Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Кафедра фізики твердого тіла

**“ЗАТВЕРДЖУЮ”**

В. о. Декана фізичного факультету

ХНУ імені В. Н. Каразіна

_____ Дмитро РОХМІСТРОВ

“ *27* ” *серпня* 2026 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

**«Комп’ютерне матеріалознавство і дизайн матеріалів»**

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти ***другий (магістерський)***

галузь знань ***10 Природничі науки***
(шифр і назва)

спеціальність ***Е5 Фізика та астрономія***
(шифр і назва)

освітня програма ***освітньо-наукова програма – “Фізика”***
(шифр і назва)

спеціалізація _____
(шифр і назва)

вид дисципліни ***за вибором***
(обов’язкова / за вибором)

факультет ***фізичний***

2026 / 2027 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою факультету

“ 27 ” серпня 2026 року, протокол № 10

РОЗРОБНИК ПРОГРАМИ:

Шурінов Роман Володимирович – кандидат фіз.-мат. наук, доцент, доцент закладу вищої освіти кафедри фізики твердого тіла

Програму схвалено на засіданні кафедри фізики твердого тіла

Протокол № 6 від 26 серпня 2026 року

В.о. завідувача кафедри _____ Золтан ЗИМАН

(підпис) ( ім’я та призвіще)

Програму погоджено з гарантом освітньої (професійної/наукової) програми (керівником проектної групи) Фізика

назва освітньої програми

Гарант освітньої (професійної/наукової) програми

(керівник проектної групи) _____ Дмитро РОХМІСТРОВ

(підпис) ( ім’я та призвіще)

Програму погоджено методичною комісією фізичного факультету

Протокол № 9 від 26 серпня 2026 року

Голова методичної комісії _____ Олег ЛАЗОРЕНКО

(підпис) ( ім’я та призвіще)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Комп'ютерне матеріалознавство і дизайн матеріалів» складена відповідно до освітньо-наукової програми підготовки

*магістра*

(назва рівня вищої освіти)

спеціальності (напряму) *E5 Фізика та астрономія*

освітня програма *освітньо-наукова програма «Фізика»*

спеціалізації

## 1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни:

**Мета курсу:** формування у здобувачів теоретичних знань і практичних навичок щодо застосування сучасних методів комп'ютерного моделювання для дослідження структури та властивостей матеріалів, а також їх цілеспрямованого проєктування із заданими характеристиками.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни:

Основними завданнями вивчення дисципліни «Комп'ютерне матеріалознавство і дизайн матеріалів» є формування у студентів знань про сучасні методи комп'ютерного моделювання, проєктування та дослідження матеріалів із заданими властивостями. Дисципліна передбачає ознайомлення з основними принципами цифрового матеріалознавства, методами математичного моделювання структури та властивостей матеріалів, а також використанням спеціалізованого програмного забезпечення для аналізу й прогнозування їхньої поведінки за різних умов експлуатації. Важливим завданням є набуття практичних навичок роботи з комп'ютерними моделями, обробки та інтерпретації результатів моделювання й оцінювання взаємозв'язку між структурою, складом і властивостями матеріалів. Окрема увага приділяється застосуванню комп'ютерних технологій для оптимізації складу, структури та технологічних параметрів матеріалів, а також розробленню нових матеріалів для вирішення актуальних наукових і прикладних завдань.

1.3. Кількість кредитів *3*

*1.4.* Загальна кількість годин *90*

| 1.5. Характеристика навчальної дисципліни | |
|---|---|
| Нормативна / за вибором | |
| Денна форма навчання | Заочна (дистанційна) форма |
| Рік підготовки | |
| 2-й | -й |
| Семестр | |
| 4-й | -й |
| Лекції | |
| 22 год. | год. |
| Практичні, семінарські заняття | |
| 0 год. | год. |
| Лабораторні заняття | |
| 11 год. | год. |
| Самостійна робота, у тому числі | |
| 57 год. | год. |
| Індивідуальні | |
| 0 год. | |

1.6. Перелік компетентностей, що формує дана дисципліна

Інтегральна компетентність (ІК)

Здатність розв’язувати складні задачі і проблеми дослідницького та/або інноваційного характеру у галузі фізики твердого тіла із застосуванням методів комп’ютерного та математичного моделювання.

Загальні компетентності (ЗК)

ЗК 1. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях під час проведення комп’ютерного експерименту та наукових досліджень.

ЗК 2. Знання та розуміння предметної області та професійної діяльності у сфері фізики конденсованого стану.

ЗК 3. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел, зокрема наукових баз даних та фахової літератури.

ЗК 4. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями та обчислювальними технологіями.

ЗК 5. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології для моделювання, обчислень і візуалізації фізичних процесів.

ЗК 6. Здатність виявляти, ставити та вирішувати складні фізичні та обчислювальні проблеми.

ЗК 7. Здатність до проведення наукових досліджень на відповідному рівні кваліфікації.

Спеціальні (фахові, предметні) компетентності (СК / ФК)

ФК 1. Здатність використовувати фундаментальні закони фізики конденсованого стану та квантової механіки у поєднанні з математичними й чисельними методами для опису структури і властивостей матеріалів на різних масштабах.

ФК 2. Здатність формулювати, аналізувати та критично оцінювати шляхи розв’язання наукових і технологічних задач у галузі комп’ютерного дизайну нових матеріалів.

ФК 5. Здатність сприймати та інтегрувати нові наукові знання з атомістичного й квантово-хімічного моделювання, а також машинного навчання в матеріалознавстві для розв’язання складних дослідницьких задач.

ФК 8. Здатність формулювати наукові гіпотези, ставити обчислювальні задачі, вибирати й адаптувати відповідні чисельні методи (першопринципні розрахунки DFT, молекулярна динаміка, метод скінченних елементів) для спрямованого конструювання матеріалів.

ФК 10. Здатність планувати й реалізовувати комплексні комп’ютерні експерименти з дослідження атомарної будови, електронного спектра, фазового складу та функціональних властивостей перспективних матеріалів.

ФК 11. Здатність встановлювати та моделювати причинно-наслідкові зв’язки у ланцюгу «склад – електронна/атомарна структура – мікроструктура – властивості – функція» для передбачення характеристик нових сполук та гетероструктур.

ФК 13. Здатність здійснювати кваліфікований аналіз, узагальнення та інтерпретацію результатів обчислювального моделювання матеріалів, порівнювати їх із даними експериментальних досліджень.

1.7. Перелік результатів навчання, що формує дана дисципліна

*Знання:*

Теоретичні основи квантово-механічних методів (зокрема теорії функціонала щільності DFT) та методів молекулярної динаміки для обчислення властивостей кристалів, наноструктур і гетероструктур.

Фізичні принципи побудови відкритих баз даних матеріалів та цифрових платформ high-throughput дизайну матеріалів.

Причинно-наслідкові механізми формування електронного спектра, фазової стабільності та функціональних характеристик матеріалів на атомарному рівні.

*Уміння:*

Налаштовувати та проводити атомістичні розрахунки електронної структури, фононних спектрів і оптичних властивостей матеріалів за допомогою спеціалізованого ПЗ.

Здійснювати комп’ютерне прогнозування стабільності нових фаз та порівнювати розраховані фізичні параметри з експериментальними спектроскопічними чи структурними даними.
Автоматизувати процеси генерації моделей та обробки масивів розрахункових даних із використанням скриптових мов (наприклад, Python).

*Програмні результати навчання:*
ПРН 1. Демонструвати концептуальні та спеціалізовані знання з теорії твердого тіла, фізичного матеріалознавства та комп’ютерного конструювання матеріалів.
ПРН 2. Проводити теоретичні та комп’ютерно-обчислювальні дослідження атомно-кристалічної структури, електронної будови, електронного та фононного спектрів нових матеріалів і робити аргументовані наукові висновки.
ПРН 4. Обґрунтовано обирати та застосовувати ефективні математичні й чисельні методи, алгоритми обробки даних та оцінювання достовірності результатів комп’ютерного моделювання.
ПРН 6. Застосовувати спеціалізовані програмні комплекси (наприклад, Quantum ESPRESSO, VASP, LAMMPS, Materials Studio тощо) та алгоритми аналізу даних для розв’язання задач комп’ютерного дизайну матеріалів із наперед заданими властивостями.
ПРН 10. Знаходити, систематизувати та критично аналізувати наукову інформацію у міжнародних наукометричних базах і спеціалізованих базах даних матеріалів (Materials Project, AFLOW, ICSD, Materials Data Facility).
ПРН 12. Розробляти, оптимізувати та реалізовувати розрахункові скрипти й алгоритми для обробки результатів атомістичного моделювання, візуалізації кристалічних/електронних структур та передбачення фазової стабільності.
ПРН 13. Створювати та валідувати атомістичні, квантово-механічні та термодинамічні моделі матеріалів і фізико-хімічних процесів, аналізувати межі їх застосовності.
ПРН 15. Планувати та оптимізувати етапи комп’ютерного дизайну матеріалу, обґрунтовувати раціональні шляхи його подальшого реального синтезу й технологічної обробки на основі розрахованих властивостей.

1.8. Пререквізити: перелік дисциплін, що передують вивченню даної дисципліни.

Для успішного засвоєння матеріалу, виконання комп’ютерних лабораторних робіт здобувачі вищої освіти повинні попередньо опанувати такі навчальні дисципліни: Квантова механіка – знання рівняння Шредінгера, квантових станів, принципів наближення багатьох тіл та потенціалів міжатомної взаємодії (необхідні для розуміння квантово-хімічних методів та першопринципних DFT-розрахунків). Основи фізики конденсованого стану / Фізика твердого тіла – розуміння зонної теорії провідності, електронного та фононного спектрів, дефектів кристалічної ґратки, фазових переходів та функціональних властивостей матеріалів. Статистична фізика та термодинаміка – володіння поняттями термодинамічних потенціалів, фазової стабільності та статистичних ансамблів (необхідні для використання методів молекулярної динаміки та Monte Carlo). Фізичне матеріалознавство – знання причинно-наслідкових зв’язків у ланцюгу «склад – структура – термомеханічна обробка – властивості матеріалу». Кристалографія та кристалофізика – розуміння точкових і просторових груп симетрії, кристалічних решіток (ґраток Браве) та кристалографічних індексів Міллера. Інформатика, програмування та математичне моделювання – володіння мовами програмування (наприклад, Python, C/C++), навички алгоритмізації, роботи з командним рядком ОС Linux/UNIX та автоматизації обчислень. Вища математика (Аналітична геометрія, Лінійна алгебра, Диференціальні рівняння) – навички роботи з матричним численням, проблемами власних значень і векторів та чисельними методами розв’язання рівнянь. Методи математичної фізики: розуміння крайових задач, спеціальних функцій та перетворень Фур’є/Лапласа для чисельного розв’язання диференціальних рівнянь у часткових похідних.

**2. Тематичний план навчальної дисципліни**

*РОЗДІЛ 1. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТА ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ*

РОЗДІЛ 1. ВСТУП ДО КОМП'ЮТЕРНОГО МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА

Тема 1. Основні поняття матеріалознавства. Класи матеріалів та їх властивості.

Основні поняття та завдання матеріалознавства. Класифікація матеріалів, їхня структура, склад, фізичні, механічні, хімічні та технологічні властивості.

Тема 2. Роль комп'ютерного моделювання у сучасній науці.

Поняття та основні принципи комп'ютерного моделювання. Види моделей, можливості їх використання для дослідження структури, властивостей і поведінки матеріалів.

Тема 3. Використання комп'ютерного матеріалознавства в інженерії та промисловості.

Основні напрями застосування комп'ютерного матеріалознавства в наукових дослідженнях, проєктуванні та виробництві. Використання моделювання для прогнозування властивостей, оптимізації технологічних процесів і розроблення нових матеріалів.

*РОЗДІЛ 2. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ МОДЕЛЮВАННЯ МАТЕРІАЛІВ*

Тема 4. Атомна будова речовини та міжатомні взаємодії.

Будова атомів і твердих тіл. Типи хімічного зв'язку, міжатомні потенціали та сили взаємодії. Вплив атомної структури на фізичні й механічні властивості матеріалів.

Тема 5. Основні класи сучасних матеріалів: наноматеріали, полімери, функціональні матеріали.

Структура, класифікація та особливості сучасних матеріалів. Основні властивості наноматеріалів, полімерів і функціональних матеріалів, їх застосування та можливості комп'ютерного дослідження.

Тема 6. Основи квантової механіки та статистичної фізики в матеріалознавстві.

Основні положення квантової механіки та статистичної фізики. Енергетичні стани атомів і електронів, статистичні розподіли та термодинамічні характеристики, необхідні для моделювання властивостей матеріалів.

*РОЗДІЛ 3. МЕТОДИ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРИ ТА ВЛАСТИВОСТЕЙ МАТЕРІАЛІВ*

Тема 7. Методи Монте-Карло в матеріалознавстві.

Основні принципи статистичного моделювання методом Монте-Карло. Генерування випадкових станів, моделювання термодинамічної рівноваги та дослідження структурних характеристик матеріалів.

Тема 8. Молекулярна динаміка та методи перших принципів (DFT).

Основи молекулярно-динамічного моделювання руху атомів і молекул. Принципи теорії функціонала густини (DFT), її використання для розрахунку електронної структури, енергії та властивостей матеріалів.

Тема 9. Чисельні методи розрахунків у задачах матеріалознавства.

Основні чисельні методи розв'язання задач матеріалознавства. Методи розв'язання систем рівнянь, чисельного диференціювання, інтегрування та оптимізації. Оцінювання точності й похибок обчислень.

Тема 10. Моделювання структури матеріалів: кристалічні та аморфні стани, дефекти кристалічної ґратки.

Методи побудови та дослідження моделей кристалічних і аморфних матеріалів. Вивчення точкових дефектів, дислокацій, меж зерен та інших структурних неоднорідностей, їхнього впливу на властивості матеріалів.

Тема 11. Моделювання фізичних властивостей: механічних, електричних і теплових.

Комп'ютерні методи дослідження механічних, електричних і теплових характеристик матеріалів. Моделювання деформації, міцності, електропровідності та теплоперенесення. Аналіз залежності властивостей від структури й умов експлуатації.

Тема 12. Принципи цілеспрямованого дизайну матеріалів. Оптимізація складу та структури.

Основні принципи проєктування матеріалів із заданими властивостями. Комп'ютерний пошук перспективних складів і структур, оптимізація параметрів та прогнозування характеристик нових матеріалів.

Тема 13. Обробка та аналіз даних. Обробка, аналіз та візуалізація даних. Інтерпретація результатів комп'ютерного моделювання.

Методи обробки, систематизації та статистичного аналізу результатів моделювання. Графічне представлення даних, побудова залежностей і візуалізація структур. Інтерпретація результатів, оцінювання достовірності та порівняння з експериментальними даними.

**3. Структура навчальної дисципліни**

| Назви розділів | Кількість годин | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | денна форма | | | | | |
| | усього | у тому числі | | | | |
| | | л | п | лаб. | інд. | с. р. |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| **Розділ 1. Вступ до комп'ютерного матеріалознавства** | | | | | | |
| Разом за | 22 | 5 | | 3 | | 14 |
| **Розділ 2. Теоретичні основи моделювання матеріалів** | | | | | | |
| Разом за | 22 | 5 | | 3 | | 14 |
| **Розділ 3. Методи комп'ютерного моделювання структури та властивостей матеріалів** | | | | | | |
| | 46 | 12 | | 5 | | 29 |
| ***Усього годин*** | 90 | 22 | | 11 | | 57 |

**4. Теми курсових робіт.**

Не передбачено навчальним планом

**5. Завдання для самостійної роботи.**

| № з/п | Види, зміст самостійної роботи | Кількість годин |
|---|---|---|
| 1 | Опрацювання основних понять матеріалознавства, класифікації матеріалів та їхніх властивостей. | 4 |
| 2 | Вивчення ролі комп'ютерного моделювання в сучасному матеріалознавстві та його застосування в інженерії й промисловості. | 4 |
| 3 | Опрацювання атомної будови речовини, типів міжатомних взаємодій та їхнього впливу на властивості матеріалів. | 5 |
| 4 | Вивчення структури й властивостей наноматеріалів, полімерів і функціональних матеріалів. | 8 |
| 5 | Опрацювання основ квантової механіки та статистичної фізики, необхідних для моделювання матеріалів. | 5 |
| 6 | Виконання завдань з обробки, статистичного аналізу та візуалізації результатів комп'ютерного моделювання. | 8 |
| 7 | Опрацювання теоретичних основ молекулярної динаміки та методу теорії функціонала густини (DFT). | 5 |
| 8 | Вивчення чисельних методів розрахунків, способів оцінювання точності та похибок обчислень. | 4 |
| 9 | Самостійне опрацювання методів моделювання кристалічних і аморфних структур та дефектів кристалічної ґратки. | 5 |
| 10 | Вивчення методів комп'ютерного моделювання механічних, електричних і теплових властивостей матеріалів. | 5 |
| 11 | Опрацювання принципів цілеспрямованого дизайну матеріалів, оптимізації їхнього складу та структури. | 4 |
| | ***Разом*** | 57 |

**6. Індивідуальні завдання**
Не передбачені навчальним планом.

**7. Методи навчання**

Під час викладання навчальної дисципліни використовуються такі методи навчання: лекції, консультації та підсумковий контроль у формі заліку відповідно до робочої програми дисципліни.

В умовах дії воєнного стану в Україні проведення навчальних занять відповідно до наказів університету може здійснюватися в дистанційному або змішаному форматі. У такому разі застосовуються такі форми організації освітнього процесу:

- Лекції та лабораторні роботи проводяться в онлайн-режимі з використанням платформи Zoom.
- Консультації проводяться в аудиторному або дистанційному форматі з використанням платформ Zoom чи Google Meet.
- Підсумковий контроль (залік) здійснюється в аудиторному або дистанційному форматі з використанням платформи Zoom та системи управління навчанням LMS Moodle.
- Навчально-методичне забезпечення дисципліни розміщується до початку занять на офіційному вебсайті факультету або в системі LMS Moodle, що забезпечує здобувачам освіти доступ до необхідних навчальних матеріалів.

**8. Методи контролю**

У процесі вивчення дисципліни передбачено поточний контроль успішності та семестровий підсумковий контроль. Поточний контроль здійснюється шляхом перевірки виконання лабораторних завдань за відповідними розділами навчальної програми. Семестровий підсумковий контроль проводиться у формі заліку під час залікової сесії наприкінці семестру.

**9. Схема нарахування балів**
Підсумковий семестровий контроль в формі заліку з виконанням залікової роботи

| Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання | | | Залікова робота | Сума балів |
|---|---|---|---|---|
| Поточний контроль | | Активна участь на заняттях | | |
| Розділ 1 Т1 –Т3 Лабораторні роботи | Розділ 2, 3 Т4-Т13 Лабораторні роботи | | | |
| 20 | 30 | 10 | 40 | 100 |

Для допуску до складання підсумкового контролю (заліку, або екзамену) здобувач вищої освіти повинен набрати не менше 10 балів з навчальної дисципліни під час поточного контролю, самостійної роботи, індивідуального завдання.

**Критерії оцінювання навчальних досягнень**

Протягом семестру студент може отримати максимум 60 балів за виконання лабораторних робіт (семестрова оцінка (S)). Лабораторні роботи передбачають засвоєння теоретичних основ комп’ютерного матеріалознавства, набуття практичних навичок використання програмних засобів для моделювання, дослідження та аналізу властивостей матеріалів, а також застосування методів комп’ютерного моделювання для розв’язання наукових і прикладних задач у галузі матеріалознавства.

За кожну лабораторну роботу студент отримує оцінку, яка враховує повноту та правильність виконання завдання, самостійність роботи, коректність застосування програмних засобів і методів моделювання, якість оброблення та аналізу отриманих результатів, обґрунтованість висновків і відповідність оформлення звіту встановленим вимогам.

Оцінювання лабораторних робіт здійснюється за десятибальною шкалою з кроком 1 бал. Кількість балів визначається відповідно до ступеня правильності та повноти виконання завдання. Лабораторна робота вважається виконаною належним чином, якщо студент самостійно виконав передбачені програмою дослідження, правильно застосував відповідні програмні інструменти, продемонстрував уміння аналізувати отримані результати та сформулював обґрунтовані висновки. У разі виявлення академічної недоброчесності під час виконання лабораторної роботи оцінка за відповідне завдання знижується до 0 балів.

Семестрова оцінка (S), виражена в балах за стобальною шкалою, визначається за результатами виконання лабораторних робіт та активної участі на заняттях і становить максимум 60 балів. Порядок її обчислення встановлюється відповідно до кількості лабораторних робіт, їхньої складності та прийнятої системи оцінювання.

Підсумковий контроль з навчальної дисципліни «Комп'ютерне матеріалознавство і дизайн матеріалів» проводиться у формі залікової роботи. За результатами заліку студент може отримати максимум 40 балів (залікова оцінка (E)). Залікові завдання спрямовані на перевірку теоретичних знань з основ комп'ютерного матеріалознавства, методів моделювання та проєктування матеріалів, принципів дослідження взаємозв'язку між структурою, складом і властивостями матеріалів, а також уміння обирати й застосовувати відповідні обчислювальні методи та програмні засоби для аналізу матеріалів і прогнозування їхніх характеристик.

Залікова оцінка визначається залежно від повноти, правильності та обґрунтованості відповідей, розуміння основних теоретичних положень і здатності застосовувати набуті знання для розв'язання практичних та прикладних задач. У разі виявлення академічної недоброчесності під час заліку оцінювання здійснюється відповідно до чинних нормативних документів університету.

Підсумкова оцінка (P) з навчальної дисципліни «Комп'ютерне матеріалознавство і дизайн матеріалів» визначається як сума семестрової оцінки (S) та залікової оцінки (E): $P = S + E$.

Максимальна підсумкова оцінка становить 100 балів. Отримана оцінка переводиться в оцінку за національною шкалою відповідно до затвердженої таблиці переведення балів.

У межах дисципліни застосовуються такі моделі використання ШІ:

1. Модель «ШІ заборонено».

Використання технологій штучного інтелекту не допускається під час виконання контрольних заходів, спрямованих на перевірку індивідуальних знань і сформованості компетентностей здобувача освіти, зокрема: усного опитування, модульних контрольних робіт, екзамену (заліку), якщо інше не визначено викладачем, інших видів оцінювання, для яких викладачем встановлено обмеження щодо використання ШІ.

2. Модель «ШІ як асистент».

Під час підготовки до практичних занять, виконання індивідуальних завдань, рефератів, аналітичних оглядів та інших письмових робіт дозволяється використання ШІ для: пошуку та систематизації інформації, добору та первинного аналізу наукових джерел, пояснення складних понять, удосконалення структури тексту, перевірки граматики, стилю та оформлення, генерації ідей, плану роботи або прикладів.

Фінальний текст роботи, висновки, аналіз, інтерпретація результатів та прийняті рішення повинні бути самостійно підготовлені здобувачем освіти.

3. Модель «ШІ як інструмент».

Для окремих лабораторних, практичних, проєктних або дослідницьких робіт використання технологій штучного інтелекту може бути обов'язковою складовою виконання

завдання. У таких випадках здобувачі освіти можуть використовувати генеративні моделі ШІ для: аналізу та підготовки даних, генерації, аналізу й оптимізації програмного коду, порівняння результатів роботи різних моделей ШІ, створення візуалізацій, схем або зображень, аналізу великих масивів даних. проведення експериментів із застосуванням сучасних інструментів штучного інтелекту.

Усі результати, отримані за допомогою ШІ, підлягають критичному аналізу, перевірці та доопрацюванню здобувачем освіти.

Декларування використання ШІ.

У разі використання технологій штучного інтелекту здобувач освіти зобов'язаний зазначити: назву сервісу або моделі ШІ; дату використання; характер допомоги (генерація ідей, пошук інформації, аналіз даних, генерація коду, редагування тексту тощо).

За вимогою викладача здобувач освіти повинен надати використані запити (prompts) або пояснити спосіб використання інструментів ШІ.

Недекларованe використання технологій штучного інтелекту або подання згенерованого ШІ матеріалу як власного результату навчальної діяльності розглядається як порушення принципів академічної доброчесності відповідно до внутрішніх нормативних документів Університету.

У випадку наявності неформальної освіти вказати платформи, назви курсів та кількість балів, що буде зарахована здобувачеві після успішного проходження відповідних курсів та надання відповідного документа (сертифікат, свідоцтво, тощо).

**Шкала оцінювання**

| Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру | Оцінка | |
|---|---|---|
| | для чотирирівневої шкали оцінювання | для дворівневої шкали оцінювання |
| 90 – 100 | відмінно | зараховано |
| 70-89 | добре | |
| 50-69 | задовільно | |
| 1-49 | незадовільно | не зараховано |

## 10. Рекомендована література

1. Callister W.D., Rethwisch D.G. Materials Science and Engineering: An Introduction. - Wiley, 10th ed., 2018. - 960 p.
2. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. - Oxford: Clarendon Press, 1989. - 385 p.
3. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer Simulation of Liquids. - Oxford University Press, 2nd ed., 2017. - 626–640 p.
4. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. - Academic Press, 2nd ed., 2002. - 638 p.
5. Martin R.M. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. - Cambridge University Press, 2004. - 624 p.

Додаткова література

6. Kittel C. Introduction to Solid State Physics. - Wiley, 8th ed., 2004. - 704 p.
7. Leach A.R. Molecular Modelling: Principles and Applications. - Pearson, 2nd ed., 2001. - 744 p.
8. Raabe D. Computational Materials Science. - Wiley-VCH, 1998. - 392 p.
9. Sutton A.P. Electronic Structure of Materials. - Oxford University Press, 1993. - 256 p.

10. Catlow C.R.A., Parker S.C., Allen M.P. (eds.) Computer Modelling of Fluids, Polymers and Solids. - Springer, 1990. - 540 p.
11. «Комп'ютерні технології в матеріалознавстві : навч.-метод. посібник» / О. Є. Бармін, О. В. Соболь, І. М. Колупаєв та ін. – Харків : Золоті сторінки, 2018. Містить лабораторно-навчальні роботи з дослідження структури та властивостей матеріалів за допомогою комп'ютерного софту.
12. «Комп'ютерне моделювання структури металевих матеріалів : навч. посіб.» / уклад.: Г. Г. Лобачова, Є. В. Іващенко. — Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2024.

## 11. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. **MIT OpenCourseWare – Introduction to Modeling and Simulation.** Навчальні матеріали, відеолекції та практичні завдання з комп'ютерного моделювання фізичних процесів, атомістичного й молекулярного моделювання та квантово-механічних методів дослідження матеріалів. https://ocw.mit.edu/courses/3-021j-introduction-to-modeling-and-simulation-spring-2012/
2. **Materials Project.** Інформаційна платформа для пошуку й аналізу даних про кристалічні структури, фізичні та хімічні властивості неорганічних матеріалів. Може використовуватися для виконання лабораторних робіт із дослідження властивостей матеріалів і порівняння результатів комп'ютерного моделювання з довідковими даними. https://materialsproject.org/
3. **AiiDA.** Automated Interactive Infrastructure and Database for Computational Science. Програмне середовище для організації, автоматизації та документування обчислювальних досліджень, зокрема моделювання матеріалів і збереження результатів розрахунків. https://www.aiida.net/
4. **«Комп'ютерне моделювання матеріалів»** – україномовна відеолекція від КНУ ім. Тараса Шевченка на YouTube, яка чудово вводить у проблематику сучасного матеріалознавства. https://www.youtube.com/watch?v=tJVIwiy_jy0
5. **David Tong: Solid State Physics (University of Cambridge)** – конспекти світового рівня, які детально розглядають кристалічні ґратки, теорію сильного зв'язку (tight-binding) та фононні спектри, що є фундаментом для чисельного моделювання. https://davidtong.org/teaching/solid-state-physics/
6. Навчальні курси, відеолекції та методичні матеріали з розрахунку електронної структури кристалів, зонної структури, густини електронних станів і фізичних властивостей твердих тіл на основі теорії функціонала густини. https://www.quantum-espresso.org/learn/
7. **Computational Materials Physics.** Відкритий навчальний курс із комп'ютерного моделювання матеріалів, що містить відеолекції, навчальні тексти та завдання з розрахунків властивостей матеріалів із перших принципів. https://www.compmatphys.org/
8. **MIT 18.337J: Physics-Informed Machine Learning** – відкриті лекції та матеріали Массачусетського технологічного інституту, присвячені диференційованому програмуванню та інтеграції фізичних законів у ШІ. https://computationalthinking.mit.edu/Fall24/
9. **Інше навчально-методичне забезпечення:** конспект лекцій; електронні презентації; методичні рекомендації до виконання дабораторних робіт; індивідуальні завдання з комп'ютерного моделювання фізичних процесів; приклади програмного коду; вихідні дані для обчислювальних експериментів; інструкції з використання програмних комплексів; відеозаписи демонстрацій моделювання; завдання для самостійної роботи та контрольні запитання для перевірки засвоєння навчального матеріалу.