

Державний вищий навчальний заклад
«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»



«ЗАТВЕРДЖУЮ»
проректор з навчальної роботи
С.В. Шарин

« »

2021 р.



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Сучасні матеріали для енергетики

Освітньо-наукова програма 104 «Фізика та астрономія»

Освітній рівень третій (освітньо-науковий)

Спеціальність 104 «Фізика та астрономія»

Галузь знань 10 «Природничі науки»

Робоча програма «Сучасні матеріали для енергетики» для аспірантів всіх спеціальностей. 12 с.

Розробник:

Никируй Л.І. – професор кафедри фізики і хімії твердого тіла

Робочу програму схвалено на засіданні фізики і хімії твердого тіла

Протокол від 26 серпня 2021 року № 1

Завідувач кафедри
фізики і хімії твердого тіла _____ Прокопів В.В.
(підпис)

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 6	Галузь знань 10 «Природничі науки» Спеціальність 104 «Фізика та астрономія»	Вибіркова	
Змістових модулів – 2			
Кількість кредитів – 3	Освітня програма 104 «Фізика та астрономія»	Рік підготовки:	
Індивідуальне науково-дослідне завдання: –		2-й	
Загальна кількість годин - 90		Семестр	
		2-й	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 4	Освітній рівень: третій (освітньо-науковий) PhD	Лекції	
		14 год.	
		Практичні, семінарські	
		16 год.	_ год
		Лабораторні	
		_ год.	_ год.
		Самостійна робота	
		60 год.	
Індивідуальні завдання: __ год.			
Вид контролю: Залік			

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Зміст курсу передбачає Зміст та матеріал навчальної дисципліни стосується аналізу сучасних проблем у розрахункових методах у галузі фізики, який орієнтує на актуальні питання та можливості моделювання структури та властивостей матеріалів, в рамках яких можлива подальша професійна та наукова кар'єра у галузі фізики та астрономії. На даному курсі аспіранти поглиблюють теоретичні знання теоретичних основ, а також практичні навички застосування методів звичайного і залежного від часу функціоналу електронної густини для розрахунків електронної структури і динамічних властивостей матеріалів, засвоюють основи роботи у прикладних програмних пакетах GAMESS US, Wien 2k, Burai та програмах обробки / аналізу розрахованих значень (Avogadro, Chemcraft, GaussSum, Molden, Xcrysden, тощо).

Мета курсу: Оволодіння основними фундаментальними уявленнями про сучасні методики розрахунків та принципи моделювання у галузі фізики та

астрономіє, а також формування в аспірантів вмій та навиків практичної роботи для розв'язання проблемних завдань.

Компетентності:

ЗК04. Здатність до пошуку, обробки та аналізу інформації з різних джерел.

ЗК10. Здатність розробляти та управляти науковими проектами в умовах обмеженого часу та ресурсів.

ФК01. Здатність виконувати оригінальні дослідження в експериментальній та теоретичній фізиці, досягати наукових результатів, які створюють нові знання, із звертанням особливої уваги до актуальних проблем та використанням новітніх наукових методів

ФК05. Здатності у використанні наукового обладнання та технологій.

Результати навчання:

ПРН05. Готувати і виконувати експериментальні, теоретичні дослідження в галузі фізики та дотичних міждисциплінарних напрямів з використанням сучасних інструментів, критично аналізувати результати власних досліджень і результати інших дослідників у контексті усього комплексу сучасних знань щодо досліджуваної проблеми.

ПРН07. Реалізовувати наукові проекти, для переосмислення наявного та створення нового цілісного знання.

ПРН10. Використовувати знання про взаємозв'язок кристалічної структури з фізичними і хімічними властивостями в ході створення нових перспективних матеріалів оптоелектроніки та термоелектрики.

3. Програма навчальної дисципліни

Тема 1. Матеріали для застосувань в енергетиці: вимоги та сучасні тренди.

1. Об'ємні, тонкоплівкові та наноматеріали.
2. Нанорозмірний фактор в матеріалознавстві.
3. Специфіка наноматеріалів та нанотехнологій.

Тема 2. Наноструктури і нанотехнології.

1. Моделювання наноструктур.
2. Особливості нанорозмірного стану речовини.
3. Розмірні та квантово-розмірні ефекти.
4. Класифікація та характеристики наноматеріалів в енергетиці.

Тема 3. Структура наноматеріалів.

1. Структурні особливості наноматеріалів.
2. Дефекти, межі зерен, інтерфейси, включення фаз.
3. Структурні методи дослідження наноматеріалів.

Тема 4. Матеріали для термоелектрики.

1. Матеріали для термоелектрики: класифікація матеріалів, сучасні тренди розвитку досліджень у термоелектричному матеріалознавстві.
2. Низько-температурні матеріали для термоелектрики.

- Термоелектричні холодильні пристрої.

Тема 5. Генераторні термоелектричні матеріали

- Середньотемпературні матеріали на основі сполук IV-VI.
- Скутерудити.
- Клатрати.
- Zintl фази.
- Високотемпературні матеріали Si-Ge для застосувань у космосі.

Тема 6. Фотоелектричні матеріали.

- Фотоелектричні матеріали: вимоги, класифікація.
- Об'ємні фотоелектричні матеріали..

Тема 7. Плівкові термоелектричні матеріали.

- Плівкові термоелектричні матеріали.
- Фотосинсезибілізовані матеріали.
- Моделювання характеристик фотоелектричних матеріалів.
- SCAPS симуляції.

Тема 8. Матеріали для накопичення енергії.

- Вуглецеві нанопористі матеріали.
- Графен, МХени, вуглецеві нанотрубки.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усьог о	у тому числі				
		л	п	лаб	інд	с.р.		л	п	лаб	інд	с.р.
1	2	3	4	5	6	7						
Тема 1. Матеріали для застосувань в енергетиці: вимоги та сучасні тренди	9	2	2			5						
Тема 2. Наноструктури і нанотехнології	9		2			5						
Тема 3. Структура наноматеріалів	14	2	2			10						
Тема 4. Матеріали для термоелектрики	9	2	2			5						
Тема 5. Генераторні термоелектричні матеріали	9	2	2			5						
Тема 6. Фотоелектричні	16	2	2			10						

матеріали											
Тема 7 Плівкові термоелектричні матеріали	14	2	2			10					
Тема 8. Матеріали для накопичення енергії		2	2			10					
Усього годин	90	14	16			60					

5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Сучасний стан матеріалознавства для енергетики. Огляд публікацій та визначення перспектив	2
2	Технологічні аспекти оптимізації характеристик матеріалів	2
3	Рухливість носіїв заряду та енергія Фермі, як характеристики функціональних матеріалів: нові підходи у дослідженнях	4
4	Методи впливу на зонну структуру матеріалів з метою оптимізації властивостей	4
5	Прикладні аспекти матеріалів для енергетики	4
Разом		16

6. Теми лабораторних занять

Відповідно до робочої програми з дисципліни «Сучасні матеріали для енергетики» лабораторні заняття не заплановані

7. Самостійна робота

Самостійна робота аспірантів – невід’ємна складова частина навчально-наукового процесу, яка відіграє важливу роль у процесі формування майбутнього спеціаліста.

Мета самостійної роботи – набуття навичок щодо вирішення конкретних практичних завдань і використання отриманих знань у подальшій практичній діяльності.

Самостійна робота при вивченні курсу складається з різних її видів:

- підготовка до аудиторних занять (лекцій, практичних занять);
- завершення розпочатих на практичних заняттях завдань, передбачених робочою програмою курсу;
- самостійне опрацювання окремих тем навчальної дисципліни згідно з навчально-тематичним планом.

Підготовка до лекційного заняття передбачає обов’язкове вивчення матеріалу попередньої лекції і ознайомлення з матеріалами наступної лекції (підручники, посібники).

Підготовка до практичних занять передбачає обов’язкове вивчення отриманого теоретичного матеріалу з метою подальшого застосування знань на практичних заняттях, у наступній практичній діяльності. При підготовці до заняття відповідної теми необхідно

детально вивчити конспект лекції, підручник (навчальний посібник) та коротко законспектувати засвоєний матеріал. Практичні заняття передбачають вивчення теоретичного матеріалу та виконання завдань. Аспірант самостійно завершує у позааудиторних умовах розпочаті в аудиторіях завдання і здає у час, який встановлює викладач.

Виконувати завдання необхідно в такій послідовності:

- ознайомитись із завданням і вивчити його умову;
- визначити методи (прийоми) розв'язання кожної конкретної ситуації;
- безпосередньо почати розв'язувати завдання;
- обґрунтувати висновки і пропозиції згідно з отриманими результатами;
- виконане завдання належно оформити;
- захистити завдання (якщо це встановлено робочою програмою дисципліни) відповідно до встановленого графіка самостійної роботи.

Якщо передбачений програмою обсяг завдань аспірант не виконав і не захистив, то до іспиту його не допускають.

Якщо передбачений програмою обсяг завдань аспірант не виконав і не захистив, то до іспиту його не допускають.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Особливості нанорозмірного стану речовини. Розмірні ефекти., квантово-розмірні ефекти. Нанорозмірний фактор у матеріалознавстві.	10
2	Основні галузі використання наноматеріалів і нанотехнологій.	5
3	Фізичні властивості. Електричні і оптичні властивості наноматеріалів.	5
4	Дослідження структури наноматеріалів	10
5	Фулерени, їх структура і типи. Властивості фулерену. Вуглецеві нанотрубки Структура і види вуглецевих нанотрубок. Властивості нанотрубок	10
6	Оптимізація термоелектричних характеристик матеріалів	10
7	Симуляція оптичних та фотоелектричних характеристик плівкових структур	10
Разом		60

8. Індивідуальні завдання

Відповідно до робочої програми з дисципліни «Сучасні матеріали для енергетики» індивідуальні завдання не заплановані.

9. Методи навчання

Словесні (навчальна лекція, пояснення, розповідь, бесіда, навчальна дискусія, диспут). Наочні (спостереження, демонстрування). Практичні (експериментальні навички). Проблемно-пошукові (розв'язання проблемних ситуацій і завдань, проблемне викладення). Методи за логікою руху змісту навчального матеріалу (індуктивні, дедуктивні).

За характером пізнавальної діяльності, при вивченні дисципліни «Методи розрахунків з перших принципів у теорії твердого тіла» використовуються: пояснювально-наочний проблемний виклад; частково-пошуковий та дослідницький методи.

10. Методи контролю

Методами контролю з дисципліни «Сучасні матеріали для енергетики» є поточний та підсумковий контроль.

Поточний контроль здійснюється під час проведення практичних занять і має на меті перевірку рівня підготовленості студента до виконання конкретної роботи. Формами проведення поточного контролю з дисципліни є:

- усні опитування на практичних заняттях;
- захисти підготовлених завдань (на лекційних та практичних заняттях);
- тестування тощо.

Підсумковий контроль проводиться з метою оцінки результатів навчання на освітньому рівні бакалавра. Підсумковий контроль з дисципліни «Сучасні матеріали для енергетики» включає семестровий контроль у формі заліку.

Критерії оцінювання рівня знань на практичних заняттях, при виконанні самостійних та індивідуальних завдань:

5 балів – коли аспірант дає обґрунтовані, теоретично і практично правильні відповіді на запитання, рішення завдань правильні, демонструє знання навчально-методичної літератури, наводить узагальнення і висновки, був присутній на лекціях і практичних заняттях;

4 бали – коли аспірант знає викладений матеріал на «відмінно», але ним допущені незначні помилки у формулюванні термінів, категорій, розрахунків, коли за допомогою викладача швидко орієнтується і знаходить правильні відповіді. Присутність на лекціях і практичних заняттях обов'язкова;

3 бали – коли аспірант дає неправильну відповідь на одне запитання або на всі запитання дає малообґрунтовані, невичерпні відповіді, припускається грубих помилок у розрахунках і тільки за допомогою викладача може виправити допущені помилки;

2 бали – коли аспірант дає неправильні відповіді на 2-3 запитання, припускається грубих помилок у розрахунках і не може їх виправити, погано орієнтується в лекційному матеріалі;

1 бал – аспірант отримує за умови, якщо не зміг викласти зміст питання, погано орієнтується в матеріалі; відсутні логічна послідовність висловлювань та зміст відповіді; виконане завдання містить багато помилок, що заважають розумінню загального змісту;

0 балів – відповідь відсутня.

11. Оцінювання

Під час навчання студенти можуть отримати такі бали: Назва контролю	Мак кількість балів	Примітки
Практичні заняття	60	4 практичні тематичні роботи (робота в групах в аудиторії)
Залік	40	Мін оцінка допуску – 25 Мак оцінка допуску – 60
Разом:	100	Відмінно!

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі	Оцінка	Оцінка за національною шкалою
-------------------	--------	-------------------------------

види навчальної діяльності	ECTS	для екзамену, курсового проєкту (роботи), практики	для заліку
90 – 100	A	відмінно	зараховано
80 – 89	B	добре	
70 – 79	C		
60 – 69	D	задовільно	
50 – 59	E		
26 – 49	FX	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
0-25	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

12. Перелік питань, які виносяться на залік

1. Методи визначення розмірів малих частинок.
2. Методи синтезу наночастинок.
3. Методи нанесення наноплівки.
4. Фізико-хімічні особливості поведінки речовин в нанорозмірному стані.
5. Електрооптичні процеси в надгратки.
6. Фізичні основи скануючої зондової мікроскопії.
7. Скануючий тунельний мікроскоп.
8. Методи дослідження нанооб'єктів і наноструктур.
9. Атомна інженерія. Локальне окислення металів і напівпровідників.
10. Атомна інженерія. Локальне хімічне осадження з газової фази.
11. Аерогелі.
12. Пористий кремній: отримання, властивості, використання.
13. Пористий оксид алюмінію, отримання і наноструктури на його основі.
14. Термоелектричні матеріали: вимоги, класифікація.
15. Фотоелектричні матеріали: вимоги, класифікація.
16. Графен: отримання, властивості, використання.
17. Фулерени: отримання, структура, використання.
18. Вуглецеві нанотрубки: хіральність, провідні і надпровідні властивості нанотрубок.
19. Фотонні кристали.
20. Перспективи нанотехнологій в сист

12. Рекомендована література

1. Li, Z., Xiao, C., Zhu, H., & Xie, Y. (2016). Defect chemistry for thermoelectric materials. *Journal of the American Chemical Society*, 138(45), 14810-14819.
2. Sootsman, J. R., Chung, D. Y., & Kanatzidis, M. G. (2009). New and old concepts in thermoelectric materials. *Angewandte Chemie International Edition*, 48(46), 8616-8639.
3. Фреїк, Д.М. Досягнення і проблеми термоелектрики: Історичні аспекти (Огляд) / Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, О.С. Криницький // *Фізика і хімія твердого тіла* – Т. 13, № 2 (2012). С. 297–318.
4. Zaferani, S. H., Sams, M. W., Ghomashchi, R., & Chen, Z. G. (2021). Thermoelectric Coolers as Thermal Management Systems for Medical Applications: Design, Optimization, and Advancement. *Nano Energy*, 106572.
5. Zapukhlyak, Z. R., Nykyruy, L. I., Wisz, G., Rubish, V. M., Prokopiv, V. V., Halushchak, M. O., ... & Yavorskyi, R. S. (2020). SCAPS modelling of ZnO/CdS/CdTe/CuO photovoltaic heterosystem. *Physics and Chemistry of Solid State*, 21(4), 660-668.

6. B.K. Ghosh, I. Saad, K.T.K. Teo, and S.K. Ghosh, mcSi and CdTe solar photovoltaic challenges: Pathways to progress, *Optik* 206, 164278 (2020) (<https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.164278>).
7. G. Wisz, L.I. Nykyruy, V.M. Yakubiv, I.I. Hryhoruk, R.S. Yavorskyi, Impact of advanced research on development of renewable energy policy: case of Ukraine, *International Journal of Renewable Energy Research* 8(4), 2367-2384 (2018)
8. Nykyruy L., Yakubiv V., Wisz G., Hryhoruk I., Zapukhlyak Z., Yavorskyi R.. Book title: *Renewable Energy - Resources, Challenges and Applications*. Chapter title: *Energy policy at the EU – non-EU border: critical analysis, opportunities and improve for the future*. edited by Dr. Mansour Al Qubeissi. InTechOpen. London. ISBN 978-1-78984-284-5. DOI:10.5772/intechopen.91686
9. S.G. Kumar, K.K. Rao, Physics and chemistry of CdTe/CdS thin film heterojunction photovoltaic devices: fundamental and critical aspects, *Energy & Environmental Science* 7(1), 45-102 (2014) (<https://doi.org/10.1039/C3EE41981A>).
10. M.A. Green, E.D. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopidakis, X. Hao, Solar cell efficiency tables (version 56), *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 28(7), 629-638 (2020) (<https://doi.org/10.1002/pip.3303>).
11. M. Burgelman, J. Verschraegen, S. Degrave, P. Nollet, Modeling thin-film PV devices, *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* 12(2-3), 143–153, (2004) (<https://doi.org/10.1002/pip.524>).
12. M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave, Modelling polycrystalline semiconductor solar cells, *Thin Solid Films* 361, 527–532 (2000) ([https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(99\)00825-1](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(99)00825-1)).
13. Наноматеріали і нанотехнології: навчальний посібник / Азаренков М. О., Неклюдов І. М., Береснев В. М., Воеводін В. М., Погребняк О. Д., Ковтун Г. П., Соболев О. В., Удовицький В. Г., Литовченко С. В., Турбін П. В., Чижкала В. О. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2014. – 316 с.
14. Основи наноелектроніки: у 2 кн. Кн.2 «Матеріали і наноелектронні технології : Підручник / Ю.І. Якименко, Д.М. Заячук, В. М.Співак, А.Т. Орлов, О. В. Богдан, В.М. Коваль. – сайт <http://www.fel.ntukpi.kiev.ua>. – К.: НТУУ «КПІ», 2016. - 400 с.
15. Поплавко Ю.М., Борисов О. В., Якименко Ю. І. Нанофізика, наноматеріали, наноелектроніка: навч. посіб. – К.: НТУУ «КПІ», 2012. – 300 с.
16. Maksymuk, M., Parashchuk, T., Dzundza, B., Nykyruy, L., Chernyak, L., & Dashevsky, Z. (2021). Highly efficient bismuth telluride-based thermoelectric microconverters. *Materials Today Energy*, 21, 100753, <https://doi.org/10.1016/j.mtener.2021.100753>
17. Naidych, B., Parashchuk, T., Yaremiy, I., Moyseneyko, M., Kostyuk, O., Voznyak, O., ... & Nykyruy, L. (2021). Structural and Thermodynamic Properties of Pb-Cd-Te Thin Films: Experimental Study and DFT Analysis. *Journal of Electronic Materials*, 50(2), 580-591, <https://doi.org/10.1007/s11664-020-08561-5>
18. Dzundza, B., Nykyruy, L., Parashchuk, T., Ivakin, E., Yavorsky, Y., Chernyak, L., & Dashevsky, Z. (2020). Transport and thermoelectric performance of n-type PbTe films. *Physica B: Condensed Matter*, 588, 412178, <https://doi.org/10.1016/j.physb.2020.412178>
19. Л.І. Никируй, О.В. Замуруєва, В.С. Федосов, О.М. Бірук, С.А. Федосов Науково-технічний прогрес розвитку відновлюваної енергетики в Україні, Міжвузівський збірник наукових праць (за галузями знань «Фізико-математичні науки» та «Технічні науки»), випуск 70, сс. 18-26, 2020, <https://doi.org/10.36910/6775.24153966.2020.70.3>
20. Никируй Л. І., Замуруєва О. В., Новосад О. В., Федосов С. А. Перспективні матеріали і технології сонячних елементів. *Perspective Technologies and Devices – Перспективні технології та прилади*. 2020. № 17. С. 175–182, <https://doi.org/10.36910/6775-2313-5352-2020-17-26>