



**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ  
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ  
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»  
ІНСТИТУТ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВА ТА ЗВАРЮВАННЯ  
імені Є. О. ПАТОНА**



**ЗАТВЕРДЖЕНО:**

Методичною радою  
КПІ ім. Ігоря Сікорського  
(протокол № 5 від «29» лютого 2024 р.)

**Ф-КАТАЛОГ  
ВИБІРКОВИХ НАВЧАЛЬНИХ ДИСЦИПЛІН**

**для здобувачів ступеня доктора філософії  
за освітньо-науковою програмою  
Матеріалознавство  
за спеціальністю 132 Матеріалознавство  
(вступ 2023 року)**

**УХВАЛЕНО:**

Вченою радою навчально-наукового інституту  
матеріалознавства та зварювання імені Є. О.  
Патона КПІ ім. Ігоря Сікорського  
(протокол №1/24 від «25» січня 2024 р.)

Відповідно до розділу X статті 62 Закону України «Про вищу освіту» (№ 1556-VII від 01.07.2014 р.), вибіркові дисципліни – дисципліни вільного вибору студентів для певного рівня вищої освіти, спрямовані на забезпечення загальних та спеціальних (фахових) компетенцій за спеціальністю. Обсяг вибіркових навчальних дисциплін становить не менше 25% від загальної кількості кредитів ЄКТС, передбачених для даного рівня освіти.

Вибір дисциплін, що забезпечують загальні компетенції здійснюється відповідно до Положення про реалізацію права на вільний вибір навчальних дисциплін здобувачами вищої освіти КПІ ім. Ігоря Сікорського із загальноуніверситетського каталогу в системі «[my.kpi.ua](http://my.kpi.ua)».

Вибір дисциплін, що забезпечують спеціальні (фахові) компетенції, здійснюється з кафедрального Ф-Каталогу в системі «[my.kpi.ua](http://my.kpi.ua)».

Ф-Каталог містить анотований перелік дисциплін, які пропонуються для обрання студентами третього(наукового) рівня вищої освіти згідно навчального плану на наступний навчальний рік.

## ЗМІСТ

2-Й РІК НАВЧАННЯ.....	4
ФІЗИКА СПІКАННЯ .....	4
НАНОСТРУКТУРНІ ТА НАНОКРИСТАЛІЧНІ МАТЕРІАЛИ .....	5
МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ МЕТАЛІВ ТА СПЛАВІВ .....	6
ПРИНЦИПИ І МАТЕРІАЛИ АДИТИВНОГО ВИРОБНИЦТВА.....	7
ФІЗИЧНА ХІМІЯ ПРОЦЕСІВ ЗМОЧУВАННЯ .....	8
ФІЗИКА МІЦНОСТІ КОМПОЗИЦІЙНИХ МАТЕРІАЛІВ .....	9
КРИСТАЛОГРАФІЯ ТА РЕНТГЕНІВСЬКІ ДОСЛІДЖЕННЯ .....	10
ЕПІТАКСІЙНІ ГЕТЕРОСТРУКТУРИ .....	11
АТОМІСТИЧНА ІНФОРМАТИКА МАТЕРІАЛІВ .....	12
ТЕОРІЯ КРИСТАЛІЗАЦІЇ .....	14
АНОМАЛЬНЕ МАСОПЕРЕНЕСЕННЯ .....	15

## 2-й рік навчання

Дисципліна	<b>Фізика спікання</b>
Рівень ВО	Третій (науковий)
Курс	2
Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи	4 кредити/120 год 39 год аудиторних/81 год самостійної роботи
Мова викладання	Українська
Кафедра	<b>Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії</b>
Вимоги до початку вивчення	Студенти повинні мати знання з таких дисциплін як інженерне матеріалознавство, фундаментальні засади теорії та технології порошкових композиційних матеріалів
Що буде вивчатися	Розглядається фізико-хімічна сутність та аналітичний опис процесів спікання як: - фізико-хімічного процесу; - структуроутворюючого процесу; - технологічного процесу
Чому це цікаво/треба вивчати	Вивчаючи дисципліну, студенти узагальнюють власні знання з різних дисциплін та формують більш глибоке розуміння процесів спікання порошкових виробів базується на фундаментальних законах хімії, фізичної хімії, фізики, конденсованого стану, термодинамічних та кінетичних засад створення матеріалів.
Чому можна навчитися (результати навчання)	У розгляді процесу спікання як фізико-хімічного процесу викладається кінетика процесу спікання як реологічного процесу під дією капілярного тиску. Надається характеристика процесу спікання як дифузійному процесу, наслідком якого є контактне припікання частинок за рахунок об'ємної дифузії вакансій, пікання за рахунок дифузійної коалесценції пор зумовленої градієнтом концентрації вакансій. Розглядається спікання за механізмом пластичної течії. Аналітичний опис процесу спікання за Дж. Маккензі і Р. Шатлворса та Б. Ларсмахера і З. Шольца. Фізична модель та аналітичний опис процесу спікання гарячим пресуванням як пластичної течії за М.С. Ковальченком під час ущільнення в прес-формах, гарячому штампуванні та гарячій прокатці порошкових матеріалів. У розгляді процесу спікання як структуроутворюючого процесу викладаються закономірності консолідації дисперсної системи у суцільне тіло.
Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)	Після засвоєння навчальної дисципліни студент розширює професійні компетентності: Здатність розробляти проекти виробничих технологічних процесів виготовлення виробів з сучасних матеріалів традиційними та генеративними методами, Здатність на основі фундаментальних та спеціальних знань проєктувати та створювати нові матеріали за даного функціонального призначення.
Інформаційне забезпечення	Силабус, конспект лекцій
Форма проведення занять	Лекції, практичні роботи
Семестровий контроль	<b>Залік</b>

<b>Дисципліна</b>	<b>Наноструктурні та нанокристалічні матеріали</b>
<b>Рівень ВО</b>	Третій (науковий)
<b>Курс</b>	2
<b>Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи</b>	4 кредити/120 год 39 год аудиторних/81 год самостійної роботи
<b>Мова викладання</b>	Українська
<b>Кафедра</b>	<b>Фізичного матеріалознавства та термічної обробки</b>
<b>Вимоги до початку вивчення (міждисциплінарні зв'язки)</b>	Знання з загальної фізики, фізичної хімії, теорії тепло- та масопереносу в матеріалах, кристалографії, кристалохімії та мінералогії.
<b>Що буде вивчатися</b>	Особливості структури і будови, сфери застосування наноструктурних та нанокристалічних матеріалів. Вплив фактору нанорозмірності на фізичні явища та властивості, виникнення нових ефектів у наноструктурах; фізичні процеси, які відбуваються у матеріалах під дією інтенсивних теплових та деформаційних впливів.
<b>Чому це цікаво/треба вивчати</b>	Можна отримати знання теоретичного і експериментального характеру щодо процесів формування та еволюції структури і властивостей об'ємів матеріалів в нано- і субнанорозмірних діапазонах. Як саме із використанням новітніх аналітично-дослідницьких можливостей мають конструюватися нові моделі структуро- і фазоутворення – нові в порівнянні з тими, які неможливо було розвинути в минулому в традиційних технологіях масивних полікристалічних матеріалів. Нановіскери і максени, нанопористі матеріали і нанооболонки, фрактальні і впорядковані коміркові наноструктури, мультишари і «розумні» наноматеріали – це ті об'єкти, які не тільки цікаво, але і потрібно вивчати.
<b>Чому можна навчитися (результати навчання)</b>	Можна навчитися тому, як багатокomпонентність, багат шаровість і нанорозмірність, наноструктурованість і нанофазність, екстремальні впливи в процесах отримання і обробки (енергетична активація через термічні і лазерні впливи, бомбардування зарядженими і нейтральними частками, зовнішні поля, введення домішок, легування) можуть використовуватися для спрямованого формування структури і властивостей в технологіях створення наноматеріалів майбутнього.
<b>Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)</b>	Потреби створення матеріалів з новими властивостями – за вимог мініатюризації в VI-VII технологічних укладах – обумовлюють необхідність поглиблення уявлень про формування структури і властивостей матеріалів: від процесів на мезорівні до процесів на наномасштабних, субнано- і пікомасштабних рівнях. Ці сфери новітнього фундаментального матеріалознавства є виключно затребуваними як в науковому, так і в практичному відношенні.
<b>Інформаційне забезпечення</b>	Силабус дисципліни, презентації, посилання на корисну інформацію в інтернет, контрольні питання та завдання, classroom
<b>Форма проведення занять</b>	Лекції, практичні заняття. Онлайн / офлайн
<b>Семестровий контроль</b>	<b>Залік</b>

<b>Дисципліна</b>	<b>Методи дослідження металів та сплавів</b>
<b>Рівень ВО</b>	Третій (науковий)
<b>Курс</b>	2
<b>Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи</b>	4 кредити/120 год 39 год аудиторних/81 год самостійної роботи
<b>Мова викладання</b>	Українська
<b>Кафедра</b>	<b>Фізичного матеріалознавства та термічної обробки</b>
<b>Вимоги до початку вивчення</b>	Знання курсів «Матеріалознавство», «Методи структурного аналізу матеріалів», «Нові матеріали та методи дослідження» в обсязі викладання в НН ІМЗ ім. Є. О. Патона НТУУ «КПІ ім. Ігоря Сікорського»
<b>Що буде вивчатися</b>	Предмет навчальної дисципліни вивчає сучасні підходи до постановки дослідницького експерименту на новітньому обладнанні. Значна увага приділяється комп'ютерній обробці одержаних результатів дослідження за допомогою відповідних програмних комплексів
<b>Чому це цікаво/треба вивчати</b>	Освоєння сучасних програмних комплексів по збору та обробці експериментальних даних дозволить правильно трактувати одержані наукові результати та з легкістю самостійно працювати на інших складних дослідницьких комплексах, зокрема під час стажування за кордоном
<b>Чому можна навчитися (результати навчання)</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Експресно оцінювати можливий фазовий склад досліджуваних зразків та вигляд дифракційних картин перед проведенням експерименту.</li> <li>- Оволодіти навиками розрахунку фазових діаграм та властивостей матеріалу за допомогою програми Thermo-Calc</li> <li>- Прогнозувати фазовий склад та залежність механічних властивостей сплавів від температури, виходячи з хімічного складу.</li> <li>- Прогнозувати зміну механічних властивостей сплавів у залежності від температури під час легування.</li> <li>- Користуватися програмним комплексом дифрактометра UltimaIV фірми Rigaku для самостійного проведення дифракційного експерименту.</li> <li>- Вмінню користуватися сучасними базами даних по властивостях та структурі матеріалів</li> </ul>
<b>Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)</b>	Розв'язувати питання пов'язані зі способами одержання високоміцних станів та взаємозв'язку фазових рівноваг з діаграмами міцність-склад. Проводити розробку жаростійких сплавів, аморфних матеріалів і високоентропійних сплавів.
<b>Інформаційне забезпечення</b>	Силабус, конспект лекцій
<b>Форма проведення занять</b>	Лекції, практичні заняття
<b>Семестровий контроль</b>	<b>Залік</b>

<b>Дисципліна</b>	<b>Принципи і матеріали адитивного виробництва</b>
<b>Рівень ВО</b>	Третій (доктор філософії)
<b>Курс</b>	2
<b>Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи</b>	4 кредити/120 год 39 год аудиторних/81 год самостійної роботи
<b>Мова викладання</b>	Українська
<b>Кафедра</b>	<b>Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії</b>
<b>Вимоги до початку вивчення</b>	Вивчення дисципліни базується на засвоєнні курсів «Фізика», «Хімія», «Фізичне матеріалознавство», «Фізика конденсованого стану».
<b>Що буде вивчатися</b>	Вивчаючи дисципліну, аспіранти отримують знання, що стосуються вивчення технологічних процесів виготовлення та застосування матеріалів для адитивного призначення.
<b>Чому це цікаво/треба вивчати</b>	Вивчаючи дисципліну, здобувачі зможуть обґрунтовано здійснювати вибір матеріалів для конкретних умов експлуатації; застосовувати спеціалізовані концептуальні знання новітніх методів та методик моделювання, розробки та дослідження матеріалів
<b>Чому можна навчитися (результати навчання)</b>	Здобувач може вивчити технічні характеристики та економічні показники кращих вітчизняних і світових адитивних технологій виготовлення матеріалів та виробів з них
<b>Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)</b>	Застосовувати принципи проектування нових матеріалів, розробляти та використовувати фізичні та математичні моделі матеріалів та процесів; Розробляти нові методи і методики досліджень матеріалів та процесів на базі знань з методології наукового дослідження та специфіки проблеми, що вирішується; Використовувати експериментальні методи дослідження структурних, фізико-механічних, електрофізичних, магнітних, оптичних і технологічних властивостей матеріалів
<b>Інформаційне забезпечення</b>	Силабус, Конспект лекцій
<b>Форма проведення занять</b>	Лекції, практичні заняття Онлайн / офлайн
<b>Семестровий контроль</b>	<b>Залік</b>

<b>Дисципліна</b>	<b>Фізична хімія процесів змочування</b>
<b>Рівень ВО</b>	Третій (науковий)
<b>Курс</b>	2
<b>Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи</b>	4 кредитів/120 год 36 год аудиторні заняття/84 год самостійна робота
<b>Мова викладання</b>	Українська
<b>Кафедра</b>	<b>Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії</b>
<b>Вимоги до початку вивчення</b>	Вивчення дисципліни базується на засвоєнні курсів «Фізика», «Хімія», «Фізична хімія», «Фізичне матеріалознавство»
<b>Що буде вивчатися</b>	Вивчаючи дисципліну, аспіранти отримують знання, що стосуються процесів змочування та капілярних явищ в твердих і рідких фазах, визначають контактні реакції, що обумовлюють технологічні властивості ряду систем при виробництві матеріалів
<b>Чому це цікаво/треба вивчати</b>	Вивчаючи дисципліну, здобувачі зможуть обґрунтовано здійснювати вибір матеріалів для конкретних умов експлуатації; застосовувати спеціалізовані концептуальні знання новітніх методів та методик моделювання, розробки та дослідження матеріалів
<b>Чому можна навчитися (результати навчання)</b>	Здобувач може вивчити закономірності керування складом, структурою та властивостями матеріалів різної природи та функціонального призначення з урахуванням процесів змочування та капілярних явищ в твердих і рідких фазах, що обумовлюють технологічні властивості ряду систем при виробництві матеріалів та визначають хід, швидкість і саму можливість протікання процесу одержання матеріалу, його структуру і характеристики.
<b>Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)</b>	Застосовувати принципи проектування нових матеріалів, розробляти та використовувати фізичні та математичні моделі матеріалів та процесів; Розробляти нові методи і методики досліджень матеріалів та процесів на базі знань з методології наукового дослідження та специфіки проблеми, що вирішується; Використовувати експериментальні методи дослідження структурних, фізико-механічних, електрофізичних, магнітних, оптичних і технологічних властивостей матеріалів
<b>Інформаційне забезпечення</b>	Силабус, конспект лекцій
<b>Форма проведення занять</b>	Лекції, практичні роботи
<b>Семестровий контроль</b>	<b>Залік</b>



<b>Дисципліна</b>	<b>Фізика міцності композиційних матеріалів</b>
<b>Рівень ВО</b>	Третій (науковий)
<b>Курс</b>	2
<b>Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи</b>	4 кредитів/120 год 36 год аудиторні заняття/84 год самостійна робота
<b>Мова викладання</b>	українська
<b>Кафедра</b>	<b>Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії</b>
<b>Вимоги до початку вивчення</b>	Дисципліни, знання з яких необхідні для вивчення кредитного модуля “Механічні властивості керамічних композиційних матеріалів”: <ul style="list-style-type: none"> <li>- матеріалознавство тугоплавких матеріалів;</li> <li>- інженерне матеріалознавство;</li> <li>- порошкові та композиційні матеріали для медицини;</li> </ul> матеріали авіаційної та космічної техніки.
<b>Що буде вивчатися</b>	Основні закономірності механічної поведінки керамічних композиційних матеріалів і вплив на неї різних факторів: атомно-кристалічної будови, структури, методу отримання, виду навантаження, навколишнього середовища, тощо.
<b>Чому це цікаво/треба вивчати</b>	Вивчаючи дисципліну, студенти узагальнюють власні знання з різних дисциплін та набувають навички експериментально визначати, теоретично аналізувати та прогнозувати фізико-механічні властивості керамічних композиційних матеріалів в залежності від їх хімічного складу, природи хімічного зв'язку, атомної та мікроструктури
<b>Чому можна навчитися (результати навчання)</b>	Експериментально визначати, теоретично аналізувати та прогнозувати фізико-механічні властивості керамічних композиційних матеріалів, в залежності від їх хімічного складу, природи хімічного зв'язку, атомної та мікроструктури, напружено-деформованого стану та оцінювати поведінку матеріалів під дією напружень, при нагріванні та хімічній взаємодії, проводити контроль якості матеріалів та технологій в області матеріалознавства та металургії
<b>Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)</b>	Знання, що студент отримає під час вивчення дисципліни “Механічні властивості керамічних композиційних матеріалів” необхідні для поглибленої підготовки, виконання і підготовки до захисту дисертаційної роботи
<b>Інформаційне забезпечення</b>	Силабус, конспект лекцій
<b>Форма проведення занять</b>	Лекції, практичні заняття
<b>Семестровий контроль</b>	<b>Залік</b>

Дисципліна	<b>Кристалографія та рентгенівські дослідження</b>
Рівень ВО	Третій (науковий)
Курс	2
Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи	4 кредитів/120 год 36 год аудиторні заняття/84 год самостійна робота
Мова викладання	Українська
Кафедра	<b>Фізичного матеріалознавства та термічної обробки</b>
Вимоги до початку вивчення	Знання курсів «Матеріалознавство», «Кристалографія, кристалохімія та мінералогія», «Дефекти кристалічної будови матеріалів» в обсязі викладання в НН ІМЗ ім. Є.О. Патона НТУУ «КПІ ім. І. Сікорського»
Що буде вивчатися	Предметнавчальної дисципліни вивчає вибрані питання структурної кристалографії в прикладному аспекті рентгеноструктурних досліджень з використанням програмних комплексів по збору наукової інформації та її обробці, зокрема методом Рітвельда.
Чому це цікаво/треба вивчати	Для розв'язання структурних задач в сучасному матеріалознавстві при наявності багатофазних станів необхідно використовувати повнопрофільний аналіз одержаних дифракційних картин. Це передбачає освоєння певних програмних комплексів з введенням відповідної кристалоструктурної інформації
Чому можна навчитися (результати навчання)	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Оволодіти навиками розрахунку теоретичних дифрактограм, виходячи з кристало-геометричних даних елементарної комірки.</li> <li>- Розраховувати кількісний фазовий склад досліджуваних зразків методом еталонів та методом корундових чисел.</li> <li>- Освоїти методику безеталонного кількісного фазового аналізу з використанням повнопрофільного аналізу методом Рітвельда.</li> <li>- Коректно оцінювати похибки експерименту при проведенні кількісного фазового аналізу різними методами.</li> <li>- Проводити дослідження зразків з врахуванням наявності в них текстури різної природи.</li> <li>- Користуватися програмним комплексом дифрактометра UltimalV фірми Rigaku для самостійного проведення дифракційного експерименту.</li> <li>- Вмінню користуватися сучасними дифракційними та кристало-структурними базами даних матеріалів і сполук.</li> </ul>
Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)	Розв'язувати питання пов'язані зі способами одержання високоміцних станів та взаємозв'язку фазових рівноваг з діаграмами міцність-склад. Проводити розробку жаростійких сплавів, аморфних матеріалів і високоентропійних сплавів.
Інформаційне забезпечення	Силабус, Конспект лекцій
Форма проведення занять	Лекції, практичні заняття. Онлайн / офлайн
Семестровий контроль	<b>Залік</b>

Дисципліна	<b>Епітаксійні гетероструктури</b>
Рівень ВО	Третій (науковий)
Курс	2
Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи	4 кредитів/120 год 36 год аудиторні заняття/84 год самостійна робота
Мова викладання	Українська
Кафедра	<b>Фізичного матеріалознавства та термічної обробки</b>
Вимоги до початку вивчення	Дисципліна базується на курсах: "Хімія", "Фізика", "Кристалографія, кристалохімія та мінералогія", "Фізичні властивості та методи дослідження матеріалів", "Вища математика".
Що буде вивчатися	Освітній компонент присвячений закономірностям фізичних процесів, що відбуваються у плівкових композиціях нанометрових товщин, отриманих шляхом вирощування на монокристалічних підкладках. В рамках курсу будуть розглянуті: – основні способи отримання плівкових гетероструктур; – формування необхідних властивостей плівкових гетероструктур шляхом зміни: товщин, послідовності розташування, кількості шарів, методів та параметрів осадження; – вплив на фазовий склад, структуру і властивості плівкових гетероструктур хімічного фактору (легуючі елементи, забруднюючі домішки), структурного фактору (розмір зерен та їх орієнтація), технологічного фактору (параметри термічної обробки, параметри підкладки), нанорозмірного фактору (вплив поверхневої енергії).
Чому це цікаво/треба вивчати	Матеріали представлені в курсі є науковою базою для розуміння технологій виготовлення нанорозмірних елементів сучасного мікроприладобудування. Ці знання, та розуміння фізичних законів, які діють на наномасштабному рівні, є необхідною вимогою для фахівців найвищого рівня у сфері матеріалознавства.
Чому можна навчитися (результати навчання)	– отримувати плівкові нанорозмірні гетероструктури в монокристалічному, аморфному, метастабільному, високодефектному, градієнтному станах з потрібними властивостями; – використовувати впливи різних факторів на фазовий склад, структуру та властивості нанорозмірних плівок при отриманні функціональних елементів мікроелектроніки, мікроприладобудування. спінтроніки.
Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)	Обирати матеріали, технології отримання та обробки для виготовлення нанорозмірних плівкових гетероструктурних композицій с заданим фазовим складом, структурою та властивостями на основі отриманих знань, науково-технічної документації, матеріалознавчих баз даних, сучасного світового досвіду.
Інформаційне забезпечення	Силабус, конспект лекцій, мультимедійні презентації
Форма проведення занять	Лекції , практичні заняття
Семестровий контроль	Залік

Дисципліна	<b>Атомістична інформатика матеріалів</b>
Рівень ВО	Третій (науковий)
Курс	2
Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи	4 кредитів/120 год 36 год аудиторні заняття/84 год самостійна робота
Мова викладання	Українська
Кафедра	<b>Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії</b>
Вимоги до початку вивчення	Базові поняття вищої математики (лінійна алгебра, математичний аналіз, математична статистика) та інформатики. Засвоєння матеріалу курсів: «Хімія», «Фізика конденсованого стану матеріалів», «Кристалографія, кристалохімія та мінералогія», «Матеріалознавство тугоплавких матеріалів», «Інженерне матеріалознавство»
Що буде вивчатися	<p>Найбільш вживані теоретичні підходи до моделювання атомної структури матеріалів та розрахунку їх фізичних та фізико-хімічних властивостей у зв'язку з атомною структурою, програмне забезпечення з їх реалізацією та основні прийоми роботи з ним. Зокрема буде розглянуто:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- Універсальне програмне середовище для атомістичної інформатики матеріалів (JupyterNotebooks, AtomicSimulationEnvironment).</li> <li>- Основи розрахунків з перших принципів за теорією функціоналу електронної густини для індивідуальних твердих речовин з пакетом програм QuantumEspresso: <ul style="list-style-type: none"> <li>- рівноважна структура матеріалів та передбачення їх спектрів рентгенівської дифракції</li> <li>- розрахунок електронних спектрів та оцінка ширини забороненої зони</li> <li>- розрахунок вібраційних властивостей (оцінка раманівських та ІЧ спектрів, вібраційна термодинаміка)</li> <li>- розрахунок граничних значень основних механічних характеристик матеріалу</li> <li>- оцінка граничних значень теплофізичних властивостей матеріалу</li> <li>- вивчення фізико-хімічних процесів та механізмів реакцій на твердих поверхнях</li> </ul> </li> <li>- Застосування методів машинного навчання для атомістичного моделювання та прогнозування властивостей складних систем (твердих розчинів) та систем великого розміру <ul style="list-style-type: none"> <li>- Класичне машинне навчання: кластерний розклад з пакетом <i>icet</i></li> <li>- Нейронні мережі: міжатомні потенціали з пакетом NequIP</li> </ul> </li> <li>- Використання масивних відкритих баз даних (BigData, MaterialsGenome) для пошуку, відкриття та розробки нових матеріалів, в тому числі із використанням машинного навчання, на прикладі репозитаріїв Materials Project та NOMAD <ul style="list-style-type: none"> <li>- Використання веб-інтерфейсу</li> <li>- Програмний доступ з OPTIMADE API</li> </ul> </li> </ul>
Чому це цікаво/треба вивчати	Застосування комп'ютерних алгоритмів для атомістичного моделювання набуває все більш широкого вжитку для пришвидшення відкриття нових матеріалів, розвідки їх властивостей, прототипування умов отримання та напрямків застосування. З їх використанням шлях від ідеї до ринку може бути скорочено з

	<p>десятиліть до років і навіть місяців. Активний розвиток атомістичних розрахунків за принципами квантової механіки за теорією функціоналу електронної густини зробив можливим таке використання комп'ютерних алгоритмів для прогнозування властивостей простих систем з точністю зіставною з експериментом. Революційний розвиток методів машинного навчання, в тому числі штучних нейронних мереж, та їх адаптація до проблем матеріалознавства робить подібні розрахунки доступними для систем недоступних раніше розмірів та рівня складності. Тому розрахункові зусилля займають все більш вагоме місце у сталій дослідницькій діяльності провідних матеріалознавчих лабораторій та підприємств світу. Разом з тим, "проривну" діяльність у галузі (стартапи) вже зараз не можливо уявити без застосування інформатики матеріалів</p>
<b>Чому можна навчитися (результати навчання)</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Налаштування та використання середовища для атомістичного моделювання та розрахунку властивостей матеріалів на основі публічного (безкоштовне з відкритим кодом) програмного забезпечення</li> <li>- Підготовка вхідних даних та налаштування параметрів розрахунків з перших принципів за теорією функціоналу електронної густини</li> <li>- Здійснення основних типів розрахунків з перших принципів за теорією функціоналу електронної густини</li> <li>- Підготовка наборів тренування-валідації, тренування та базове застосування моделей кластерного розкладу</li> <li>- Основи підготовки наборів тренування-валідації, тренування та базового застосування міжатомних потенціалів на базі спеціалізованих моделей глибокого навчання (нейронних мереж)</li> <li>- Прийоми пошуку, узагальнення та класифікації інформації у атомістичних базах даних, в тому числі з використанням методів машинного навчання</li> </ul>
<b>Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Ефективно аналізувати передову наукову літературу в галузі відкриття та атомістичної розробки матеріалів, прогнозування їх властивостей</li> <li>- Застосовувати атомістичне моделювання та розрахунки для супроводу власних експериментальних робіт з розробки та впровадження нових матеріалів</li> <li>- Ефективно використовувати у власних розробках розрахункові відомості накопичені світовою науковою спільнотою в галузі атомістичного моделювання матеріалів у відкритих базах даних</li> </ul>
<b>Інформаційне забезпечення</b>	Робоча програма дисципліни (силабус) із PCO; конспект лекцій
<b>Форма проведення занять</b>	Лекції, комп'ютерний практикум
<b>Семестровий контроль</b>	<b>Залік</b>

<b>Дисципліна</b>	<b>Теорія кристалізації</b>
<b>Рівень ВО</b>	Третій (науковий)
<b>Курс</b>	2
<b>Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи</b>	4 кредитів/120 год 36 год аудиторні заняття/84 год самостійна робота
<b>Мова викладання</b>	Українська
<b>Кафедра</b>	<b>Високотемпературних матеріалів та порошкової металургії</b>
<b>Вимоги до початку вивчення</b>	Студенти повинні мати знання з таких дисциплін як термодинаміка та кінетика, металознавство
<b>Що буде вивчатися</b>	Фізика рідкого стану металів та сплавів, основних принципів теорії росту кристалів, мікроскопічної кінетики багатофазної кристалізації, прогнозування вузької ланки процесу та оптимізації технологічних параметрів процесу кристалізації з урахуванням технічних, технологічних, економічних та екологічних факторів.
<b>Чому це цікаво/треба вивчати</b>	Аспіранти одержують важливий досвід з використання різних методів обробки розплаву для оптимізації структури та властивостей металургійної продукції без використання екологічно небезпечних інгредієнтів.
<b>Чому можна навчитися (результати навчання)</b>	Здобувачі отримують знання з основних положень теорії рідкого стану металів і сплавів; впливу кінетичних параметрів процесу кристалізації на макро- та мікроструктуру відливки; Методів фізичного, хімічного та термічного впливу з метою досягнення необхідної структури вихідного розплаву перед кристалізацією
<b>Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)</b>	Застосовувати основні положення теорії рідкого стану металів і сплавів з метою оптимізації структури та властивостей виробів; Застосовувати методи фізичного, хімічного та термічного впливу з метою досягнення необхідної структури вихідного розплаву перед кристалізацією; Застосовувати кінетичні параметри процесу кристалізації з метою досягнення оптимальної макро- та мікроструктури відливки
<b>Інформаційне забезпечення</b>	Силабус, Конспект лекцій
<b>Форма проведення занять</b>	Лекції, практичні заняття. Онлайн / офлайн
<b>Семестровий контроль</b>	<b>Залік</b>

<b>Дисципліна</b>	<b>Аномальне масоперенесення</b>
<b>Рівень ВО</b>	Третій (науковий)
<b>Курс</b>	2
<b>Обсяг дисципліни та розподіл годин аудиторної та самостійної роботи</b>	4 кредитів/120 год 36 год аудиторні заняття/84 год самостійна робота
<b>Мова викладання</b>	Українська
<b>Кафедра</b>	<b>Фізичного матеріалознавства та термічної обробки</b>
<b>Вимоги до початку вивчення</b>	Знання з загальної фізики, фізичної хімії, теорії тепло- та масопереносу, кристалографії, кристалохімії та мінералогії.
<b>Що буде вивчатися</b>	Закономірності, механізми та кінетика розвитку процесів аномального масоперенесення в твердих тілах – явища, коли міграція атомів відбувається на макроскопічні відстані (сотні мкм) за надзвичайно короткий, в порівнянні зі звичайною термічною дифузією, час. Ефект дальності («білі плями» теорії, акустичні хвилі, внутрішній фотоефект і зародження гіперзвукової хвилі, метаморфози на зовнішніх границях) та багато інших парадоксальних ефектів вивчаються на експериментальних прикладах.
<b>Чому це цікаво/треба вивчати</b>	Розкриває роль аномального масоперенесення в процесах створення нових матеріалів із різною структурою та унікальними властивостями.
<b>Чому можна навчитися (результати навчання)</b>	Надає можливість вирішувати цілий ряд практичних задач металознавства, створювати нові технології, проводити швидку оцінку кількісних параметрів масоперенесення, зокрема енергії активації процесу; аналізувати яким чином прискорити деякі фізико-хімічні процеси, зокрема із використанням інтенсивної пластичної деформації (ІПД).
<b>Як можна користуватися набутими знаннями і уміннями (компетентності)</b>	– прогнозувати кінетику фазових та структурних перетворень, що лімітуються процесами масоперенесення; – планувати натурні експерименти, які дозволяють змінити склад, структуру та властивості об'єму матеріалу без нагріву із застосуванням методів ІПД; – покращити механічні властивості з протилежного боку зразка обробкою його поверхні йонними, електронними, світловими пучками.
<b>Інформаційне забезпечення</b>	Силабус, Конспект лекцій, мультимедійні презентації
<b>Форма проведення занять</b>	Лекції, практичні заняття. Онлайн / офлайн
<b>Семестровий контроль</b>	<b>Залік</b>