A4], raportującej syntezę grupy związków zawierających jony kobaltu i wybranych lantanowców, wykazano, że sprzężenia pomiędzy jonami metali mają charakter antyferromagnetyczny, z wyjątkiem związku zawierającego gadolin, dla którego w niskich temperaturach potwierdzono obecność sprzężenia ferromagnetycznego. Obliczenia oparte o technikę ścisłej diagonalizacji przedstawione w pracy [A8] pozwoliły na znalezienie najlepszego dopasowania dla temperaturowej zależności podatności magnetycznej i namagnesowania w funkcji zewnętrznego pola magnetycznego i określenie charakteru sprzężenia wymiennego dla kolejnych związków zawierających jony ziem rzadkich oraz jon Ni(II) w postaci łańcuchów koordynacyjnych składających się z dimerów Ni-Ln, gdzie Ln = Eu, Gd, Tb, Dy, Ho. W pracy [A6] znajdziemy kolejny ciekawy przykład modelowania układów kwantowych poprzez bezpośrednie dopasowanie przerw energetycznych pomiędzy kilkoma najniższymi poziomami zaobserwowanymi w eksperymencie EPR dla molekuł pierścieniowych zawierających siedem jonów chromu z jednojonową domieszką kadmu, niklu lub manganu. Uzyskane w ten sposób parametry modelu pozwoliły na ilościowy opis pomiarów magnetycznych. Wykazano przy tym, że model uwzględniający anizotropię wymienną oraz anizotropię lokalną jest wystarczający do opisu widm energetycznych EPR i INS molekuł z rodziny Cr₈. Kolejna praca [A7] zawiera wyniki obliczeń metodą DFT dla związków z tej samej rodziny. Wyznaczenie widm energetycznych i przebiegu temperaturowej zależności podatności magnetycznej w oparciu o całki wymiany otrzymane z rachunków DFT potwierdziło adekwatność tej metody w obliczaniu parametrów sprzężeń magnetycznych. Praca [A9] prezentuje wyniki modelowania metodami DFT oraz techniką ścisłej diagonalizacji centrowanego układu pierścieniowego składającego się z sześciu jonów niklu oraz jednego centralnie położonego jonu chromu. Pokazano przy tym, że w pierścieniach sfrustrowanych i niesfrustrowanych można znaleźć taki sam kształt krzywej podatności w funkcji temperatury, co powoduje, że nie jest on jednoznaczną sygnaturą konfiguracji oddziaływań wymiennych w łańcuchu. Odkryto również, że odpowiednik tego łańcucha z antyferromagnetycznym sprzężeniem pomiędzy jonami niklu wykazuje schodkową strukturę spinu stanu podstawowego w funkcji stosunku wartości sprzężeń, co jest przejawem działania twierdzenia Lieba-Mattisa. W końcu, w pracy [A10] w oparciu o rozszerzony wielo-orbitalny model Hubbarda uwzględniający kulombowskie odpychanie się elektronów zlokalizowanych na sąsiednich jonach jak również skorelowane przeskoki elektronów wykazano, że wpływ tych procesów mikroskopowych na stałą wymiany jest odwrotny, tj. bezpośrednio odpychanie kulomba powoduje wzmocnienie, podczas gdy efekt skorelowanych przeskoku elektronowych osłabia antyferromagnetyczne sprzężenie jonów. Zasługującym na wzmiankę aspektem tej pracy jest to, że dzięki optymalizacji algorytmów oraz mapowaniu elementów niezerowych macierzy uzyskano skrócenie czasu obliczeń o dwa rzędy wielkości.



Oceniane osiągnięcie jest efektem współpracy oraz pracy samodzielnej, w której ekspercki wkład dr. Michała Antkowiaka polega na doskonałym opanowaniu warsztatu teoretycznego i numerycznego, zaawansowanej analizie danych, wnikliwej interpretacji uzyskanych wyników i opracowaniu redakcyjnym niektórych manuskryptów. W oparciu o treść oświadczeń Kandydata oraz oświadczeń współautorów można z całą pewnością stwierdzić, że Kandydat brał kluczowy udział w tworzeniu koncepcji tych prac oraz sformułowaniu zawartych w nich problemów badawczych a, co najważniejsze, wykonał wszystkie obliczenia numeryczne, prawdopodobnie poza tymi przeprowadzonymi metodą DFT, oraz wszystkie dopasowania symulacji opartych na modelach mikroskopowych do danych eksperymentalnych.

Wszystkie artykuły z ocenianego cyklu zostały opublikowane w dobrych i bardzo dobrych czasopismach z zakresu fizyki fazy skondensowanej oraz metod numerycznych. Ich długookresowe współczynniki wpływu (IF) zawierają się w przedziale 2.5 – 5.8. Są to *Physical Review B* [A1, A2], *Dalton Transactions* [A3, A4], *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* [A5, A6, A9], *Journal of Chemical Theory and Computation* [A7], *Journal of Physical Chemistry C* [A8], *Lecture Notes in Computer Science* [A10]. Wśród opublikowanych prac wszystkie są wieloautorskie, a w trzech dr. Michał Antkowiak jest pierwszym autorem. Jedna praca [A7] została opublikowana w czasopiśmie o wysokim czynniku wpływu (IF=5.8).

Ukoronowaniem cyklu habilitacyjnego jest osiągnięcie technologiczne, wykonane w całości przez Habilitanta, polegające na zaprojektowaniu, stworzeniu i wdrożeniu narzędzia badawczego w postaci oprogramowania *clique* dedykowanego modelowaniu i symulacji nanomagnetyków molekularnych o dowolnych wartościach spinów i definiowalnej konfiguracji oddziaływań, opartego na metodzie ścisłej diagonalizacji. Algorytmy wchodzące w skład oprogramowania zostały zoptymalizowane a obliczenia zostały zrównoleglone i dostosowane do środowiska komputerów dużej mocy. Oprogramowanie *clique* zostało wdrożone w wielu krajowych i europejskich centrach superkomputerowych a wyniki przy jego pomocy uzyskane zostały wykorzystane w publikacjach cyklu.

Wobec powyższego wartość naukową przedstawionego do oceny osiągnięcia oceniam bardzo wysoko. Ponadto, w mojej opinii, osiągnięcie to stanowi znaczny wkład w rozwój nauk fizycznych, w ogólności, i magnetyzmu molekularnego, w szczególności.

Dorobek naukowy Habilitanta tworzą dwadzieścia sześć publikacji naukowych w piętnastu różnych czasopismach, z których trzynaście znajduje się w bazie *Journal Citation Reports* (JCR). Długookresowe czynniki wpływu (IF) tych czasopism zawierają się w szerokim przedziale 0.7 – 12.0. Przeciętny czynnik wpływu charakteryzujący pojedynczą publikację wynosi 2.909. Rozkład statystyczny publikacji charakteryzuje się odchyleniem standardowym dla czynnika wpływu równym 2.358 i wykazuje znaczną dodatnią skośność (= 2.529). Spośród opublikowanych prac w dziesięciu dr. Michał Antkowiak jest pierwszym autorem. Ponadto, Habilitant jest współautorem, w tym trzykrotnie pierwszym autorem, sześciu rozdziałów w monografiach naukowych pt. *Parallel Processing and Applied Mathematics*. *Lecture Notes in Computer Science*. Na dzień sporządzenia opinii prace Kandydata były cytowane 373 razy (w tym 242 razy pomijając autocytowania). Indeks Hirscha, charakteryzujący cały publikacyjny dorobek naukowy, wynosi $H = 10$ (według bazy *Web of Science*). Przeciętna liczba cytowań przypadająca na pojedynczą publikację jest przy tym



INSTYTUT FIZYKI JĄDROWEJ
im. Henryka Niewodniczańskiego
POLSKIEJ AKADEMII NAUK

niewieksza i wynosi 12.03. Jedną publikacją, w której Habilitant jest współautorem, ukazała się w prestiżowym czasopiśmie *Proceedings of National Academy of Sciences USA*. Kolejne cztery publikacje znajdziemy w czołowym czasopiśmie dedykowanym problemom fizyki fazy skondensowanej *Physical Review B*. Podsumowując uważam, że dorobek publikacyjny dr. Michała Antkowiaka jest ponadprzeciętny, tym bardziej, że pierwsza publikacja jego współautorstwa ukazała się w 2008 roku. Habilitant z powodzeniem wypracowuje nowe wyniki w ramach swoich zainteresowań naukowych, o czym świadczy kolejny artykuł, będący rozszerzeniem pracy [A10], opublikowany w czasopiśmie *Concurrency and Computation: Practice and Experience* (WILEY, USA, IF = 1.7).

Dr Michał Antkowiak uczestniczył w realizacji ośmiu projektów badawczych, w tym był kierownikiem grantu NCN Miniatura, głównym wykonawcą w grantie promotorskim oraz wykonawcą w grantie europejskim NoE MAGMANet, dwóch grantów MNiSW i dwóch grantów obliczeniowych konsorcjum DEISA i PRACE. Habilitant wygłosił piętnaście referatów na konferencjach o zasięgu międzynarodowym (dziesięć) i krajowym (pięć), w tym trzy referaty na zaproszenie. Zaprezentował również dziewięć plakatów na konferencjach o zasięgu międzynarodowym. Ponadto, wygłosił trzy referaty na zaproszenie w instytucjach zagranicznych (dwa) i krajowych (jeden). Dr Michał Antkowiak jest stypendystą programu Socrates-Erasmus (Wydział Informatyki Uniwersytetu Umeå, Szwecja), odbył dwa trzymiesięczne staże naukowe w Instytucie Fizyki i Chemii Materiałowej w Strasburgu pod kierunkiem prof. Marca Drillona (przed doktoratem) oraz na Wydziale Chemii Nieorganicznej Uniwersytetu w Barcelonie pod kierownictwem prof. Guillem Aromí (po doktoracie). Ponadto, pełnił rolę mentora na warsztatach *International High Performance Computing Summer School 2019* w Kobe, Japonia. Habilitant nawiązał udokumentowaną współpracę z zespołami prof. Leora'a Kronik'a z *Weizmann Institute of Science* (Izrael), prof. Richard'a Winpenney'ego z Uniwersytetu Manchester (Wielka Brytania), prof. Philipp'a Gegenwart'a z *Max Planck Institute for Chemical Physics of Solids* (Drezno, Niemcy), prof. dr hab. Aliny Bieńko z Uniwersytetu Wrocławskiego oraz prof. dr hab. Romualda Lemańskiego z Instytutu Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych im. Włodzimierza Trzebiatowskiego PAN. Na podkreślenie zasługuje fakt, że dr Michał Antkowiak uzyskał dyplom doktora w 2013 r. w programie *European Doctorate in Molecular Magnetism* w ramach współpracy z *European Institute of Molecular Magnetism* we Florencji.

Wobec powyższego, można stwierdzić, że Habilitant wykazał się istotną aktywnością naukową realizowaną w więcej niż jednej uczelni lub instytucji naukowej, w szczególności zagranicznej.

Wśród wyróżnień za działalność naukową na szczególną uwagę zasługują Nagrody Rektora Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu (2010 i 2012 r.) oraz bycie stypendystą projektu MAGMANet. Należy również wspomnieć o trzecim miejscu zajętym w ramach konkursu *CUDA Challenge* na konferencji *11th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics PPAM'15* (Kraków). Kandydat prowadził liczne zajęcia (wykłady, ćwiczenia rachunkowe i laboratoryjne) na Wydziałach: Fizyki, Chemii, Matematyki i Informatyki, Nauk Geograficznych i Geologicznych UAM, w tym w języku angielskim dla studentów zagranicznych. Brał udział w opracowywaniu sylabusów. Pełnił rolę promotora pomocniczego w przewodzie doktorskim. Był opiekunem jednej pracy magisterskiej. Jest członkiem Rady Naukowej Dyscyplin Nauki Fizyczne i Astronomia wyłonionym wśród nauczycieli akademickich posiadających stopień doktora z najwyższym



INSTYTUT FIZYKI JĄDROWEJ
im. Henryka Niewodniczańskiego
POLSKIEJ AKADEMII NAUK

wskaźnikiem efektywności naukowej. Był administratorem klastra obliczeniowego wchodzącego w skład *LHC Computing Grid* oraz prezentował lokalny klaster obliczeniowy w ramach cyklicznych Wykładów Otwartych organizowanych na Wydziale Fizyki UAM. Wygłaszał referaty popularnonaukowe i współpracował przy organizacji wydarzeń popularyzujących naukę. Prowadził zajęcia dla uczniów liceów w ramach klas akademickich.

Zarówno przedstawione osiągnięcie naukowe i technologiczne, aktywność naukową wychodzącą poza ramy macierzystej uczelni, jak i całość dotychczasowego dorobku naukowo-badawczego, dydaktycznego, organizacyjnego i popularyzatorskiego dr. Michała Antkowiaka oceniam bardzo wysoko. **Stwierdzam, że Habilitant zawiązka spełnia kryteria wymagane dla wniosku o nadanie stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne zgodnie z obowiązującą Ustawą z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2023 r. poz. 742 t.j. ze zm.).**