

ОТЗЫВ ЧЛЕНА ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА

на диссертацию Грубовой Ирины Юрьевны на тему «Механизмы межатомного взаимодействия на границе раздела титан-кальций-фосфатное покрытие», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Актуальность избранной темы. К имплантатам, применяемым для компенсации костных дефектов в ортопедии, вертебрологии и травматологии, предъявляются требования по прочности, модулю упругости материала имплантата и его биосовместимости. Кроме того, важным является придание имплантатам биокондуктивных и биоиндуктивных свойств, обеспечивающих активное образование костной ткани на поверхности имплантата. Известно, что такими свойствами обладают фосфаты кальция (трикальцийфосфат, гидроксиапатит). Формирование кальций-фосфатных слоев на поверхности титановых имплантатов является важной технологической задачей, решение которой позволяет повысить эффективность применяемых имплантатов. Однако при создании покрытий необходимо учитывать их устойчивость на поверхности титанового имплантата.

Тема диссертационной работы И.Ю.Грубовой направлена на изучение адгезионного взаимодействия на границе раздела титан/гидроксиапатит, что важно для прогнозирования свойств создаваемых материалов, а также возможных методов повышения адгезионной устойчивости кальций-фосфатных покрытий.

Из сказанного следует, что тема диссертационной работы И.Ю.Грубовой безусловно является актуальной, а сама работа – своевременной.

Степень обоснованности научных результатов, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации. Полностью соглашаясь со сформулированной автором научной новизной работы, отметим, по нашему мнению, наиболее важное.

В работе разработан теоретический подход, описывающий на атомистическом уровне механизмы деформации границы раздела титан/гидроксиапатит при растяжении и разрушении межатомных связей на границе раздела. Получены теоретические представления, определяющие зависимость прочности сцепления гидроксиапатитового покрытия с титаном от состава и структуры контактирующих поверхностей. Разработанная методика расчёта предела прочности на разрыв может быть использована для первопринципных исследований других систем.

Полученные теоретические представления являются важными для интерпретации специализированных механических испытаний тонких покрытий на металлических подложках и значимыми для решения проблемы физики конденсированного состояния, связанной с изучением атомной и электронной структуры границ раздела металл-керамическое покрытие.

Выводы по диссертации и высказанные рекомендации по применению разработанных технологических решений представляются обоснованными и имеют необходимый уровень новизны.

Значимость для науки и производства полученных результатов. Работа И.Ю.Грубовой находится в ряду передовых исследований по квантово-механическим расчетам адгезионных взаимодействий на границе раздела металл/керамика. В работе показана принципиальная возможность описания свойств эффективных в области имплантологии материалов. Полученные результаты, без сомнения, открывают возможность дальнейших разработок в данном направлении.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов. Основные научные положения и выводы работы, сделанные автором,

представляются обоснованными. Обоснованность выводов основана на большом объеме проведенных расчетов, выполненных с использованием современных методов. Результаты обсуждаются автором с позиции современных представлений материаловедения, химии твердого тела и физической химии.

Вопросы и замечания по работе.

1. Из текста диссертации не ясно, проводились ли сопоставления полученных расчетов с экспериментальными результатами, особенно, для кремний содержащих гидроксиапатитов.

2. Что, по мнению автора, определяет остеоиндуктивные и остеоиндуктивные свойства покрытий из гидроксиапатита? Размеры фрагментов и их морфология? Химия поверхности?

3. Обсуждая влияние морфологии поверхности на адгезию гидроксиапатита к титану (стр.85), не ясно, о каком линейном масштабе морфологических особенностей пишет автор.

4. Не понятно, почему автор использовал такую конфигурацию валентных электронов для фосфора (стр.65 и 88), не принимая во внимание d-орбитали фосфора? Насколько это справедливо для пятивалентного атома фосфора?

5. Требуется пояснений рис. 4.6 (стр.96). Описание рисунка содержит ошибки – наблюдаемые механические напряжения, почему-то, названы прочностью. С чем автор связывает резкое снижение механических напряжений при некоторых деформациях?

Соответствие работы требованиям, предъявляемым к диссертациям. Диссертация И.Ю.Грубовой представляет собой законченное исследование. Работа обладает всеми основными качествами кандидатской диссертации: актуальностью решаемой проблемы, новизной методов решения, интересными и важными научными результатами, практической ценностью полученных результатов. Важно, что сформулированные подходы

и представления интересны для дальнейшего развития, как в части их научного исследования, так и практического применения.

Приведенные в диссертации результаты исследования свидетельствуют о научной зрелости диссертанта, способного решать научно-теоретические задачи в области новых материалов. Выполненная работа соответствует критериям п. II «Положения о порядке присуждения в Санкт-Петербургском государственном университете ученой степени кандидата наук» от 01 сентября 2016 года № 6821/1, а ее автор Грубова Ирина Юрьевна заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Гордеев Сергей Константинович,
доктор технических наук
по специальности 05.02.01 – материаловедение в машиностроении,
начальник лаборатории наноматериалов и карбидных композитов
АО «Центральный научно-исследовательский институт материалов»
Адрес: 191014, г. Санкт-Петербург, ул. Парадная, д.8
Телефон : 8 (812) 274-46-39
E-mail: info@cniim.com

