

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-

руемых в базе данных Scopus, Web of Sciece и большом количестве тезисов докладов на конференциях.

По диссертации И.Ю. Грубовой имеется следующее замечание:

Из материалов диссертации не ясно, как при расчетах учитывалась природа связи (химическая, Ван-дер-ваальсова и др.).

Высказанное замечание не затрагивает существа диссертационной работы И.Ю. Грубовой, которая производит на оппонента самое благоприятное впечатление.

Диссертация Грубовой Ирины Юрьевны 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 ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Грубова Ирина Юрьевн заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — Физика конденсированного состояния. Пункт 11 указанного Порядка диссертантом не нарушен.

Член диссертационного совета

Д.х.н., профессор, профессор каф.

химии твердого тела



Смирнов Владимир Михайлович

4 апреля 2019