

## 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

**Актуальность** диссертационной работы И.Ю. Грубовой заключается в решении одной из важных задач медицинского материаловедения, а именно в углублении понимания природы и взаимосвязи физико-химических и механических свойств, а также описания процессов на микроскопическом уровне, происходящих не только в объеме, но и на поверхности на основе использования современных вычислительных методов компьютерного моделирования.

Такой подход является одним из приоритетных направлений исследований современной физики конденсированного состояния, он способен дать существенный вклад в научный и технологический прогресс.

Научная новизна диссертационной работы И.Ю. Грубовой заключается в том, что в работе впервые:

1. осуществлено первопринципное исследование границы раздела между титановой подложкой и сформированным на его поверхности КФ покрытием: изучена энергия взаимодействия, природа химических связей и электронные свойства в зависимости от состава, структуры и дефектов поверхностей на интерфейсе.
2. разработана теоретическая модель, основанная на первых принципах, механизма деформации и разрушения тонкого ГА покрытия на границе раздела титан-покрытие.
3. с помощью построения модели механического поведения при

*bx 09/2 - 113 om 05.04.2019*

растяжении интерфейса определено влияние замещения фосфатных групп в структуре ГА ионами кремния на улучшение механических свойств.

Эти результаты позволяют говорить о полученном в работе теоретическом обосновании атомной и электронной структуры, механических свойств и химических связей на границе раздела титан – керамическое покрытие на основе ГА с помощью вычислительных методов компьютерного моделирования.

**Практическая значимость** диссертационной работы И.Ю. Грубовой заключается в следующем:

- 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.
- разработанная методика расчёта идеального предела прочности на разрыв может быть использована для первопринципных исследований других низкоразмерных систем.

**Положения, выносимые на защиту** в диссертационной работе И.Ю. Грубовой, не вызывают возражений, соответствуют содержанию диссертации.

**Цели и задачи**, поставленные в диссертационной работе И.Ю. Грубовой выполнены полностью.

**Достоверность результатов и обоснованность выводов** в диссертационной работе И.Ю. Грубовой обосновываются современным программным обеспечением и современными физическими методами исследования.

Содержание диссертационной работы И.Ю. Грубовой соответствует специальности 01.04.07 — Физика конденсированного состояния.

Содержание диссертационной работы И.Ю. Грубовой достаточно полно отражено в публикациях; 15 публикациях в научных журналах, индекси-

