

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета на диссертацию Грубовой Ирины Юрьевны на тему: «Механизмы межатомного взаимодействия на границе раздела титан-кальций-фосфатное покрытие: первопринципное исследование», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07. – Физика конденсированного состояния

Диссертация Грубовой Ирины Юрьевны посвящена теоретическому исследованию механических свойств границы раздела титан/керамика на основе гидроксипатита. Для этого автором активно использовались расчёты в методе функционала плотности. Разработана достаточно убедительная и находящаяся в разумном согласии с экспериментальными данными схема расчёта прочностных свойств границы керамики с металлом, изучена роль кислородных вакансий в оксиде титана, а также влияние легирования керамики кремнием на прочностные свойства системы.

Актуальность и востребованность этих исследований не вызывает сомнений, поскольку они позволяют построить реалистичную модель границы раздела сред и выяснить зависимость прочностных свойств такой границы от различных факторов.

Диссертация состоит из Введения, четырёх глав, Заключения и списка литературы.

Во Введении обоснованы актуальность и новизна исследований, сформулированы цели и задачи, положения, выносимые на защиту, описаны научная и практическая значимость работы, апробация работы и личный вклад автора.

В первой главе сделан детальный обзор литературы, даны общие сведения о системе и основных технологиях формирования керамических гидроксипатитовых покрытий на металлической подложке, сделан обзор имеющихся теоретических исследований данной системы с помощью компьютерного моделирования.

Вторая глава посвящена описанию методики расчёта. Сделан краткий обзор метода функционала плотности, а также описаны необходимые детали моделирования в программном пакете VASP, который использовался для получения основных результатов диссертации.

Третья глава посвящена собственно вычислению прочностных характеристик границы раздела керамика/металл. Для моделирования предложено рассматривать несколько монослоёв материала рядом с границей раздела гидроксипатита и рутила, показано, что такой расчёт адекватно отражает характеристики реальной системы. Выполнен расчёт прочности границы раздела, проанализировано влияние кислородных вакансий на прочность границы.

В четвёртой главе рассматривается влияние на прочность системы замещения в гидроксипатите фосфатных групп ионами кремния. Теоретический анализ показывает, что данный механизм улучшения прочностных характеристик достаточно перспективен.

Основные результаты по исследованию прочностных характеристик границы раздела титан/калий-фосфатное покрытие, полученные в диссертации, **обоснованы**. Их

by 09/2 - 107 ст, 02.04.19

достоверность обусловлена применением современных, хорошо зарекомендовавших себя методов расчёта, согласием с другими теоретическими и экспериментальными результатами.

Полученные в диссертации результаты являются **новыми**, научно значимыми и вносят вклад в развитие физики конденсированного состояния.

По диссертации имеются следующие замечания:

1. В части введения в метод функционала плотности есть путаница при описании различных обменно-корреляционных потенциалов. На стр. 55 гибридные функционалы упомянуты как подкласс GGA, в то время как (локальные и нелокальные) гибридные функционалы являются отдельным классом и получаются смешиванием одного из вариантов стандартных обменно-корреляционных функционалов (LDA, GGA или meta-GGA) с точным обменом, вычисленным в рамках приближения Хартри-Фока.
2. На рис. 3.3 (стр. 68) проведена кривая, похожая на параболу. В то же время, из подписи и текста можно заключить, что была попытка найти «энергию обрезания», при которой полная энергия системы, рассчитанная в методе функционала плотности, выходит на константу. Не очень понятно, как из рисунка можно сделать приведённое в тексте заключение.
3. В тексте, который поясняет рисунок 3.5 (на стр. 71), указано дословно «Видно, что сходимость поверхностной энергии достигается при значении $\sim 1.005 \text{ Дж}\cdot\text{м}^{-2}$, которое соответствует количеству атомных слоёв $nL = 4-5$ ». Однако, из рисунка видно, что для числа слоёв 6, полная сходимость ещё не достигнута.
4. В диссертации достаточно подробно приводятся детали использования для расчётов методом функционала плотности программного пакета VASP. Также, сделано подробное и общее введение в метод функционала плотности. Однако, часть расчётов была проведена методами молекулярной динамики с использованием пакета ReaxFF (упоминается на стр. 11, 65, 69, 71, 74). Для полноты изложения имело смысл также дать общее описание методики соответствующего расчёта. Включая описание подхода реактивного поля валентных сил, его достоинства, недостатки, и пояснить, почему этот пакет не использовался для исследования прочностных характеристик.
5. На странице 83 указывается, что «прочность сцепления на границе раздела ... может быть сопоставлена с интегральным переносом заряда». Далее, после кратких пояснений с использованием узкоспециального жаргона, такое сопоставление используется для некоторых заключений. На мой взгляд, из текста невозможно понять суть использованной методики. «Интегрирование разности Байдера» не является стандартным методом анализа в физике конденсированного состояния. Возможно, этот метод стандартен для квантовой химии, но даже в таком случае из текста нельзя сделать вывода о его применимости для задач материаловедения.
6. На странице 97 указано, что «разрушение aSiГА поверхности имеет адгезионный характер, однако в случае чистого aГА мы наблюдаем когезионный характер отрыва поверхности от подложки (рисунок 4.6, вставки).» Имело смысл более детально пояснить, как именно этот вывод можно сделать на основании вставки на рисунке.

