

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧЕРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ЛУГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ВЛАДИМИРА ДАЛЯ»

Институт Технологий и инженерной механики
Кафедра Материаловедение

УТВЕРЖДАЮ:

Директор
Института технологий и инженерной
механики


Могильная Е.П.
(подпись)

« 18 » 04 2023 года

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

По дисциплине «Физико-химические основы моделирования строения и свойств материалов»

По направлению подготовки 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов

Магистерская программа: «Структурные и фазовые превращения при деформационно-термической обработке»

Лист согласования РПУД

Рабочая программа учебной дисциплины «Физико-химические основы моделирования строения и свойств материалов» по направлению подготовки 22.04.01 «Материаловедение и технологии материалов». – 15 с.

Рабочая программа учебной дисциплины «Физико-химические основы моделирования строения и свойств материалов» составлена с учетом государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 22.04.01 Материаловедение и технологии материалов, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 24.04.2018 № 306 редакция с изменениями от 26.11.2020 №1456.

СОСТАВИТЕЛЬ:

д-р техн. наук, профессор, заведующий кафедры материаловедения Рябичева Л.А.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры материаловедения
«18» 04 2023 г., протокол № 8.

Заведующий кафедрой _____ Рябичева Л.А.
Переутверждена: «___» _____ 20__ г., протокол № _____

Рекомендована на заседании методической комиссии института технологий и инженерной механики

«18» 04 2023 г., протокол № 3.

Председатель методической комиссии
института технологий и инженерной механики _____ Ясуник С.Н.

© Рябичева Л.А., 2023 год
© ГОУ ВПО ЛНР «ЛНУ им.В. ДАЛЯ», 2023 год

Структура и содержание дисциплины

1. Цели и задачи дисциплины, её место в учебном процессе

Цель изучения дисциплины - представление систематизированных знаний о физико-химических характеристиках веществ и физических процессах, которые являются вводными параметрами при построении компьютерных моделей технологических процессов получения новых материалов, а также предсказания их структуры и свойств.

Задачи:

- изучить теоретические основы построения математических моделей технологических процессов получения новых материалов;
- уметь предсказать свойства и структуры;
- практическое освоение методов компьютерного моделирования свойств и строения материалов с использованием прикладных программных комплексов.

2. Место дисциплины в структуре ООП ВО

Дисциплина «Физико-химические основы моделирования строения и свойств материалов» входит в часть, формируемую участниками образовательных отношений.

Содержание дисциплины является логическим продолжением содержания дисциплин: «Физическая химия», «Моделирование и оптимизация свойств материалов и процессов», «Общее материаловедение и технологии материалов», «Теория и технология термической и химико-термической обработки» и служит основой для дисциплин «Материаловедение и технологии современных и перспективных материалов», «Перспективные технологии термической и химико-термической обработки материалов».

3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижений компетенции (по реализуемой дисциплине)	Перечень планируемых результатов
ОПК-1. Способен решать производственные и (или) исследовательские задачи, на основе фундаментальных знаний в области материаловедения и технологии материалов	ОПК-1.2. В рамках производственной деятельности моделирует и внедряет в производство технологические процессы создания и обработки материалов с учётом экономических факторов и в соответствии с требованиями экологической и промышленной безопасности.	Знать моделирование технологических процессов создания и обработки материалов с учётом экономических факторов и в соответствии с требованиями экологической и промышленной безопасности. Уметь моделировать и внедрять в производство технологические процессы создания и обработки материалов с учётом экономических факторов

		и в соответствии с требованиями экологической и промышленной безопасности. Владеть навыками моделирования и внедрения в производство технологические процессы создания и обработки материалов с учётом экономических факторов и в соответствии с требованиями экологической и промышленной безопасности.
ПК-2. Способен моделировать процессы обработок и прогнозировать результаты их осуществления при различных режимах, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	ПК-2.1. Моделирует процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования; ПК-2.2. Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Знать моделирование процессов различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования; Уметь моделировать процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования; Владеть навыками моделирования процессов различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования.

2. Структура и содержание дисциплины

4.1. Объем учебной дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Объем часов (зач. ед.)	
	Очная форма	Заочная форма
Общая учебная нагрузка (всего)	180 (5 зач. ед)	
Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего) в том числе:	45	
Лекции	15	
Семинарские занятия	-	
Практические занятия	30	
Лабораторные работы	-	
Курсовая работа	-	
Самостоятельная работа студента (всего)	135	
Итоговая аттестация	зачёт	

4.2. Содержание разделов дисциплины

Тема 1. Материалы: прошлое и настоящее. Тенденции развития современного материаловедения.

Важнейшие проблемы науки о материалах на ближайшее и более отдалённое будущее. Национальные и международные программы создания новых поколений материалов. Социальные, экономические, экологические аспекты крупномасштабного производства, эксплуатации и регенерации материалов. Конструкционные и функциональные материалы.

Различные принципы классификации (функциональных) материалов. Типы (функциональных) материалов (по составу, структуре, свойствам и областям применения, многофункциональные материалы).

Тема 2. Физико-химические принципы конструирования новых материалов.

Эволюция от молекул к материалам. Наноструктуры, нанокомпозиты и нанореакторы. Традиционные и современные технологии получения ультрадисперсных материалов (методы химической гомогенизации, неравновесные методы, методы, основанные на синергетике химического и физического воздействия.)

Особые свойства веществ в виде тонких плёнок, плёнка как композит («симбиоз»). Новое в процессах получения эпитаксиальных и поликристаллических плёнок металлов и сплавов, простых и сложных оксидов, синтез алмазных плёнок. Многослойные покрытия со специальными функциями.

Тема 3. Моделирование свойств материалов и покрытий.

Определение состава материала с заданными физическими и химическими свойствами с помощью методов линейного программирования. Многокритериальная оптимизация состава и свойств новых материалов. Моделирование свойств материалов и покрытий и оптимизация параметров системы «состав – структура - технологические и эксплуатационные свойства».

Тема 4. Основы математического моделирования. Понятие объекта и его модели. Роль моделирования в процессах практической деятельности человека. Базовые понятия: предметная область, данные, математическая модель, параметры модели, метод. Основы моделирования. Виды моделей. Соответствие математической модели контролируемому объекту. Основные этапы разработки математических моделей. Основные понятия теории подобия. Коэффициенты и критерии подобия. Классификация моделей, области их применения. Роль математического моделирования в ускорении научно-технического прогресса.

Анализ объектов и их оптимизация по математическим моделям Математическое планирование экспериментальных исследований и методы обработки экспериментальных данных. Задачи оптимизации параметров и структуры систем. Критерии оптимальности. Характеристики и сравнительный анализ методов оптимизации. Примеры оптимизации параметров моделей. Использование пакетов прикладных программ. Реализация методов оптимизации с помощью современных программных продуктов.

Тема 5. Компьютерные технологии в материаловедении.

Расчет показателей физических, химических, механических, свойств материалов в зависимости от их состава и структуры. Основы методов оптимизации состава и свойств материалов и наноматериалов, технологических процессов их получения, обработки и переработки.

4.3. Лекции

№ п/п	Название темы	Объем часов	
		Очная форма	Заочная форма
1	Материалы: прошлое и настоящее. Тенденции развития современного материаловедения.	2	
2	Физико-химические принципы конструирования новых материалов.	4	
3	Моделирование свойств материалов и покрытий.	5	
4	Основы математического моделирования.	2	
5	Компьютерные технологии в материаловедении	2	
Итого:		15	

4.4. Практические занятия

№ п/п	Название темы	Объем часов	
		Очная форма	Заочная форма
1	Типы функциональных материалов по составу, структуре, свойствам и областям применения, многофункциональные материалы.	2	
2	Физико-химические принципы конструирования новых материалов.	6	
3	Определение состава материала с заданными физическими и химическими свойствами с помощью методов линейного программирования.	6	
4	Основы математического моделирования.	6	
5	Компьютерные технологии в материаловедении. Расчет показателей физических, химических, механических, свойств материалов в зависимости от их состава и структуры	10	
Итого:		30	

4.5. Лабораторные работы учебным планом не предусмотрены.

4.6. Самостоятельная работа студентов

№ п/п	Название темы	Вид СРС	Объем часов	
			Очная форма	Заоч- ная форма
1	Материалы: прошлое и настоящее. Тенденции развития современного материаловедения.	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическому занятию.	12	
2	Физико-химические принципы конструирования новых материалов.	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическому занятию	12	
3	Определение состава материала с заданными физическими и химическими свойствами с помощью методов линейного программирования.	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическому занятию	23	
4	Основы математического моделирования.	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическому занятию	23	
5	Компьютерные технологии в материаловедении. Расчёт показателей физических, химических, механических, свойств материалов в зависимости от их состава и структуры	Изучение лекционного материала. Подготовка к практическому занятию	26	
6	Выполнение индивидуального задания		20	
7	Подготовка к зачёту		15	
Итого:			135	

4.7. Курсовой проект/работа учебным планом не предусмотрен.

5. Образовательные технологии

В процессе обучения для достижения планируемых результатов освоения дисциплины используются следующие образовательные технологии:

- традиционные объяснительно-иллюстративные технологии, которые обеспечивают доступность учебного материала для большинства студентов, системность, отработанность организационных форм и привычных методов, относительно малые затраты времени;
- информационно-коммуникационная технология, в том числе визуализация, создание электронных учебных материалов;
- использование электронных образовательных ресурсов при подготовке к лекциям, практическим и лабораторным занятиям.

В рамках перечисленных технологий основными методами обучения являются: работа в команде; самостоятельная работа; проблемное обучение.

6. Учебно-методическое и программно-информационное обеспечение дисциплины:

а) основная литература:

1. Готтштайн Г., Физико-химические основы материаловедения / Г. Готтштайн - М. : Лаборатория знаний, 2017. - 403 с. (Лучший зарубежный учебник) - ISBN 978-5-00101-446-1 - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785001014461.html> (дата обращения: 14.03.2020). - Режим доступа : по подписке.

2. Хацринов А.И., Физикохимия неорганических композиционных материалов : учебное пособие / Хацринов А. И., Хацринова Ю. А., Сулейманова А. З., Хацринова О. Ю. - Казань : Издательство КНИТУ, 2016. - 116 с. - ISBN 978-5-7882-2085-7 - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788220857.html> (дата обращения: 14.03.2020). - Режим доступа : по подписке.

б) дополнительная литература:

1. Новиков И.И., Металловедение : учеб. В 2 т. Т. 2. Термическая обработка. Сплавы / Новиков И.И., Золоторевский В.С., Портной В.К., Белов Н.А., Ливанов Д.В., Медведева С.В., Аксенов А.А., Евсеев Ю.В. - М. : МИСиС, 2014. - 528 с. - ISBN 978-5-87623-217-5 - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785876232175.html> (дата обращения: 14.03.2020). - Режим доступа : по подписке.

2. Солнцев Ю.П., Материаловедение специальных отраслей машиностроения / Солнцев Ю.П., Пирайнен В.Ю., Вологжанина С.А. - СПб. : ХИМИЗДАТ, 2017. - 784 с. - ISBN 978-5-93808-293-9 - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785938082939.html> (дата обращения: 14.03.2020). - Режим доступа : по подписке.

3. Новиков И.И., Металловедение : учеб. В 2 т. Т. 1. Основы металловедения / Новиков И.И., Золоторевский В.С., Портной В.К., Белов Н.А., Ливанов Д.В., Медведева С.В., Аксёнов А.А., Евсеев Ю.В. - М. : МИСиС, 2014. - 496 с. - ISBN 978-5-87623-191-8 - Текст : электронный // ЭБС "Консультант студента" : [сайт]. - URL : <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785876231918.html> (дата обращения: 14.03.2020). - Режим доступа : по подписке.

в) методические указания:

Методические указания к выполнению практическим занятиям по дисциплине «Физико-химические основы моделирования строения и свойств материалов» для студентов, обучающихся по направлению подготовки 22.04.01. Материаловедение и технологии материалов, /Сост.: Л.А. Рябичева. Луганск: Изд-во ЛНУ им. Даля, 2018.

г) Интернет-ресурсы:

MATERIALOLOGY. - www.materialology.com Материаловедение.-
www.materialscience.ru ЭБС ZNANIUM.COM (НИЦ ИНФРА-М) - <http://znanium.com/> ЭБС
.БиблиоРоссика - www.bibliorossica.com ЭБС Издательства. Лань. - <http://e.lanbook.com/>

Электронные библиотечные системы и ресурсы

Электронно-библиотечная система «Консультант студента» —
<http://www.studentlibrary.ru/cgi-bin/mb4x>

Электронно-библиотечная система «StudMed.ru» — <https://www.studmed.ru>

Информационный ресурс библиотеки образовательной организации

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Реализация программы дисциплины требует наличия аудиторий и лаборатории.

Лекционные занятия: комплект электронных презентаций/слайдов, аудитория, оснащенная презентационной техникой (мультимедиапроектор, экран, компьютер/ноутбук).

Практические занятия: компьютерный класс, презентационная техника (проектор, экран, компьютер/ноутбук).

Рабочее место преподавателя, оснащенное компьютером с доступом в Интернет, рабочие места студентов по количеству обучающихся, оснащенные компьютерами с доступом в Интернет, предназначенные для работы в электронной образовательной среде.

Программное обеспечение:

Функциональное назначение	Бесплатное программное обеспечение	Ссылки
Офисный пакет	Libre Office 6.3.1	https://www.libreoffice.org/ https://ru.wikipedia.org/wiki/LibreOffice
Операционная система	UBUNTU 19.04	https://ubuntu.com/ https://ru.wikipedia.org/wiki/Ubuntu
Браузер	Firefox Mozilla	http://www.mozilla.org/ru/firefox/fx
Браузер	Opera	http://www.opera.com
Почтовый клиент	Mozilla Thunderbird	http://www.mozilla.org/ru/thunderbird
Файл-менеджер	Far Manager	http://www.farmanager.com/download.php
Архиватор	7Zip	http://www.7-zip.org/
Графический редактор	GIMP (GNU Image Manipulation Program)	http://www.gimp.org/ http://gimp.ru/viewpage.php?page_id=8 http://ru.wikipedia.org/wiki/GIMP
Редактор PDF	PDFCreator	http://www.pdfforge.org/pdfcreator
Аудиоплеер	VLC	http://www.videolan.org/vlc/

8. Оценочные средства по дисциплине

Паспорт фонда оценочных средств по учебной дисциплине «Физико-химические основы моделирования строения и свойств материалов»

Перечень компетенций (элементов компетенций), формируемых в результате освоения учебной дисциплины (модуля) или практики

№ п/п	Код контролируемой компетенции	Формулировка контролируемой компетенции	Индикаторы достижений компетенции (по реализуемой дисциплине)	Контролируемые темы учебной дисциплины, практики	Этапы формирования (семестр изучения)
1	ОПК-1.	Способен решать производственные и (или) исследовательские задачи, на основе фундаментальных знаний в области материаловедения и технологии материалов	ОПК-1.2. В рамках производственной деятельности моделирует и внедряет в производство технологические процессы создания и обработки материалов с учетом экономических факторов и в соответствии с требованиями экологической и промышленной безопасности.	Тема 1. Материалы: прошлое и настоящее. Тенденции развития современного материаловедения. Тема 2. Физико-химические принципы конструирования новых материалов. Тема 3. Моделирование свойств материалов и покрытий.	2
2	ПК-2	Способен моделировать процессы обработок и прогнозировать результаты их осуществления при различных режимах, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и	ПК-2.1. Моделирует процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования; ПК-2.2. Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов	Тема 4. Основы математического моделирования. Тема 5. Компьютерные технологии в материаловедении	2

		средств автоматизированного проектирования	тов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования		
--	--	--	--	--	--

Показатели и критерии оценивания компетенций, описание шкал оценивания

№ п/п	Код контролируемой компетенции	Индикаторы достижений компетенции (по реализуемой дисциплине)	Перечень планируемых результатов	Контролируемые темы учебной дисциплины	Наименование оценочного средства
1	ОПК-1	ОПК-1.2. В рамках производственной деятельности моделирует и внедряет в производство технологические процессы создания и обработки материалов с учётом экономических факторов и в соответствии с требованиями экологической и промышленной безопасности.	Знать моделирование технологических процессов создания и обработки материалов с учётом экономических факторов и в соответствии с требованиями экологической и промышленной безопасности. Уметь моделировать и внедрять в производство технологические процессы создания и обработки материалов с учетом экономических факторов и в соответствии с требованиями экологической и промышленной безопасности. Владеть навыками моделирования и внедрения в производство технологические процессы создания и обработки материалов с учётом экономических факторов и в соответствии с требованиями экологической и промышленной безопасности.	Тема 1. Материалы: прошлое и настоящее. Тенденции развития современного материаловедения. Тема 2. Физико-химические принципы конструирования новых материалов. Тема 3. Моделирование свойств материалов и покрытий	Сдача практических работ, вопросы к зачёту

2	ПК-2	ПК-2.1. Моделирует процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования; ПК-2.2. Прогнозирует результаты различных обработок материалов, в том числе с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования	Знать моделирование процессов различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования; Уметь моделировать процессы различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования; Владеть навыками моделирования процессов различных обработок материалов с использованием стандартных пакетов компьютерных программ и средств автоматизированного проектирования.	Тема 4. Основы математического моделирования. Тема 5. Компьютерные технологии в материаловедении	Сдача практических работ, вопросы к зачёту
---	------	---	---	--	--

Оценочные средства для промежуточной аттестации (зачёт)

Вопросы к зачёту:

1. Перспективные направления развития материаловедения.
2. Общие подходы к развитию материаловедения.
3. Объясните физико-химические основы материаловедения.
4. Важнейшие проблемы науки о материалах на ближайшее и более отдалённое будущее.
5. Социальные, экономические, экологические аспекты крупномасштабного производства, эксплуатации и регенерации материалов.
6. Конструкционные и функциональные материалы.
7. Классификация функциональных материалов.
8. Типы функциональных материалов по составу, структуре, свойствам и областям применения.
9. Многофункциональные материалы.
10. Физико-химические принципы конструирования новых материалов.

11. Традиционные и современные технологии получения ультрадисперсных материалов.
12. Особые свойства веществ в виде тонких плёнок, плёнка как композит («симбиоз»).
13. Новое в процессах получения эпитаксиальных и поликристаллических плёнок металлов и сплавов, простых и сложных оксидов, синтез алмазных плёнок.
14. Многослойные покрытия со специальными функциями.
15. Определение состава материала с заданными физическими и химическими свойствами с помощью методов линейного программирования.
16. Многокритериальная оптимизация состава и свойств новых материалов.
17. Моделирование свойств материалов и покрытий и оптимизация параметров системы «состав – структура - технологические и эксплуатационные свойства».
18. Характеристика объекта и его модели.
19. Роль моделирования в процессах практической деятельности человека.
20. Базовые понятия: предметная область, данные, математическая модель, параметры модели, метод.
21. Виды моделей в материаловедении.
22. Соответствие математической модели контролируемому объекту.
23. Основные этапы разработки математических моделей.
24. Основные понятия теории подобия.
25. Объясните коэффициенты и критерии подобия.
26. Объясните классификацию моделей, области их применения.
27. Анализ объектов и их оптимизации по математическим моделям.
28. Задачи оптимизации параметров и структуры систем.
29. Критерии оптимальности в материаловедении.
30. Характеристика и сравнительный анализ методов оптимизации.
31. Современные программные продукты в материаловедении.
32. Расчёт показателей физических, химических, механических, свойств материалов в зависимости от их состава и структуры.
33. Основы методов оптимизации состава и свойств материалов и наноматериалов, технологических процессов их получения, обработки и переработки.

Критерии и шкала оценивания по оценочному средству – *зачёт*

Характеристика знания предмета и ответов	Зачёты
Студент глубоко и в полном объёме владеет программным материалом. Грамотно, исчерпывающе и логично его излагает в устной или письменной форме. При этом знает рекомендованную литературу, проявляет творческий подход в ответах на вопросы и правильно обосновывает принятые решения, хорошо владеет умениями и навыками при выполнении практических задач.	зачтено
Студент знает программный материал, грамотно и по сути излагает его в устной или письменной форме, допуская незначительные неточности в утверждениях, трактовках, определениях и категориях или незначительное количество ошибок. При этом владеет необходимыми умениями и навыками при выполнении практических задач.	
Студент знает только основной программный материал, допускает неточности, недостаточно чёткие формулировки, непоследовательность в ответах, излагаемых в устной или письменной форме. При этом недостаточно владеет умениями и навыками при выполнении практических задач. Допускает до 30% ошибок в излагаемых ответах.	
Студент не знает значительной части программного материала. При этом допускает принципиальные ошибки в доказательствах, в трактовке понятий и категорий, проявляет низкую культуру знаний, не владеет основными умениями и навыками при выполнении практических задач. Студент отказывается от ответов на дополнительные вопросы.	не зачтено

Лист изменений и дополнений

№ п/п	Виды дополнений и изменений	Дата и номер протокола заседания кафедры (кафедр), на котором были рассмотрены и одобрены изменения и дополнения	Подпись (с расшифровкой) заведующего кафедрой (заведующих кафедрами)