

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета на диссертационную работу Ирины Юрьевны Грубовой на тему: «Механизмы межатомного взаимодействия на границе раздела титан-кальций фосфатное покрытие: первопринципное исследование»», представляемой на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния

Диссертация посвящена актуальной проблеме теоретического исследования атомной и электронной структуры границ раздела металлического титана и керамического покрытия на основе гидроксиапатита, нацеленных на выяснение физико-химических особенностей таких поверхностей и определения факторов, влияющих на прочность сцепления между покрытием и подложке. Актуальность выбранной тематики обусловлена высокой перспективностью данных систем для современного медицинского материаловедения, одной из приоритетных задач которого является разработка новых композитных материалов с улучшенными физико-химическими свойствами и эксплуатационными характеристиками.

В диссертационной работе проведен поиск теоретических представлений, способных определить основные электронные и структурные факторы, влияющие на селективность межатомного взаимодействия на границе раздела титан/керамическое покрытие. В качестве структурной модели рассмотрен плоский интерфейс, образованный оксидом титана и гидроксиапатитом. Метод исследования сочетал квантовомеханические расчеты и моделирование в рамках молекулярной динамики. Изучены такие важные факторы как тип и прочность образующихся на интерфейсе химических связей, роль кислородных вакансий, аморфизация поверхности, ионное замещение.

Рассмотрим основные защищаемые положения. В третьей главе установлено, что образование кислородных вакансий в оксиде рутила энергетически более выгодно на поверхности, чем в области второго приповерхностного атомного слоя. В той же главе показано, что работа адгезии гидроксиапатита к оксиду титана значительно повышается после предварительной аморфизации поверхности оксида. В четвертой главе изучено влияние частичного замещения фосфора кремнием. Показано, что такой процесс сопровождается удалением части гидроксильных групп и приводит к повышению адгезии и прочности интерфейса на разрыв. Показано, что все эти выводы согласуются с результатами других авторов и с данными эксперимента.

Основные результаты диссертации опубликованы в рецензируемых российских и международных научных журналах, докладывались на конференциях в России и за рубежом. Они нашли признание и широко цитируются другими исследователями. Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации.

К недостаткам диссертации следует отнести большое количество описок и стиливых небрежностей в русскоязычном варианте текста. Порой только наличие параллельного английского текста, свободного от этих небрежностей, позволяет уяснить мысль автора.

Несмотря на отмеченные недостатки диссертация Ирины Юрьевны Грубовой на тему: «Механизмы межатомного взаимодействия на границе раздела титан-кальций фосфатное покрытие: первопринципное исследование» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения

bx 09/2 - 114 от 08.04.19

ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Грубова Ирина Юрьевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния. Пункт 11 указанного Порядка диссертантом не нарушен.

Председатель диссертационного совета
доктор физико-математических наук, профессор
Михаил Борисович Смирнов

