



## СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ «КОМП'ЮТЕРНЕ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО В ТЕРМОЕЛЕКТРИЦІ»

Компонента освітньої програми – вибіркова (4 кредити)

Освітньо-наукова програма	Прикладна фізика та наноматеріали
Спеціальність	Е6 Прикладна фізика та наноматеріали
Галузь знань	Е Природничі науки, математика та статистика
Рівень вищої освіти	третій (освітньо-науковий)
Мова навчання	українська
Профайл викладача	Черкез Радіон Георгійович - професор, доктор фізико-математичних наук, професор кафедри термоелектрики та медичної фізики <a href="https://termo.chnu.edu.ua/pro-nashu-kafedru/spivrobitnyky/cherkez-radion-heorhiiovych/">https://termo.chnu.edu.ua/pro-nashu-kafedru/spivrobitnyky/cherkez-radion-heorhiiovych/</a>
Контактний тел.	+380503746440
E-mail:	<a href="mailto:r.cherkez@chnu.edu.ua">r.cherkez@chnu.edu.ua</a>
Сторінка курсу в Moodle	<a href="https://moodle.chnu.edu.ua/course/view.php?id=2785">https://moodle.chnu.edu.ua/course/view.php?id=2785</a>
Консультації	<i>Очні консультації:</i> за попередньою домовленістю. <i>Онлайн-консультації:</i> згідно погодженого графіку

### АНОТАЦІЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Дисципліна «Комп'ютерне матеріалознавство в термоелектриці» охоплює сучасні методи комп'ютерного моделювання та теоретичного дослідження термоелектричних матеріалів на атомному та електронному рівнях. Особлива увага приділяється застосуванню методів теорії функціоналу густини (DFT), молекулярної динаміки та квантово-механічних розрахунків для прогнозування термоелектричних властивостей матеріалів. Курс включає практичні аспекти використання програмних пакетів для моделювання електронної структури, фононних властивостей та транспортних характеристик термоелектричних сплавів та наноструктур.

### НАВЧАЛЬНИЙ КОНТЕНТ ОСВІТНЬОЇ КОМПОНЕНТИ

МОДУЛЬ 1. Теоретичні основи комп'ютерного матеріалознавства	
Тема 1	Основи квантово-механічного моделювання матеріалів. Рівняння Шредінгера для багатоелектронних систем, наближення Борна-Оппенгеймера, базисні набори та псевдопотенціали.
Тема 2	Теорія функціоналу густини (DFT) для термоелектричних матеріалів. Теореми Гогенберга-Кона, функціонали обміну-кореляції, розрахунок електронної структури та енергетичних характеристик.

<b>Тема 3</b>	Методи розрахунку транспортних властивостей. Теорія Больцмана, електронна провідність, коефіцієнт Зеебека, теплопровідність решітки, фігура якості ZT.
<b>МОДУЛЬ 2. Практичні аспекти моделювання термоелектричних матеріалів</b>	
<b>Тема 4</b>	Моделювання електронної структури термоелектричних матеріалів. Використання VASP та Quantum ESPRESSO для розрахунку зонної структури, густини станів, ефективних мас носіїв заряду.
<b>Тема 5</b>	Фононні властивості та теплопровідність решітки. Розрахунок фононних спектрів, дисперсійних кривих, теплопровідності методами молекулярної динаміки (LAMMPS).
<b>Тема 6</b>	Дизайн нових термоелектричних матеріалів. Високопродуктивні обчислення (HPC), скрінінг матеріалів, оптимізація складу сплавів, прогнозування властивостей наноструктурованих термоелектричних матеріалів.

### **ОСВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ, ФОРМИ ТА МЕТОДИ НАВЧАННЯ**

Дисципліною передбачене проведення лекцій та практичних занять. Самостійна робота, пов'язана з опрацюванням матеріалу лекцій, розробкою програм для розв'язання фізичних задач. Для досягнення освітньої мети й прогнозованих програмних результатів у дисципліні **«Комп'ютерне матеріалознавство в термоелектриці»** можуть використовуватись інноваційні освітні технології: інформаційно-комунікаційні, технології студентоцентрованого навчання; проєктна діяльність; традиційні та інтерактивні форми і методи навчання, серед яких: лекція-візуалізація, проблемна лекція, робота в малих групах та тренінги, методи проєктів, кейс-метод, метод «мозкового штурму», ділова гра, рольова гра та інші освітні технології. Частина тем може бути зараховано за результатами неформальної чи інформальної освіти

### **ФОРМИ Й МЕТОДИ КОНТРОЛЮ ТА ОЦІНЮВАННЯ**

**Поточний контроль:** усні та письмові (тестування) відповіді студента.

**Підсумковий контроль** – залік.

### **КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ**

Оцінювання програмних результатів навчання здобувачів освіти здійснюється за шкалою європейської кредитно-трансферної системи (ECTS).

Критерієм успішного оцінювання є досягнення здобувачем вищої освіти мінімальних порогових рівнів (балів) за кожним запланованим результатом навчання.

### **ПОЛІТИКА ЩОДО АКАДЕМІЧНОЇ ДОБРОЧЕСНОСТІ**

Дотримання політики щодо академічної доброчесності учасниками освітнього процесу під час вивчення навчальної дисципліни регламентовано:

✓ «Етичним кодексом Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича» <https://www.chnu.edu.ua/media/bkyl5klw/etychnyi-kodeks-chernivetskoho-natsionalnoho-universytetu.pdf>

✓ «Положенням про виявлення та запобігання академічному плагиату у Чернівецькому національному університеті імені Юрія Федьковича» <https://www.chnu.edu.ua/media/hkzbr1b2/polozhennia-pro-vyivlennia-ta-zapobihannia-akademichnomu-plahiatu-u-chnu-2025.pdf>

## ІНФОРМАЦІЙНІ РЕСУРСИ

1. Wei Y., Liu Z., Qin G. Prediction methods for phonon transport properties of inorganic crystals: from traditional approaches to artificial intelligence [Електронний ресурс]. – Nanoscale Horizons, 2025. – Режим доступу: [https://www.researchgate.net/publication/385374991\\_Prediction\\_methods\\_for\\_Phonon\\_Transport\\_Properties\\_of\\_Inorganic\\_Crystals\\_from\\_Traditional\\_Approaches\\_to\\_Artificial\\_Intelligence](https://www.researchgate.net/publication/385374991_Prediction_methods_for_Phonon_Transport_Properties_of_Inorganic_Crystals_from_Traditional_Approaches_to_Artificial_Intelligence) .
2. Ming H., Kanatzidis M. G. Strategies and Prospects for High-Performance Te-Free Thermoelectric Materials [Електронний ресурс]. – Chemical Reviews, 2025. – Режим доступу: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.chemrev.4c00786> .
3. Quan Y., Yue S., Liao B. Impact of Electron-Phonon Interaction on Thermal Transport: A Review [Електронний ресурс]. – arXiv preprint, 2021. – Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/2102.01827> .
4. Zhang Y. et al. High-throughput screening of ordered vacancy compounds  $A_{<M>_2X_4}$  for high-performance flexible thermoelectric materials [Електронний ресурс]. – Physical Review B, 2025. – Режим доступу: <https://journals.aps.org/prb/accepted/0c0730ffPd1fc5b60804757ac6e37f8a9255784e> .
5. Wang H. et al. High-throughput discovery of metal oxides with high thermoelectric performance via interpretable feature engineering on small data [Електронний ресурс]. – arXiv preprint, 2024. – Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/2404.19613> .
6. Guo J. et al. Identifying Highly Deformable van der Waals Layered Chalcogenides with Superior Thermoelectric Performance Using Deformability Factors and Interpretable Machine Learning [Електронний ресурс]. – arXiv preprint, 2024. – Режим доступу: <https://arxiv.org/abs/2410.05658> .
7. Li J. et al. Machine-learning potential for phonon transport in AlN with defects in multiple charge states [Електронний ресурс]. – Physical Review Materials, 2024. – Режим доступу: <https://journals.aps.org/prmaterials/pdf/10.1103/PhysRevMaterials.9.034601> .
8. Liu S., Zhang Q. First-principles investigations on the thermal transport and thermoelectric properties of antiperovskite  $M_3OI$  and  $M_4OI_2$  ( $M = K, Rb$ ) [Електронний ресурс]. – Frontiers in Physics, 2025. – Режим доступу: <https://www.frontiersin.org/journals/physics/articles/10.3389/fphy.2025.1619661/full> .
9. Chen Z. et al. Achieving high thermoelectric performance of Triple Half-Heusler compositions enabled by high-throughput screening [Електронний ресурс]. – J. Mater. Chem. A, 2025. – Режим доступу: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2025/ta/d5ta05156h> .
10. Tang Y. et al. Screening thermoelectric materials for high-output performance in wearable electronics [Електронний ресурс]. – Energy & Environmental Science, 2025. – Режим доступу: <https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2025/ee/d5ee00216h> .
11. Lv S. et al. A Comprehensive Review of Strategies and Approaches for Enhancing the Performance of Thermoelectric Module [Електронний ресурс]. – Energies, 2020. – Режим доступу: [https://www.researchgate.net/publication/342250340\\_A\\_Comprehensive\\_Review\\_of\\_Strategies\\_and\\_Approaches\\_for\\_Enhancing\\_the\\_Performance\\_of\\_Thermoelectric\\_Module](https://www.researchgate.net/publication/342250340_A_Comprehensive_Review_of_Strategies_and_Approaches_for_Enhancing_the_Performance_of_Thermoelectric_Module) .
12. Sun Y., Zhang B., Wang H. Strategies to Improve the Thermoelectric Figure of Merit in Materials [Електронний ресурс]. – Frontiers in Chemistry, 2022. – Режим доступу: <https://www.frontiersin.org/journals/chemistry/articles/10.3389/fchem.2022.865281/full> .
13. Liu Z., Qin G. Unleashing the power of artificial intelligence in phonon thermal transport: Current challenges and prospects [Електронний ресурс]. – ResearchGate Preprint, 2024. – Режим доступу: [https://www.researchgate.net/publication/380412478\\_Unleashing\\_the\\_power\\_of\\_artificial\\_intelligence\\_in\\_phonon\\_thermal\\_transport\\_Current\\_challenges\\_and\\_prospects](https://www.researchgate.net/publication/380412478_Unleashing_the_power_of_artificial_intelligence_in_phonon_thermal_transport_Current_challenges_and_prospects) .
14. The Materials Project [Електронний ресурс]. – Матеріалознавча база даних відкритого доступу. – Режим доступу: <https://materialsproject.org> .
15. Open Quantum Materials Database (OQMD) [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://oqmd.org> .
16. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://lammps.sandia.gov> .
17. Анатичук Л.І., Кобилянський Р.Р., Федорів Р.В. Комп'ютерне моделювання циклічного температурного впливу. Термоелектрика, №2, 2020. Режим доступу: <http://jte.ite.cv.ua/index.php/jt/article/view/61> .
18. Основи комп'ютерного моделювання з перших принципів — навчальний посібник (PNU), 2023. Режим доступу: <https://kmint.pnu.edu.ua/wp-content/uploads/sites/49/2023/04/osnovy-kompiuternoho-modeliuvannia-z-pershykh-pryntsyviv.pdf>

*Детальна інформація щодо вивчення курсу «Комп'ютерне матеріалознавство в термоелектриці» висвітлена у робочій програмі навчальної дисципліни*

[https://termo.chnu.edu.ua/media/y4adv0zg/vk13\\_komp\\_iuterne\\_materialoznavstvo\\_v\\_termoel\\_ektrytsi\\_rp\\_e6\\_nova.pdf](https://termo.chnu.edu.ua/media/y4adv0zg/vk13_komp_iuterne_materialoznavstvo_v_termoel_ektrytsi_rp_e6_nova.pdf)