

dr hab. Jan Łażewski
profesor IFJ PAN
Instytut Fizyki Jądrowej
Polska Akademia Nauk

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr inż. Gabriela Kuderowicza
pt. *„Badanie oddziaływania elektron-fonon i nadprzewodnictwa
w wybranych materiałach metodami ab initio”*

Przed kilkoma miesiącami obchodziliśmy 110 rocznicę otrzymania nagrody Nobla przez Heike'a Kamerlingha Onnesa z Uniwersytetu Lejdejskiego *„za jego badania dotyczące właściwości materii w niskich temperaturach, które doprowadziły, między innymi, do wytworzenia ciekłego helu”*. W istocie Onnes dostał tę prestiżową nagrodę za odkrycie zjawiska nadprzewodnictwa, które zaobserwował po raz pierwszy 8 kwietnia 1911 roku w – schłodzonej do temperatury ciekłego helu – rtęci. Zjawisko to, ze względu na swoje niezwykle implikacje i bardzo szerokie zastosowania, jest przedmiotem badań wielu wybitnych fizyków od ponad 100 lat. I choć w połowie XX wieku, po opublikowaniu teorii BCS, wydawało się, że wyjaśniony został ostatecznie mechanizm nadprzewodnictwa i odkrycie nadprzewodników wysokotemperaturowych jest tylko kwestią czasu, nadal konieczne są i pożądane dalsze badania w tej dziedzinie. W ostatnich latach gwałtowny rozwój metod obliczeniowych opartych na teorii funkcjonału gęstości otworzył nowe możliwości opisu z pierwszych zasad, czyli bez korzystania z danych eksperymentalnych, również własności i zjawisk związanych z nadprzewodnictwem. Prace pana magistra inżyniera Gabriela Kuderowicza i przygotowana na ich podstawie dysertacja doktorska bardzo dobrze wpisują się w główny nurt tych badań.

Pod względem metody badawczej, strategię przyjętą przez mgr inż. Kuderowicza można nazwać modelowaniem numerycznym lub symulacjami komputerowymi i leży ona na styku fizyki doświadczalnej i teoretycznej. Nie przeprowadza on zatem swoich eksperymentów w laboratorium ani też nie tworzy nowych teorii dla opisu badanych materiałów. Korzystając z gotowych wzorów, a często nawet komercyjnych programów opartych o znane teorie, wylicza bogate spektrum własności fizycznych, operując na zbudowanych przez siebie modelach interesujących go układów. Z pozoru mogłoby się wydawać, że wykonana praca była mało skomplikowana: wystarczyło połączyć ze sobą parę gotowych schematów i uruchomić kilka dostępnych programów, a otrzymane wyniki zebrać w tabelach i na rysunkach. Nic bardziej mylnego. Samo zbudowanie pojedynczego modelu wiązało się z dobraniem kilkunastu parametrów startowych, sprawdzeniem ich zbieżności i w końcu zoptymalizowaniem struktury krystalicznej w ramach wybranej symetrii. Wyliczając konkretne własności, trzeba było dobrać odpowiednią dla danego układu metodę, czasem kilka, by krytycznie zestawić ze sobą otrzymane wyniki. Niekiedy konieczne było zbalansowanie jakości czy wręcz sensowności wyniku z wykonalnością symulacji w określonym czasie, biorąc pod uwagę ograniczenia dostępnej infrastruktury obliczeniowej. W niektórych przypadkach właśnie te ograniczenia stanowiły główny powód zaprzestania badań czy odłożenia ich do czasu uzyskania dostępu do szybszych i lepiej wyposażonych maszyn obliczeniowych. Doktorant, prowadząc z powodzeniem swoje badania, wykazał się bardzo dobrą znajomością teorii, na których oparte są jego obliczenia, doświadczeniem w obsłudze kilku najbardziej rozpowszechnionych pakietów do rachunków z pierwszych zasad (*Quantum Espresso, Wien2k, VASP*), jak również pomysłowością w rozwiązywaniu problemów fizycznych i technicznych, które napotkał po drodze. W warsztacie pracy doktoranta należy docenić również fakt, iż w sytuacjach gdy nie udaje mu się osiągnąć zamierzonego celu, umie otwarcie się do tego przyznać i zarysować strategię ewentualnych dalszych poszukiwań. Nie bez znaczenia dla osiągniętych wyników jest zespół, w jakim powstała przedmiotowa praca. Szerokie spektrum znakomitych specjalistów (włączając promotora pracy) posiadających rozległe kontakty naukowe na całym świecie, jak również konieczna infrastruktura i oprogramowanie (zakupione i własne) pozwalające prowadzić badania na najwyższym światowym poziomie, stanowiły swoistą trampolinę, z której doktorant umiejętnie skorzystał.

Przedłożona do recenzji dysertacja, licząca 163 strony, składa się ze *Wstępu*, ośmiu rozdziałów pogrupowanych w dwie główne części (*Wprowadzenie teoretyczne* oraz *Wyniki obliczeń*), czterech *Dodatków* zebranych w części III oraz *Bibliografii*, zawierającej 273 odnośniki literaturowe. Część I poprzedza *Wykaz oznaczeń* użytych w pracy, zaś cz. II została zwieńczona *Podsumowaniem rozprawy*.

Wprowadzenie teoretyczne zawiera w pierwszym rozdziale krótki opis teorii funkcjonału gęstości (DFT) przytaczający oba twierdzenia Hohenberga-Kohna i ogólną postać równań Kohna-Shama. Następnie autor szerzej komentuje człon wymiennie-korelacyjny i poprawki relatywistyczne uwzględniane w rachunkach. W kolejnym rozdziale (2), poświęconym obliczeniom struktury elektronowej, znajduje się opis koniecznych przybliżeń standardowo stosowanych w DFT takich jak twierdzenie Blocha, metoda fal płaskich, czy przybliżenie pseudopotencjału. Rozdział 3 zawiera wprowadzenie do dynamiki sieci krystalicznej i sprzężenia elektron-fonon. Zostają przedstawione metody wyznaczania relacji dyspersji fononów: metoda odpowiedzi liniowej (*linear response*) oraz tzw. metoda bezpośrednia (*direct method*) oparta na znalezieniu stałych siłowych. W ostatnim rozdziale (4) pierwszej części otrzymujemy dużą dawkę informacji (13 stron) o sposobach wyliczania parametrów charakteryzujących własności nadprzewodzące materiałów. Znajdziemy tu opis teorii BCS, wzory na temperaturę krytyczną i przerwę nadprzewodzącą oraz sposoby wyznaczania stałej sprzężenia elektron-fonon. Cała część teoretyczna jest napisana przystępnym językiem, wystarczająco szczegółowo, aby dać możliwość zrozumienia idei, i – co bardzo cenne – z podaniem odpowiednich odnośników literaturowych do najważniejszych publikacji w temacie.

Część II zawiera oryginalne wyniki uzyskane przez doktoranta. W czterech kolejnych rozdziałach zostały opisane własności elektronowe, dynamiczne i nadprzewodzące badanych materiałów:

- (i) dwóch związków Heuslera (MgPd_2Sb i LiGa_2Ir) o umiarkowanej sile sprzężenia elektron-fonon (rozd. 5);
- (ii) trzech związków Heuslera z rodziny LiPd_2X ($\text{X}=\text{Si, Ge, Sn}$) o słabym sprzężeniu λ (rozd. 6);
- (iii) silnie sprzężonego związku Heuslera ScAu_2Al (rozd. 7);
- (iv) dwóch półprzewodników domieszkowanych rezonansowo, $\text{Pb}_{1-x}\text{Tl}_x\text{Te}$ i $\text{Sn}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}$ (rozd. 8).

Dla każdego przypadku:

- zbudowano model i zoptymalizowano jego strukturę krystaliczną w odpowiedniej symetrii, dobierając pseudopotencjały, czasem wypróbując i porównując wyniki dla kilku różnych;
- wyliczono strukturę pasmową i omówiono gęstość stanów wokół poziomu Fermiego; dodatkowo dla związków Heuslera zilustrowano powierzchnię Fermiego;
- wyznaczono relacje dyspersji fononów i widmo gęstości stanów fononowych z rozbięciem na wkłady atomowe;
- sprawdzono wpływ oddziaływania spin-orbita na strukturę i inne omawiane własności;
- w strukturach niestabilnych dynamicznie przedyskutowano obecność miękkich modów i zbadano możliwości stabilizacji struktury;
- określono siłę oddziaływania elektron-fonon i wyrysowano funkcję Eliashberga;
- wyliczono podstawowe wielkości opisujące stan nadprzewodzący, tj. stałą sprzężenia λ , temperaturę krytyczną T_c , parametr Sommerfelda γ ;
- wybrane z otrzymanych wielkości porównano z dostępnymi danymi literaturowymi.

Za najważniejsze osiągnięcia pracy uważam:

- dla MgPd_2Sb i LiGa_2Ir :
 - bardzo precyzyjne odtworzenie temperatury krytycznej T_c dla obu materiałów, odpowiednio 2.16 K i 3.57 K;
 - potwierdzenie eksperymentalnej zależności T_c od ciśnienia, $\Delta T_c / p$, odpowiednio -0.27 K/GPa i -0.05 K/GPa;
- dla rodziny LiPd_2X ($\text{X}=\text{Si, Ge, Sn}$) :
 - przewidywanie nadprzewodnictwa w LiPd_2Si potwierdzonego później eksperymentalnie;
- dla ScAu_2Al :
 - wykonanie pionierskich obliczeń *ab initio* uwzględniających łamanie symetrii w nadprzewodniku (SC DFT) i wyznaczenie temperatury krytycznej $T_c = 5.16$ K;

- dla półprzewodników domieszkowanych rezonansowo :
 - uzyskanie stabilnej struktury i widma fononowego modeli z domieszką;
 - wykonanie rachunków perturbacyjnych (DFPT) dla superkomórki $\text{Sn}_{31}\text{In}_1\text{Te}_{32}$.

Na uwagę zasługuje również fakt, iż wyniki opisane w dysertacji zostały zaprezentowane na wielu konferencjach międzynarodowych i krajowych (ogółem 10 wystąpień) oraz częściowo opublikowane w prestiżowych czasopismach fizycznych o zasięgu międzynarodowym (*Scientific Reports* i *Physical Review B* ×3) w formie czterech artykułów, których mgr inż. Gabriel Kuderowicz jest jednym z głównych autorów (trzykrotnie drugi i raz pierwszy na liście autorów).

Do głównych mankamentów pracy moim zdaniem należą:

1. Brak jasno określonego celu pracy. Powtarzające się stwierdzenie, zawarte również w tytule, „badanie” jest moim zdaniem zbyt ogólne. Już samo zainicjowanie rachunków można by uznać za zrealizowanie tak postawionego celu pracy.
2. Niezdefiniowanie przestrzeni odwrotnych dla rozważanych symetrii, w których wykonano znaczną część rachunków, a których punkty charakterystyczne i punkty wysokiej symetrii są wymieniane na wszystkich rysunkach dotyczących elektronowych jak i fononowych relacji dyspersji. Można to było osiągnąć, prezentując schematy pierwszych stref Brillouina z zaznaczeniem wykorzystywanych punktów specjalnych.
3. Niezrozumienie pojęcia modów normalnych przy badaniu niestabilności struktury. Rozwijając energię kryształu w przybliżeniu harmonicznym wokół współrzędnych normalnych, oprócz energii podstawowej, otrzymujemy wyrazy będące iloczynem kwadratu amplitudy wychylenia i kwadratu częstości poszczególnych drgań normalnych. Dlatego w stabilnej strukturze wzbudzenie jakiegokolwiek drgania podnosi energię układu. Miękki mod, ze względu na urojoną częstość drgań, obniża energię układu, prowadząc do bardziej stabilnej struktury. Dlatego przy badaniu miękkiego modu nie należało badać (zresztą niefizycznych) wychyleń pojedynczych atomów z położenia równowagi, ale wychylenia kolektywne zdefiniowane wektorem polaryzacji miękkiego modu.
4. Wykonanie rachunków w źle zdefiniowanej superkomórce przy próbie stabilizacji miękkiego drgania. „Gładkie” krzywe dyspersji fononów są wynikiem interpolacji pomiędzy punktami dokładnymi. W superkomórce $1 \times 1 \times 1$ możemy dokładnie wyznaczyć częstości jedynie w centrum strefy Brillouina. Dla punktu symetrii na granicy strefy trzeba użyć superkomórki podwojonej w odpowiednim kierunku w przestrzeni prostej. Natomiast do badania drgania o wektorze falowym $(1/3, 1/3, 0)$ konieczna jest superkomórka $6 \times 6 \times N$, gdzie N może być równe 1. Dlatego wszystkie próby poszukiwania stabilnej struktury podjęte przez doktoranta w rozdziale 6 przy użyciu mniejszych komórek nie przyniosły spodziewanych rezultatów.
5. Błędny kierunek na osi ciśnienia w poszukiwaniu przejścia fazowego. W znakomitej większości materiałów obserwuje się dodatnią rozszerzalność cieplną, czyli, że pod wpływem temperatury materia się rozszerza. Oznacza to, że wraz ze wzrostem energii zwiększa się objętość. Dodatkowo w wyższych temperaturach dochodzą do głosu fluktuacje, powodując uśrednianie struktury. Tak więc kondensacja miękkiego modu (przejście ciągłe do struktury o niższej symetrii) zachodzi zwykle przy rosnącym ciśnieniu. Poszukując natomiast stabilnej struktury wysokosymetrycznej, należało przyjąć kierunek przeciwny, czyli przyłożyć ujemne ciśnienie, które może być interpretowane jako wzrost temperatury.
6. Słaba dyskusja błędów często wręcz pominięcie tematu dokładności wyników. Podawanie jakiegokolwiek rezultatu liczbowego ma sens wyłącznie w połączeniu z informacją o precyzji metody jego otrzymania. W przeciwnym razie mrówka waży tyle samo co słoń, a bakteria może mieć rozmiar kuli ziemskiej. Dbając o jakość przekazu, należałoby określić oczekiwaną dokładność. Spodziewam się, że stałe struktury krystalicznej w DFT zostały wyznaczone z dokładnością pojedynczych procent; częstości fononów poniżej 10%, ... A pozostałe wielkości?
7. Wykorzystanie rysunków (*in extenso*) z własnych prac opublikowanych w zespole. Takie „zapożyczenie” niepotrzebnie poddaje w wątpliwość samodzielność wykonania pracy doktorskiej. Skoro dysertacja stanowi oddzielne i samodzielne dzieło, lepiej było stworzyć dedykowane dla niej rysunki.
8. Niekompletny wykaz oznaczeń na str. 3.

Oprócz powyższych zastrzeżeń mam jeszcze kilka pytań dotyczących przedstawionych wyników:

1. Jak rozumieć zmiany w widmie fononowym LiGa_2Ir wywołane uwzględnieniem SOC? Dlaczego najsilniejszy efekt jest widoczny na atomach Ga? Jaki jest lokalny moment magnetyczny na poszczególnych rodzajach atomów?
2. Dlaczego na rysunku 8.10 [panele (d) i (f)] nie widać wkładu od miękkich modów wyraźnie widocznych na wykresach relacji dyspersji fononów?
3. Jak duże (mierzone we współrzędnych względnych) przesunięcia atomów spowodowała relaksacja układów domieszkowanych rezonansowo? O ile eV/atom zmieniła się energia całkowita? Czy nie należało się spodziewać, że układy niezrelaksowane okażą się niestabilne?
4. Czy punkty na rysunku 8.20(b) nie lepiej dopasować wielomianem wyższego stopnia, np. czwartego, i porównywać ze sobą współczynniki przy wyrazie kwadratowym? W zaprezentowanym rozwiązaniu decydującą o kształcie fitu rolę mają punkty na „skrzydłach”, których jest niewiele.

Pod względem redakcyjnym, praca jest napisana poprawną polszczyzną, choć niestety zawiera wiele błędów językowych, interpunkcyjnych i edytorskich. Listę znalezionych przeze mnie tego typu mankamentów (na pewno daleką od kompletności) zawarłem w postaci oddzielnego załącznika. Rysunki, których w rozprawie jest aż 82, zostały starannie przygotowane i czytelnie opisane. Mam w tej mierze jedynie kilka drobnych zastrzeżeń. Na rysunkach 5.13 (str. 55) i 5.14 (str. 56) opis paneli jest niezgodny z podpisem i cytowaniami w tekście. Zastanawiającym jest również dlaczego na rys. 6.5 (str. 64) zakres prędkości Fermiego przy skali kolorów jest zupełnie różny od tego podanego w publikacji. W dysertacji można też było trochę lepiej rozmieścić niektóre tabele i rysunki. Kilka z nich jest przesuniętych względem opisującego je tekstu nawet o dwie strony.

Podsumowując stwierdzam, że opisane w mojej recenzji niedociągnięcia nie wypaczają głównych osiągnięć doktoranta a przedstawiona do recenzji praca pt. „*Badanie oddziaływania elektron-fonon i nadprzewodnictwa w wybranych materiałach metodami ab initio*” zawiera wiele nowych, ważnych wyników i w pełni spełnia wymogi stawiane rozprawom doktorskim określone w artykule 187 ustawy Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce z dnia 20 lipca 2018 roku (Dziennik Ustaw z 2021 roku, poz. 478), dlatego wnoszę o dopuszczenie jej autora, magistra inżyniera Gabriela Kuderowicza, do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Jan Łazewski

Kraków, 9. lutego 2024 r.

Błędy edytorskie – załącznik do recenzji

(strona, linia): „jest” – powinno być

- (1,11), (31,9), (36,10), (36,22), (36,26), (39,21), (82,27), (97,19), (97,20), (114,11): „zasad pierwszych” – pierwszych zasad
- (1,30): „mody fononowe ..., które stają się urojone” – mody fononowe ..., których częstości mają wartości urojone
- (3,15): „sprzężenia” – sprzężenie
- (6,28): „ r_1 ” – r
- (7,29), (38,5): „Hartreego” – Hartree’ego
- (9,7): „no” – na
- (14,13): „właściwości” – własności
- (15,4): „dla a analizy” – dla analizy
- (15,14): „przekształcenia” – przekształceniach
- (15,26): „Furiera dla której” – Furiera, dla której
- (16,5): „metoda w której” – metoda, w której
- (17,12): „można jest” – można
- (17,26): „wymaga zbyt dużo wyrazów” – wymaga zbyt wielu wyrazów
- (18,16), (73,28), (111,15): „ab initio” – *ab initio*
- (20,3): „wymagających” – wymagający
- (20,4): „rozpatruję się” – rozpatruje się
- (20,14): „rozdziela funkcję falową” – rozdziela funkcje falowe
- (21,16 i 20): „Hellmana” – Hellmanna
- (27,6): „czystko” – czysto
- (28,21): „fermionów¹” – fermionów¹
- (32,31): „pierwiastek masy” – pierwiastek z masy
- (33,25): „z częstością” – po częstości
- (34,5): „częstości²” – częstości²
- (34,18): „l-tego” – l-tego
- (36,9): „Licząc temperaturę” – Wyliczając/Wyznaczając temperaturę
- (38,16): „cząstek $u_i(\mathbf{r})$ i dziur $u_i(\mathbf{r})$ ” – cząstek $u_i(\mathbf{r})$ i dziur $v_i(\mathbf{r})$
- (41,19): „ścienne” – ściennie
- (41,22): „bloku p” – bloku p
- (43,10): „występowanie” – występowaniu
- (43,11-13): w LiPd_2Ga „próbowano zastąpić pallad rodem ... znaleziono ... LiGa_2Rh ” ??? Raczej LiRh_2Ga
- (44, rys.5.2e), (46, rys.5.3f): „P” – p
- (46,9), (62,34), (89,2): „elektron fonon” – elektron-fonon
- (50,19): „Thz” – THz
- (51,1): „THz³” – THz.³
- (51,6): „siłowe⁴” – siłowe⁴
- (52,4): „strukturę strukturę” – strukturę
- (52,16): „zwiększone” – zwiększenie
- (54,26): „ MgPd_2Sb i LiGa_2Ir ” – MgPd_2Sb i LiGa_2Ir
- (55,18): „ MgPd_2sb ” – MgPd_2Sb
- (55,21): „rysunku 5.13(c-e)” na rysunku brak takich paneli
- (56,6): „GPa/K” – K/GPa
- (57,8): „ $\angle \omega^2$ ” – $\langle \omega^2 \rangle$
- (60,18): „rys 6.1” – rys. 6.1
- (60,22): „elektronowa gęstości” – elektronowej gęstości
- (62,5): „nadprzewodzący nadprzewodzący” – nadprzewodzący
- (62,9), (62,36): „ LiPd_2Ge ” – LiPd_2Ge
- (62,23): „ LiPd_2X ” – LiPd_2X
- (62,24): „i będzie dawał” – i każdy będzie dawał

- (63,9): „ C/T ” – C_p/T
- (66,13): „ LiPd_2Ge ” – LiPd_2Ge
- (67,eq.6.4): „ C_v ” – C_v
- (71,15): „stosunkowo większa” – stosunkowo większy
- (72,13): „nie są niespotykane” – występują
- (72,23): „ $\text{Lu}(\text{Pt}_{1-x}\text{Pd}_x)_2\text{In}$ ” – $\text{Lu}(\text{Pt}_{1-x}\text{Pd}_x)_2\text{In}$
- (73,21): „harmonicznych” – anharmonicznych
- (73,22): „staną rzeczywiste” – staną się rzeczywiste
- (73,31): „ciśnienie 4 ” – ciśnienie⁴
- (79,12): „ j -tego atomu w l -tej” – j -tego atomu w l -tej
- (81,2): „Rysunek przedstawia 6.23 fononową relację” – Rysunek 6.23 przedstawia fononowe relacje dyspersji
- (82,9): „z reguła Matthiasa” – z regułą Matthiasa
- (82,15): „w rodzinie Heuslerów” – w rodzinie związków Heuslera
- (84,11): „ KOe ” – kOe
- (84,12): „na rys. 7.2” – na rys. 7.2(d)
- (86,5): „Porównanie elektronowa relacja” – Porównanie elektronowej relacji
- (86,17): „nadprzewodnictwa” – nadprzewodnictwo
- (87,24): „brak zagięcie” – brak zakrzywienia
- (93,4): „rys. 7.13(b), a w kierunku ... na rys. 7.13(c)” – rys. 7.13(c), a w kierunku ... na rys. 7.13(d)
- (93,15): „zob. równanie” – zob. równania
- (96,18): „elektronowego ciepła elektronowego” – elektronowego ciepła właściwego
- (96,35): „niskiej częstości” – niskiej średniej częstości
- (97,7): „renormalizowana” – renormalizowany
- (97,29): „zachowanie zachowanie” – zachowanie
- (99,10): „podobna wartość” – podobną wartość
- (100,2): „szerokość pasm elektronowych, równą 10 eV^2 ” – szerokość pasm elektronowych,² równą 10 eV
- (100,12): „zależność średniej wartości przerwy nadprzewodzącej dla pasm b_1 i b_2 , obliczonych z SOC” –
zależność średniej wartości przerwy nadprzewodzącej obliczonej z SOC dla pasm b_1 i b_2
- (100,31): „SF” – FS
- (100,35): „energii dno pasm” – energii dna pasm ??
- (104,8): „tomach” – atomach
- (106,9 i 16): „Nomoto et al.” - Nomoto *et al.*
- (106,11): „ s -wave” – s -wave
- (106,13): „ p -wave” – p -wave
- (106,17): „Indem” – indem
- (108,28): „jaka” – jako
- (109,11): „pracy [195] w której” – pracy [195], w której
- (110,2): „w okolicy” – w przedziale/zakresie
- (110,24): „ $\text{Pb}_{0.989}\text{Tl}_{0.011}\text{Te}_{0.9976}^3$ obliczona” – $\text{Pb}_{0.989}\text{Tl}_{0.011}\text{Te}_{0.9976}^3$ obliczona
- (114,4): „z odpowiadającym ich grup” – z odpowiadających im grup
- (114,23): „dających” – dająca
- (115,6): „korzystającym” – korzystającego
- (115,10): „Wyznaczoną ją” – Wyznaczono ją
- (115,18): „znacznie przeszacowuje wartości” – znacznie przeszacowuje wartości
- (115,32): „ $\text{Sn}_{31}\text{In}_1\text{Te}_{32}$ ” – $\text{Sn}_{31}\text{In}_1\text{Te}_{32}$
- (117,20), (125,8): „spin orbita” – spin-orbita
- (118,rys.18.13 oś OX $\times 2$): „nr modu v ” – nr atomu v
- (119,21): „występują silna zmiękczenie” – występuje silne zmiękczenie
- (119,33): „wakansje na Sn” – wakansje na węzłach Sn
- (119,34): „wakansje na posieci telluru” – wakansje w podsieci telluru
- (120,13), (121,1), (122,11): „wakansji na podsieci” – wakansów w podsieci
- (123,26): „zasobów numerycznych” – zasobów komputerowych/mocy obliczeniowej
- (125,4): „pokazuje fononową relację” – pokazuje fononowe relacje
- (126,9): „pozostała nadzieją że” – pozostała nadzieja, że

(127,4): „zrelaksowanymi atomy” – zrelaksowanymi atomami

(133,17): „s-wave” – s-wave

(133,18): „objawia nietypowym kształtem” – objawia się nietypowym kształtem

(134,5): „problem parowania elektron-fonon” – problem sprzężenia elektron-fonon

W rozprawie 19 razy użyto określeń „podbicie wartości” / „podbija wartość” zaczerpniętych z języka potocznego. Lepiej użyć słów „wzrost wartości”, „podnosi wartość”, „zwiększa częstość”, „powoduje wzrost”.

Najpowszechniejszymi błędami składu, na które autor praktycznie nie zwracał uwagi, są sierotki, czyli pojedyncze litery, najczęściej pełniące funkcję spójnika, pozostawione na końcu wiersza.



