

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича
Навчально-науковий інститут фізико - технічних та комп'ютерних наук
Кафедра термоелектрики та медичної фізики

“ЗАТВЕРДЖУЮ”
Директор навчально-наукового інституту
фізико-технічних та комп'ютерних наук

Олег АНГЕЛЬСЬКИЙ
“09” серпня 2024 року

РОБОЧА ПРОГРАМА
навчальної дисципліни
Комп'ютерне матеріалознавство
(вибіркова)

Освітньо-наукова програма	<u>Прикладна фізика та наноматеріали</u>
Спеціальність	<u>105 Прикладна фізика та наноматеріали</u>
Галузь знань	<u>10 Природничі науки</u>
Рівень вищої освіти	<u>Другий (магістерський)</u>
<u>Навчально-науковий інститут фізико-технічних та комп'ютерних наук</u>	
Мова навчання	<u>Українська</u>

Робоча програма навчальної дисципліни «Комп'ютерне матеріалознавство» складена відповідно до освітньо-наукової програми «Прикладна фізика та наноматеріали» підготовки здобувачів другого (магістерського) рівня вищої освіти за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали галузі знань 10 Природничі науки, затвердженої Вченою радою Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (Протокол № 5 від «29» травня 2023 року).

Розробник:

Черкез Радіон Георгійович, професор, доктор фізико-математичних наук, професор.

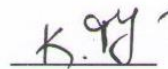
Викладач:

Черкез Радіон Георгійович, професор, доктор фізико-математичних наук, професор.

Погоджено з гарантом ОП і затверджено на засіданні кафедри термoeлектрики та медичної фізики ННІФТКН ЧНУ імені Юрія Федьковича

Протокол № 1 від 09 серпня 2024 року

В.о. завідувача кафедри

 Кобилянський Р.Р.

Схвалено методичною радою ННІФТКН

Протокол № 1 від 09 серпня 2024 року

Голова методичної ради ННІФТКН

 Козярський І.П.

Пояснювальна записка

Мета навчальної дисципліни:

формування у студентів знань і умінь для ефективної роботи з основними комп'ютерними засобами, що використовуються при проектуванні термоелектричних матеріалів та термоелементів на їх основі з екстремальними значеннями термоелектричної ефективності.

Пререквізити.

Для ефективного засвоєння даної дисципліни будуть корисні знання, отримані студентом з матеріалів курсів, передбачених ОПП першого (бакалаврського) рівня вищої освіти : «Методи математичної фізики», «Диференціальні та інтегральні рівняння», «Термоелектричне матеріалознавство», «Чисельні методи», «Мікроскопічна теорія явищ перетворення енергії», «Комп'ютерне моделювання у прикладній фізиці».

У подальшому знання дисципліни будуть корисні для якісного засвоєння матеріалу з курсів: «Термоелектричні генератори», «Комп'ютерне проектування перетворювачів енергії», «Комп'ютерне проектування теплових насосів, енергетичних та інформаційних систем», «Термоелектричні системи охолодження».

Завдання дисципліни: формування у студентів теоретичних знань та практичних навичок з питань комп'ютерного матеріалознавства; розкрити фізичну суть явищ, які відбуваються у матеріалах під впливом на них різних факторів комп'ютерними.

Результати навчання

Відповідно до освітньо-професійної програми, вивчення дисципліни «Комп'ютерне матеріалознавство» сприяє формуванню у здобувачів другого (магістерського) рівня вищої освіти таких *компетентностей*:

Загальні компетентності (ЗК)

ЗК1. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК6. Здатність до проведення досліджень на відповідному рівні.

ЗК8. Навички міжособистісної взаємодії.

ЗК9. Здатність працювати автономно.

ЗК10. Навички здійснення безпечної діяльності.

Фахові компетентності (ФК)

ФК1. Здатність брати участь у плануванні та виконанні наукових та науково-технічних проектів.

ФК2. Здатність брати участь у плануванні і виконанні експериментів та лабораторних досліджень властивостей фізичних систем, фізичних явищ і процесів, обробленні й презентації їхніх результатів.

ФК4. Здатність брати участь у впровадженні результатів досліджень та розробок.

ФК5. Здатність до постійного розвитку компетентностей у сфері прикладної фізики, інженерії та комп'ютерних технологій.

ФК6. Здатність використовувати сучасні теоретичні уявлення в галузі фізики для аналізу фізичних систем.

В результаті вивчення навчальної дисципліни студенти повинні:

Знати та розуміти: базу знань у комп'ютерному матеріалознавстві для розробки комп'ютерних моделей термоелементів з однорідних та неоднорідних матеріалів для термоелектричних генераторів та охолоджувачів.

;

вміти: застосовувати методи комп'ютерного матеріалознавства у створенні матеріалів для конкретних прикладних проблем енергетики, зокрема термоелектричного

охолодження та генерації електричної енергії.

володіти: навичками ефективної роботи з основними комп'ютерними засобами (Mathcad, ComsolMultiphysics), що використовуються при проектуванні термоелектричних матеріалів з екстремальними значеннями ефективності.

Вивчення даної навчальної дисципліни забезпечує досягнення здобувачем наступних **програмних результатів навчання за спеціальністю (РН):**

РН1. Знати і розуміти сучасну фізику на рівні, достатньому для розв'язання складних спеціалізованих задач і практичних проблем прикладної фізики.

РН5. Вибирати ефективні методи та інструментальні засоби проведення досліджень у галузі прикладної фізики.

РН6. Відшуковувати необхідну науково-технічну інформацію в науковій літературі, електронних базах, інших джерелах, оцінювати надійність та релевантність інформації.

РН7. Класифікувати, аналізувати та інтерпретувати науково-технічну інформацію в галузі прикладної фізики

РН10. Планувати й організовувати результативну професійну діяльність індивідуально і як член команди при розробці та реалізації наукових і прикладних проектів.

Опис змісту робочої програми навчальної дисципліни

Загальна інформація про розподіл годин

Назва навчальної дисципліни <u>Спеціальний науковий семінар з прикладного матеріалознавства</u>												
Форма навчання	Рік підготовки	Семестр	Кількість			Кількість годин						Вид підсумкового контролю
			кредитів	годин	Змістових модулів	лекції	практичні	семінарські	лабораторні	самостійна робота	індивідуальні завдання	
Денна	6	11	4	120	-	-	-	32	88	-	-	залік

3.2. Дидактична карта навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем навчальних занять	Кількість годин					
	денна форма					
	Усього	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	с.р.
1	2	3	4	5	6	7
Змістовий модуль 1. Основи проектування термоелектричного матеріалу та для віток термоелементів. Теми лабораторних занять.						
Тема 1. Вступне заняття. Основи роботи з комп'ютерною програмою MathCAD	8	-	-	2	-	6
Тема 2. Проектування термоелектричного матеріалу для віток термоелемента з використанням пакета прикладної комп'ютерної програми MathCAD	8	-	-	2	-	6
Тема 3. Комп'ютерний вибір оптимальних однорідних термоелектричних матеріалів для	8	-	-	2	-	6

термоелементів.						
Тема 4. Моделювання матеріалу n-типу провідності на основі Bi-Sb в оптимальному магнітному полі для низькотемпературного охолодження.	8	-	-	2	-	6
Разом за ЗМ1	32	-	-	8	-	24
Змістовий модуль 2. Моделювання термоелектричного матеріалу на основі мікроскопічної теорії термоелектричного матеріалу. Теми лабораторних занять.						
Тема 5. Проектування термоелектричного матеріалу для віток термоелемента на основі мікроскопічної теорії явищ перенесення	8	-	-	2	-	6
Тема 6. Оптимізація однорідних термоелектричних матеріалів на основі мікроскопічної теорії явищ перенесення	8	-	-	2	-	6
Тема 7. Теоретичне дослідження параметрів термоелектричних речовин при наявності виродження електронного газу.	8	-	-	2	-	6
Разом за ЗМ 2	24	-	-	6	-	18
Змістовий модуль 3. Моделювання неоднорідних та анізотропних термоелементів. Лабораторні роботи.						
Тема 8. Комп'ютерне моделювання дискретнонеоднорідного термоелектричного матеріалу для секційних термоелементів.	4	-	-	2	-	2
Тема 9. Проектування функціональноградієнтних матеріалів (ФГМ) для термопарних генераторних елементів.	10	-	-	4	-	6
Тема 10. Моделювання анізотропного термоелемента.	8	-	-	2	-	6
Разом за ЗМ 3	22	-	-	8	-	14
Змістовий модуль 4. Використання ComsolMultiphysics для 3-D моделювання термоелементів . Теми лабораторних занять.						
Тема 11. Основи роботи в пакеті прикладних комп'ютерних програм ComsolMultiphysics (модуль heat transfer)	4	-	-	2	-	2

Тема 12. Моделювання повітряного радіатора в ComsolMultiphysics.	8	-	-	2	-	6
Тема 13. Моделювання генераторного термоелемента в пакеті прикладних комп'ютерних програм ComsolMultiphysics	10	-	-	4	-	6
Тема 14. Моделювання термоелемента охолодження в пакеті ComsolMultiphysics	8			2		6
Разом за ЗМ 4	30	-	-	10	-	20
Усього годин	180	-	-	32	-	88

Контроль виконання завдань, винесених на підготовку та виконання лабораторних занять, виконання необхідних розрахунків проводиться в рамках модульного контролю, переглядом звітів з виконання лабораторних робіт та самим захистом студентами лабораторних робіт. Бали за цю роботу входять у загальну кількість балів за діяльність – захист лабораторних робіт. Цикл лабораторних робіт складається з 14 повноцінних лабораторних робіт, студент може вибрати на початку семестру 5 з цих робіт за бажанням. Кожна лаб. робота оцінюється в 4 бали: 2 бали за виконання роботи і 2 бали за захист.

Завдання для самостійної роботи студентів

№	Назва теми
1	Класифікація матеріалів. Загальна характеристика груп матеріалів.
2	Основи роботи в пакетах прикладних комп'ютерних програм Mathcad.
3	Методи апроксимації, інтерполяції та побудови графічних залежностей в пакеті прикладних комп'ютерних програм Mathcad.
4	Методи розв'язку систем диференціальних рівнянь в пакеті прикладних комп'ютерних програм Mathcad.
5	Теоретичні моделі термоелектричного напівпровідникового матеріалу на основі Bi-Te.
7	Теоретичні моделі термоелектричного напівпровідникового матеріалу на основі Pb-Te.
8	Теоретичні моделі термоелектричного напівпровідникового матеріалу на основі Bi-Sb.
9	Неоднорідні термоелементи та методи їх розрахунку.
10.	Сегментні термоелементи для генераторів.
11.	Методи розрахунку функціонально-градієнтних матеріалів та

	термоелементів на їх основі.
12	Основи роботи в пакетах прикладних комп'ютерних програм ComsolMultyphysics модуль Laminar Flow (Ламінарний потік).
13	Модуль Heat Transfer in Fluids (Теплопередача в потоках) прикладної комп'ютерної програми ComsolMultyphysics.
14	Модуль Current Conservation (Збереження електричного струму) прикладної комп'ютерної програми ComsolMultyphysics.

Самостійна робота студентів передбачає: конспектування матеріалу; пошук літературних джерел для підготовки до лабораторних занять.

Бали за цю роботу входять у загальну кількість балів за конкретний модуль.

Методи навчання

Методи навчання:

лекції: проблемний виклад, частково-пошукові та дослідницькі методи, презентації, бесіди і дискусії;

лабораторні заняття: метод проблемного підходу, дослідницький метод.

Самостійна робота студентів передбачає: конспектування лекційного матеріалу; вивчення теоретичного матеріалу лекційних занять та опрацювання літературних джерел, рекомендованих цією програмою; проведення розрахунків та підготовку звітів з практичних та лабораторних робіт.

Інтерактивні методи навчання: застосуванням електронних мультимедійних комплексів навчальних дисциплін та ресурсів, а також платформи для дистанційного навчання Moodle (<https://moodle.chnu.edu.ua>).

Форми навчальних занять: лекції, лабораторні заняття, практичні заняття, консультації.

Система контролю та оцінювання

Методи контролю

У процесі оцінювання навчальних досягнень застосовуємо методи усного і письмового контролю, зокрема такі **засоби оцінювання** та демонстрування результатів навчання:

- *засоби усного контролю:* індивідуальне опитування, фронтальне опитування, презентації результатів виконаних завдань;
- *засоби письмового контролю:* контрольні роботи, тестування, самостійні роботи, виконання та захист лабораторних;
- *засоби самоконтролю:* уміння самостійно оцінювати свої знання, самоаналіз.

У разі проведення навчального процесу та оцінювання у дистанційній формі використовуються засоби Moodle (у тому числі тестування; <https://moodle.chnu.edu.ua>).

Система оцінювання знань є накопичувальною (складається із суми балів за різними видами здійсненого контролю).

Форми контролю

Основними формами поточного контролю є:

- усні відповіді студентів;
- виконання тестових завдань з метою перевірки рівня засвоєння теоретичного матеріалу за навчальними темами;

- усна відповідь студента при здачі лабораторної роботи;
- виконання модульної контрольної роботи (тестування та розв'язання навчально-професійних задач).

Зазначені форми контролю на лекційних, практичних та лабораторних заняттях є обов'язковими для всіх студентів.

Форма підсумкового контролю – залік.

Критерії оцінювання поточного та підсумкового контролю навчальних досягнень студентів

Критерії оцінювання навчальних досягнень студентів за результатами поточного контролю

Критеріями оцінювання навчальних досягнень студентів за результатами поточного контролю є:

- Знання теоретичного матеріалу
- Практичні навички
- Самостійність і критичне мислення
- Якість виконання завдань
- Активність на заняттях
- Дотримання термінів виконання завдань
- Академічна доброчесність

Розподіл балів, які отримують студенти за модулі

Поточне оцінювання (аудиторна та самостійна робота)				Кількість балів (екзамен)	Сумарна к-ть балів
Змістовий модуль №1	Змістовий модуль №2	Змістовий модуль №2	Змістовий модуль №2		
T1,T2, T3,T4	T5,T6,T7	T8,T9, T10	T11,T12,T13,T14		
20	20	20	20	40	100

T1,T2, T3,T4,T5,T6,T7,T8,T9,T10,T11,T12,T13,T14 – теми змістових модулів.

Критерії підсумкового оцінювання результатів навчання студентів з навчальної дисципліни

Критерієм підсумкового оцінювання є досягнення студентом певних знань передбаченим результатом навчання, коли студент опанував теоретичними та практичними знаннями навчальної дисципліни.

Шкала оцінювання: національна та ЄКТС

Рейтингова оцінка з дисципліни	Оцінка за шкалою ЄКТС	Оцінка за національною шкалою	Залік за національною шкалою
90-100	A	5 (відмінно)	Зараховано
80-89	B	4 (добре)	
70-79	C	4 (добре)	
60-69	D	3 (задовільно)	
50-59	E	3 (задовільно)	
35-49	Fx	2 (незадовільно) з можливістю повторного складання	Не зараховано
1-34	F	2 (незадовільно) з	

		обов'язковим самостійним повторним опрацюванням освітнього компонента до перескладання	
--	--	--	--

Критерії підсумкової оцінки як показника результатів вивчення навчальної дисципліни

Згідно шкали ЄКТС загальна кількість балів, яку студент може отримати у процесі вивчення дисципліни, становить 100 балів, з яких 60 балів студент набирає при поточних видах контролю і 40 балів – у процесі підсумкового контролю (екзамен).

Таким чином знання студентів оцінюється як з теоретичної, так і з практичної підготовки за такими критеріями:

«А» 90-100 балів ставиться у разі, якщо студент:	– постійно готувався до занять та згідно з програмою дисципліни; – глибоко та всебічно розкривав зміст питань; – показав уміння формулювати висновки, узагальнювати та аналізувати навчальний матеріал; – показав уміння вільно виконувати завдання; – переконливо та логічно викладав матеріал, проявляв творчий підхід до виконання практичних завдань та підготовки до лабораторних робіт; – належним чином виконував завдання для самостійної роботи; – виконав завдання модульного контролю або допускав при усних відповідях та тестуванні окремі незначні неточності.
«В» 80-89 балів ставиться у разі, якщо студент:	– розкривав згідно з програмою дисципліни зміст питань; – робив узагальнення та висновки з окремих питань; – виконав усі лабораторні роботи; – виконував завдання для самостійної роботи; – виконав завдання модульного контролю, але недостатньо використовував додаткову літературу; – при усних відповідях не досить повно і аргументовано викладав матеріал, а при тестуванні мали місце окремі неточності; – не проявив творчий підхід до виконання індивідуальних завдань та наукових повідомлень.
«С» 70-79 балів ставиться у разі, якщо студент:	– розкривав згідно з програмою дисципліни зміст питань; – формулював висновки з окремих питань практичних занять; – брав участь у виконанні практичних завдань; – виконував завдання для самостійної роботи; – виконав завдання модульного контролю, але допускав окремі неточності при усних відповідях, тестуванні; – не проявляв належної активності на лекційних та лабораторних заняттях, недостатньо використовував додаткову літературу; неохайно виконував завдання лабораторних робіт.
«D» 60-69 ставиться у разі, якщо студент:	– відповідав на окремі питання, які обговорювалися; – формулював висновки з окремих питань; – виконував завдання для самостійної роботи; – виконав завдання модульного контролю, але допускав окремі неточності; – не проявляв належної активності на лабораторних заняттях та старанності при виконанні завдань для самостійної роботи; – недостатньо використовував додаткову літературу, не належним чином виконав практичні завдання; – виконав не всі завдання для самостійної роботи, або не виконав хоча б

	одну лабораторну роботу.
«E» 50-59 балів ставиться у разі, якщо студент:	– відповідав на окремі питання, які обговорювалися; – виконував окремі завдання для самостійної роботи; – виконав завдання модульного контролю, але допускав неточності при усних відповідях (будуючи свою відповідь на звичайному повторенні навчального матеріалу без його осмислення), тестуванні; – не проявляв належної активності на лабораторних заняттях, старанності при виконанні завдань для самостійної роботи; – недостатньо використовував основну та додаткову літературу; – виконав не всі лабораторні роботи; – не належним чином виконував індивідуальні завдання.
«Fx» 35-49 балів ставиться у разі, якщо студент:	– поверхнево розкривав зміст питань, які розглядалися; – допускав суттєві помилки при усних та письмових відповідях; – поверхнево ознайомився з рекомендованою літературою; – частково виконав завдання для самостійної роботи; – не проявляв активності на практичних заняттях; – допускав принципові помилки під час виконання завдань; – не виконував лабораторні роботи; – не виконав завдання модульного контролю.
«F» 1-34 балів ставиться у разі, якщо студент:	– поверхнево розкривав зміст питань, які розглядалися; – допускав суттєві помилки при усних та письмових відповідях, тестуванні; – поверхнево ознайомився з рекомендованою літературою; – не виконав завдання для самостійної роботи; – не виконав практичне завдання; – не виконував лабораторні роботи; – на підсумковому занятті не вміє відтворити зміст окремих питань, передбачених програмою дисципліни; – не виконав завдання модульного контролю.

Шкала оцінювання: національна та ЄКТС

Рейтингова оцінка з дисципліни	Оцінка за шкалою ЄКТС	Оцінка за національною шкалою	Залік за національною шкалою
90-100	A	5 (відмінно)	Зараховано
80-89	B	4 (добре)	
70-79	C	4 (добре)	
60-69	D	3 (задовільно)	
50-59	E	3 (задовільно)	
35-49	Fx	2 (незадовільно) з можливістю повторного складання	Не зараховано
1-34	F	2 (незадовільно) з обов'язковим самостійним повторним опрацюванням освітнього компонента до перескладання	

Зарахування результатів неформальної освіти

Відповідно до «Положення про взаємодію формальної та неформальної освіти, визнання результатів навчання (здобутих шляхом неформальної та/або інформальної освіти,

в системі формальної освіти) у Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича (протокол № 109 від 28 березня 2022 року) (<https://www.chnu.edu.ua/media/3aykf41y/polozhennia-pro-vzaiemodiiu-formalnoi-ta-neformalnoi-osvity.pdf>) у процесі вивчення дисципліни здобувачу освіти може бути зараховано до 25% балів, отриманих за результатами неформальної та/ або інформальної освіти з проблем, що відповідають тематиці курсу.

Рекомендована література

Основна література

1. <https://moodle.chnu.edu.ua/course/view.php?id=2128>
2. Комп'ютерне матеріалознавство. Методичні рекомендації до лабораторних робіт / Укл.: Черкез Р.Г. – Чернівці : Чернівецький національний університет, 2022. – 120 с.
3. Anatychuk L. I. Thermoelectricity: Functionally Graded Thermoelectric Materials / L. I. Anatychuk, L. N. Vikhor. – Chernivtsi, 2012. – Vol. IV – 172 p..
4. <https://mathcad.com.ua>
5. <https://www.comsol.com>

Допоміжна

1. Афтанділянц Є.Г., Зазимко О.В., Лопатько К.Г. Матеріалознавство: Підручник. К.: Вища освіта. – 2012. – с 548
2. Snyder G. Jeffrey Thermoelectric efficiency and compatibility / G. Jeffrey Snyder, Tristan S. Ursell // Physical Review Letters. – 2003. – V. 91. – P. 148301.
3. Anatychuk L. I. Computer simulation of functionally graded materials for thermoelectricity / L. I. Anatychuk, L. N Vikhor, R. G. Cherkez // Journal of Thermoelectricity. – 1997. – № 3. P. 43 – 61.
4. Thermoelectrics Handbook. Macro to Nano / ed. D. M. Rowe. – N. Y.: CRC Press, 2006
5. Anatychuk L. I. Thermoelectricity / L. I. Anatychuk – Institute of Thermoelectricity, Kyiv, Chernivtsi, 2005. – Vol. 2: Thermoelectric power converters. – 2005. – 348 p..

Інформаційні ресурси

1. <https://uk.wikipedia.org/>
2. <https://fizmat.7mile.net/materialoznavstvo/>
3. http://univer.nuczu.edu.ua/tmp_metod/924/MZTM_KONSP_LEK.pdf
4. <http://booklib.in.ua/category/biblioteka-knig/materialovedenie>
5. <http://library.kpi.kharkov.ua/NEW/AftandilMater.pdf>
6. <https://studfile.net/preview/5226210/>