

Инженерная школа новых производственных технологий  
 Направление подготовки 12.03.02 Опотехника  
 Отделение Материаловедения

### БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
<b>Влияние параметров плазмонных наноструктур на усиление сигнала SERS и фототермического эффекта</b>

УДК 543.424.2:538.9

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4B51	Ким Лариса Робертовна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШХБМТ	Рауль Давид Родригес	PhD		

### КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Николаенко В.С.	-		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Скачкова Л.А.	-		

### ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОМ	Степанов С.А.	к.ф.-м.н.		

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результ ата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<b><i>Профессиональные компетенции</i></b>	
Р1	Применять глубокие естественнонаучные, математические, гуманитарные, общепрофессиональные знания в области оптотехники
Р2	Воспринимать, обрабатывать, анализировать и систематизировать научно-техническую информацию, передовой отечественный и зарубежный опыт в области световой, оптической и лазерной техники, оптического и светотехнического материаловедения и оптических и светотехнических технологий
Р3	Применять полученные знания для решения задач, возникающих при эксплуатации новой техники и технологий оптотехники
Р4	Владеть методами и компьютерными системами проектирования и исследования световой, оптической и лазерной техники, оптических и светотехнических материалов и технологий
Р5	Владеть методами проведения фотометрических и оптических измерений и исследований, включая применение готовых методик, технических средств и обработку полученных результатов
Р6	Владеть общими правилами и методами наладки, настройки и эксплуатации оптической, световой и лазерной техники для решения различных задач
<b><i>Универсальные компетенции</i></b>	
Р7	Проявлять творческий подход при решении конкретных научных, технологических и опытно-конструкторских задач в области оптотехники
Р8	Владеть иностранным языком на уровне, позволяющем работать в интернациональной среде с пониманием культурных, языковых и социально – экономических различий, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной деятельности
Р9	Уметь эффективно работать индивидуально и в качестве члена команды по междисциплинарной тематике, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность <i>следовать корпоративной культуре</i> организации
Р10	Следовать кодексу профессиональной этики, ответственности и нормам научной, педагогической и производственной деятельности
Р11	Понимать необходимость и уметь самостоятельно учиться и повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности

**Министерство образования и науки Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Инженерная школа новых производственных технологий  
Направление подготовки: 12.03.02 «Оптотехника»  
Отделение школы (НОЦ): Отделение материаловедения

УТВЕРЖДАЮ:  
Руководитель ООП «Оптотехника» ОМ  
ИШНПТ  
\_\_\_\_\_  
(Подпись)      (Дата)      Степанов С.А.  
(Ф.И.О.)

**ЗАДАНИЕ**  
**на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

бакалаврской работы
---------------------

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
4B51	Ким Лариса Робертовна

Тема работы:

Влияние параметров плазмонных наноструктур на усиление сигнала SERS и фототермического эффекта	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:

--	--

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

<p><b>Исходные данные к работе</b></p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Нанесение наночастиц золота на подложку НОРГ</li> <li>2. Снятие топографии с помощью атомно-силового микроскопа</li> <li>3. Снятие карты распределения поверхностной емкости с помощью сканирующей емкостной микроскопии (СЕМ)</li> <li>4. Модификация золотых наночастиц УФ-лазером</li> <li>5. Анализ влияния лазерного облучения на кристалличность структуры</li> </ol>
---	---

<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b></p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Снятие топографии с помощью атомно-силовой микроскопии;</li> <li>2. Снятие карты распределения поверхностного потенциала с помощью сканирующей емкостной микроскопии (СЕМ);</li> <li>3. Модификация золотых наночастиц УФ-лазером;</li> <li>4. Анализ влияния лазерного облучения на кристалличность структуры;</li> <li>5. Влияние полученного материала на ГКРС и фототермический нагрев.</li> </ol>
<p><b>Перечень графического материала</b></p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	
<p><b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b> <i>(с указанием разделов)</i></p>	
<p><b>Раздел</b></p>	<p><b>Консультант</b></p>
<p>Социальная ответственность</p>	<p><b>Скачкова Лариса Александровна, доцент</b></p>
<p>Финансовый менеджмент</p>	<p><b>Николаенко Валентин Сергеевич, ассистент</b></p>
<p><b>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</b></p>	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	24.10.18
--	----------

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШХБМТ	Родригес Р.Д.	PhD		24.10.18

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4B51	Ким Лариса Робертовна		24.10.18

## Реферат

Выпускная квалификационная работа 72 с., рис., 15 табл., 49 источников.

Ключевые слова: наночастицы золота, атомно-силовая микроскопия, сканирующая емкостная микроскопия, тераностика, изменение кристаллизации.

Объектом исследования является изменение свойств наночастиц с помощью лазерного облучения, предмет исследования – золотые наночастицы.

Целью данной работы является подтверждение влияния лазерного облучения на свойства золотых наночастиц.

В ходе исследования было проведено облучение золотой наночастицы лазером и изучены изменения в структуре, а именно измерены топография и распределение поверхностной емкости по образцу соответствующими режимами атомно-силового микроскопа – полуконтактным и сканирующей емкостной микроскопии.

Анализируя карту распределения поверхностной емкости, был сделан вывод о том, что облучение поверхности наночастиц лазером приводит к уменьшению проводимости слоя, а значит и к внедрению структурных дефектов, т.е. к изменению кристалличности.

Область применения – медицина, тераностика раковых опухолей.

## Определения, обозначения и сокращения:

В данной работе применены следующие термины с соответствующими определениями:

Топография: изображение рельефа и геометрической поверхности образца

Подложка: монокристаллическая полупроводниковая пластина для создания или нанесения на нее пленок, гетероструктур и т.д.

Плазмоны: коллективные колебания электронов на поверхности наночастицы благородных металлов (обычно золото, серебро, медь).

Кантилевер: составляющая атомно-силового микроскопа, представляющая из себя гибкую балку с определенным коэффициентом жесткости и зондом на конце.

ГКРС/SERS – спектроскопия комбинационного рассеяния с усилением поверхности/Surface Enhanced Raman Spectroscopy

НЧЗ - наночастицы золота

ППР –поверхностный плазмонный резонанс

ЛППР – локализованный поверхностный плазмонный резонанс

НОРГ – highly-ordered pyrolytic graphite (высокоориентированный пиролитический графит)

АСМ – атомно-силовой микроскоп/атомно-силовая микроскопия

СЕМ – сканирующая емкостная микроскопия

УФ – ультрафиолет

## Оглавление

Введение .....	8
1. Обзор литературы .....	9
2. Объекты и методы исследования .....	19
3. Экспериментальные данные .....	26
3.1 Анализ топографии и карты распределения поверхностной емкости до лазерной абляции .....	26
3.2 Изменение кристалличности с помощью лазера .....	31
3.3 Описание результатов после модификации .....	33
4. Финансовый менеджмент .....	37
5. Социальная ответственность .....	54
Заключение .....	67
Список используемых источников .....	68

## ВВЕДЕНИЕ

Тераностика - молодое направление в медицине, основывающееся на создании фармакологических решений для одновременной диагностики и терапии заболеваний. Показательным примером является лечение раковых опухолей путем обнаружения циркулирующих раковых клеток в крови и последующим уничтожением. Множество работ посвящено исследованию применения плазмонных наночастиц в тераностике. Эффективность диагностики определяется усилением сигнала от ГКРС, в то время как терапия осуществляется посредством фототермического нагрева. На сегодняшний день не было статей о влиянии изменения кристаллизации наночастиц на усиление сигнала спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния и фототермического эффекта. Данный вопрос и является основной целью работы. Для наблюдения модификации наночастиц до и после облучения было произведено снятие топографии с помощью атомно-силовой микроскопии и измерена проводимость поверхностного слоя с помощью сканирующей емкостной микроскопии. Процесс изменения кристалличности наночастицы был произведен с помощью лазерного облучения импульсным лазером с длиной волны 405 нм и выходной мощностью 1 Вт.

В дальнейшем планируется сверить экспериментальные данные с моделью, выполненной с помощью программы Comsol Multiphysics, а также проверка фототермического эффекта через проведение фотокаталитической реакции распада 4-нитробензентиола на составляющие. Оценочной характеристикой будет выступать соотношение интенсивности пиков двух составляющих -  $\text{NO}_2$  и  $\text{NH}_4$ , чем выше нагрев системы - тем больше соотношение.



## 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

### 1.1 Локализованный поверхностный плазмонный резонанс

Усиление излучения наночастицами золота, отраженное в их интенсивном цвете, происходит от основного фотофизического отклика. Когда металлическая частица подвергается воздействию света, изменяющееся электромагнитное поле вызывает коллективное когерентное колебание свободных электронов (электронов зоны проводимости) металла. Это электронное колебание вокруг поверхности частицы вызывает разделение заряда относительно ионной решетки, образуя дипольное колебание вдоль направления электрического поля света (рис. 1А). Амплитуда колебаний электронов достигает максимума на определенной частоте, такое явление называется локализованным поверхностным плазмонным резонансом (ЛППР) [1]. ЛППР вызывает сильное поглощение и рассеяние падающего света и, таким образом, может быть измерено с помощью спектрофотометра. ЛППР для плазмонных наночастиц из благородных металлов, особенно Au и Ag, намного сильнее, чем для других металлов. Интенсивность полосы ЛППР и длина волны зависят от факторов, влияющих на плотность заряда электрона на поверхности частицы, таких как тип металла, размер частицы, форма, состав и диэлектрическая проницаемость окружающей среды, как описано теорией Ми. Для частиц размером менее 20 нм ЛППР, можно описать следующим уравнением [2,3,4].

$$C_{ext} = \frac{24\pi^2 R^3 \varepsilon_m^{3/2}}{\lambda} \times \frac{\varepsilon_i}{(\varepsilon_r + 2\varepsilon_m)^2 + \varepsilon_i^2}$$

где  $C_{ext}$  - поперечное сечение экстинкции;  $\lambda$  - длина волны падающего света,  $R$  – радиус наночастицы,  $\varepsilon$  - комплексная диэлектрическая проницаемость металла, заданная как  $\varepsilon = \varepsilon_r(\omega) + i\varepsilon_i(\omega)$ ,  $\varepsilon_r(\omega)$  - действительная часть, а  $\varepsilon_i(\omega)$  - мнимая часть диэлектрической функции металла,  $\varepsilon_m$  - диэлектрическая проницаемость окружающей среды, которая связана с показателем преломления среды  $\varepsilon_m = n_m^2$ .

Действительная часть диэлектрической проницаемости металла определяет положение ЛППР, а мнимая часть определяет ширину полосы. ЛППР возникает, когда  $\epsilon_r(\omega) = -2\epsilon_m$ . Наночастицы золота, серебра и меди показывают сильную интенсивность ЛППР в видимой области, в то время как другие металлы показывают широкую полосу и слабую интенсивность в УФ области [5, 6].

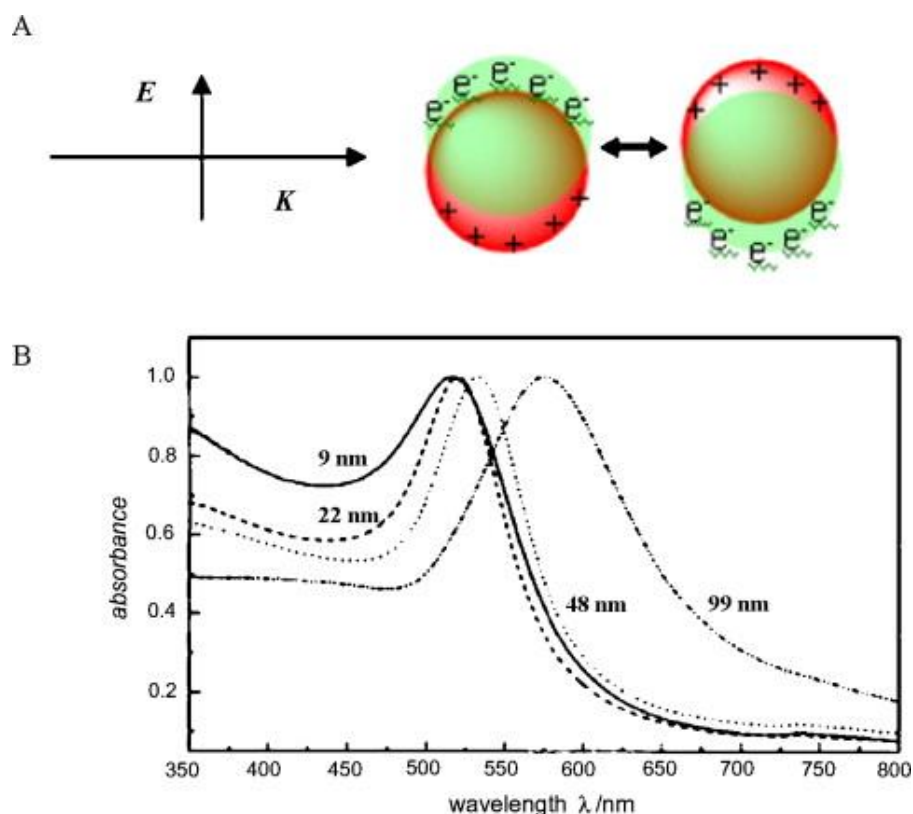


Рисунок 1 – (А) Схематическое изображение поверхностного плазмонного резонанса в плазмонных наночастицах. (В) Спектры экстинкции наночастиц золота разных размеров. Электрическое поле падающего света вызывает когерентные коллективные колебания электронов зоны проводимости по отношению к положительно заряженным ядрам атомов. Это дипольное колебание резонирует с входящим светом на определенной частоте, которая зависит от размера и формы частиц. Для наночастиц золота длина волны ЛППР составляет около 520 нм, однако это значение меняется в зависимости от размера наночастиц [7].

Золотые наночастицы показывают полосу ЛППР около 520 нм в видимой области, однако на полосу ЛППР влияет размер частиц [7] (рис. 1В). Полоса ЛППР наночастиц золота размером менее 10 нм в значительной степени затухает из-за фазовых изменений, вызванных повышенной скоростью столкновений электронов с поверхностью по сравнению с частицами более крупных размеров. При увеличении размера частиц длина волны ЛППР сдвигается в красную область, а также увеличивается интенсивность. Для частиц размером более 100 нм расширение полосы очевидно из-за доминирующих вкладов от электронных колебаний более высокого порядка.

## 1.2 Поверхностное плазмонное поглощение и рассеяние

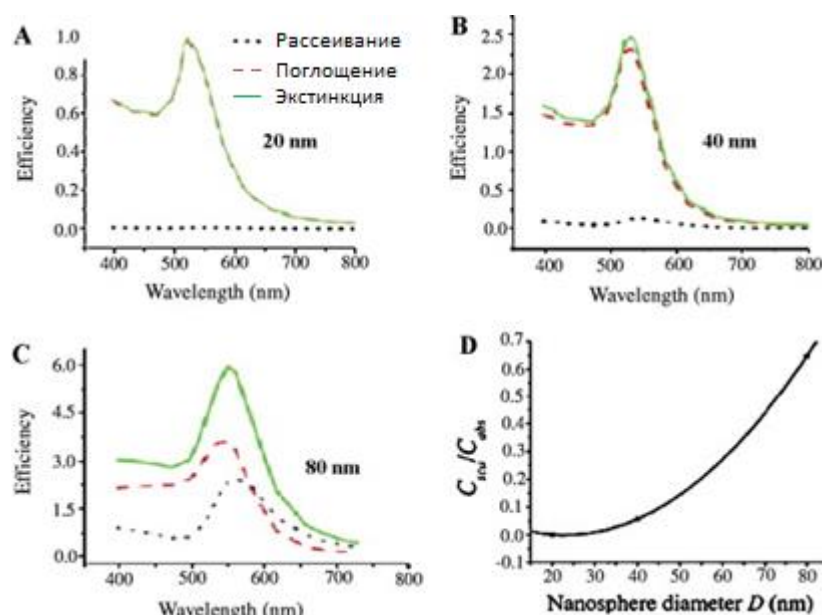


Рисунок 2 – Изменение относительного вклада поверхностного плазмонного поглощения и рассеяния путем изменения размера частиц. Рассчитанная эффективность поглощения, рассеяния и полного поглощения (экстинкции) поверхностного плазмона золотых наночастиц диаметром (А) 20нм; (В) 40нм и (С) 80нм. (D) Зависимость отношения сечения рассеяния к сечению поглощения от диаметра наночастиц золота. Увеличение размеров частиц приводит к увеличению вклада рассеяния  $M_i$  [8].

Потеря энергии электромагнитной волны (полное поглощение света) после прохождения через вещество происходит в результате двух вкладов: процессов поглощения и рассеяния. Поглощение света происходит, когда энергия фотона рассеивается из-за неупругих процессов. Рассеяние света происходит, когда энергия фотона вызывает колебания электронов в веществе, которые испускают фотоны в форме рассеянного света либо на той же частоте, что и падающий свет (рэлеевское рассеяние), либо на смещенной частоте (комбинационное рассеяние). Во втором случае сдвиг частоты соответствует разности энергий, создаваемых движением атомов внутри вещества (вращением молекулярных связей, их растяжением или колебаниями). Из-за ЛППР поглощение и рассеяние света усиливаются, и становится на 5–6 порядков сильнее, чем у наиболее сильно поглощающих молекул органического красителя, и чем у излучения наиболее сильно флуоресцентных молекул, соответственно [8].

### 1.3 Золотые наностержни

Золотые наночастицы на протяжении десятилетий удивляли ученых в значительной степени благодаря способности управления оптическими свойствами путем управления формой, составом и структурой частиц. Как и предсказывалось теорией Гана в 1915 г. [10], при изменении формы наночастиц золота от сфер к стержням (рис. 3А) полоса ЛППР разбивается на две полосы: продольную - сильная полоса в области ближнего ИК, соответствующая колебаниям электронов вдоль длинной оси, и поперечную - слабая полоса в видимой области на длине волны, аналогичной полосе длины волны золотых наносфер. В то время как поперечная полоса нечувствительна к изменениям размера, продольная полоса смещена в красный регион в значительной степени из видимой области в ближнюю инфракрасную область с увеличением отношения длина/ширина, в результате чего цвет меняется с синего на красный (Рис. 3В и С). В настоящее время это соотношение можно точно контролировать путем изменения экспериментальных параметров, таких как

катализ под действием ионов серебра в методе, разработанном группами Мерфи и Эль-Сайеда [11, 12]. Наностержни образуются при асимметричном росте небольших золотых сфер в присутствии формообразующих поверхностно-активных веществ, слабых восстановителей и катализаторов [13].

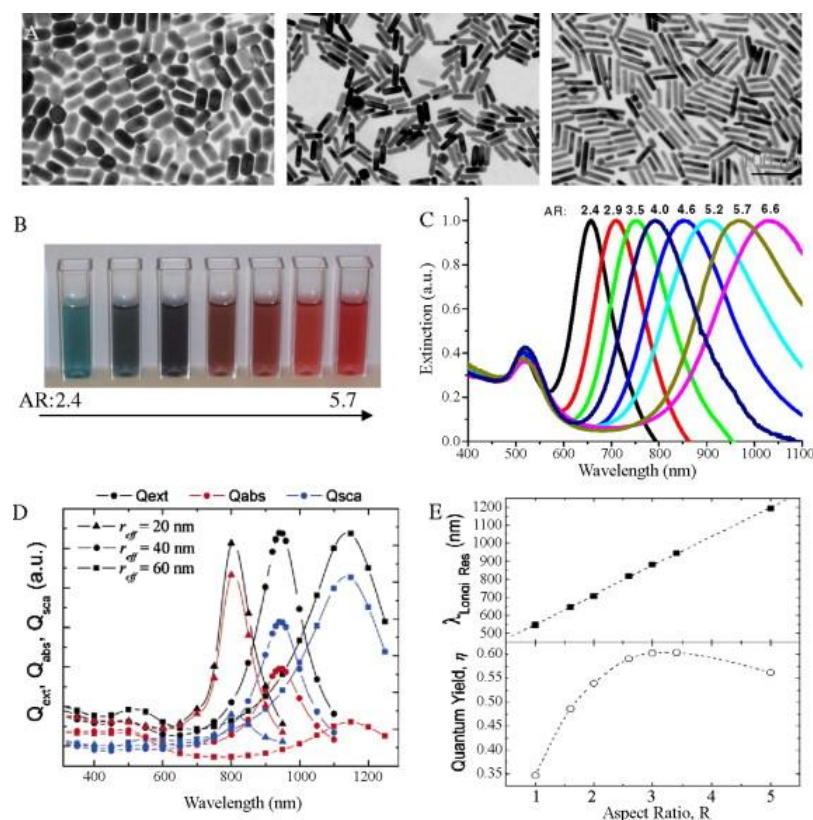


Рисунок 3 – Изменение оптических свойств золотых наностержней путем изменения пропорций. Золотые наностержни с разным соотношением сторон имеют разные размеры, как видно из просвечивающей электронной микроскопии (А), различные цвета (В) и различные длины волны ЛППР (С). (D) Моделирование оптических свойств золотых наностержней разных гидродинамических диаметров. (Е) Зависимость длины волны ЛППР от соотношения сторон (вверху) и зависимость квантового выхода рассеяния (эффективность рассеяния/эффективность поглощения) от соотношения сторон (внизу) (D) и (E) [9].

#### 1.4 Фототермический эффект наночастиц золота

В дополнение к улучшенным и управляемым оптическим свойствам, главным образом, рассеиванию света, полезным для оптической визуализации, золотые наночастицы могут преобразовывать поглощенный свет в тепло посредством ряда безызлучательных процессов, которые были тщательно изучены группой Эль-Сайеда и другими исследователями. [2, 16, 17] По сути, процесс преобразования энергии начинается с быстрой потери фазы в течение фемтосекунд когерентно возбужденных электронов излучения, температура которых достигает 1000 К, при столкновении с электронами решетки. Затем электрон передает энергию фонону через электрон-фононные взаимодействия за 0,5–1 пс, в результате чего температура решетки поднимается на несколько десятков градусов. Процесс электрон-фононной релаксации не зависит от размера и формы, а также не зависит от поперечного или продольного поверхностного плазмона в стержнях [18].

В зависимости от количества полученной энергии могут происходить три следующих процесса: (1) Решетка охлаждается, передавая тепло в окружающую среду посредством фонон-фононной релаксации в течение  $\sim 100$  пс. Этот процесс приводит к разогреву окружающей среды. Такое быстрое преобразование и рассеяние энергии можно использовать для достаточного нагрева физически адсорбированных или химически связанных раковых клеток с использованием выбранной длины волны света, которая максимально перекрывается с полосой поглощения наночастиц ЛППР. (2) Содержание тепла в решетке достаточно для того, чтобы привести к плавлению частиц. Нагрев решетки электронами и охлаждение окружающей средой - конкурентный процесс. Если скорость нагрева намного выше, чем скорость охлаждения, внутри решетки накапливается большое количество тепла, достаточное для того, чтобы привести к структурным изменениям частиц, таким как плавление наночастиц или фрагментация в наносекундах. В 1999 году Линк и его коллеги [18] обнаружили, что наностержни меняют форму на сферическую,

сравнимого объема при умеренных энергиях с помощью 100-фемтосекундного лазера на 800 нм, и фрагментируются на более мелкие сферы при использовании высокоэнергетического 7-наносекундного лазера или фемтосекундного лазера более высокой энергии. (3) Содержание тепла в решетке достаточно для того, чтобы привести к абляции частиц в течение сотен фемтосекунд. Чтобы использовать выработанное тепло для лечения рака, первый процесс должен преобладать над вторым, который обычно реализуется с помощью лазеров с непрерывным излучением, которые позволяют рассеивать тепло от частиц к окружающей среде. Импульсный лазер высокой энергии, как правило, приводит к изменениям структуры частиц из-за быстрого массивного выделения тепла с помощью лазерных импульсов высокой интенсивности за очень короткое время.

### 1.5 Фототермический эффект на основе золотых наностержней

В 2006 году Эль-Сайед и соавт. впервые продемонстрировали фототермический эффект (ФТЭ) с использованием золотых наностержней *in vitro* [19]. Как обнаружено с помощью темнопольной микроскопии и спектров микропоглощения, золотые наностержни, конъюгированные антителами к раковым клеткам, специфически связываются с ними. При обработке наночастиц непрерывный титан-сапфировый лазер на длине волны 800 нм, максимально перекрывающийся с полосой поглощения ЛППР наностержней, использовался для электромагнитного облучения раковых клеток. При лазерном воздействии в течение 4 минут было обнаружено, что раковым клеткам требуется половина плотности мощности ( $10 \text{ Вт/см}^2$ ) для фототермического повреждения по сравнению с нормальными клетками ( $20 \text{ Вт/см}^2$ ). По сравнению с наноболочками, использование золотых наностержней позволяет проводить эффективную обработку при втрое меньшей интенсивности лазерного излучения. Это связано с тем, что наностержни обладают более высокой эффективностью поглощения, чем наноболочки с ЛППР на той же длине волны [8]. В недавних исследованиях

было показано, что, когда линейно поляризованный свет преобразуется в циркулярно поляризованный свет, поглощение света золотыми наностержнями усиливается, что приводит к сверхнизкому энергетическому порогу для уничтожения рака (в 5 раз ниже) [20], в случае импульсного лазерного облучения Ниидом и его коллеги обнаружили, что оно может вызывать гибель клеток, но последующее облучение вызывает преобразование наностержней в наносферы [21].

## 1.6 Спектроскопия гигантского комбинационного рассеяния

Первый эксперимент с наблюдением спектра спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния (SERS) был проведен в 1974 году, с тех пор данный процесс был тщательно изучен физически и химически. Ученными было предложено 2 механизма, объясняющих процесс SERS – электромагнитное усиление и химическое усиление. Хорошо известно, что электромагнитный механизм превалирует над химическим, и показывает усиление порядка  $4-11$  значения амплитуды, в то время как химический усиливает сигнал в 10-100 раз. Однако химический механизм может значительно повлиять на процесс протекания SERS [22].

Рассмотрим процесс протекания электромагнитного усиления спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния. В основе лежат взаимодействие света и металла (плазмонное усиление), а также взаимодействие света и молекулы (колебательная спектроскопия). Когда лазерное излучение падает на металлическую поверхность, электромагнитная волна может вызвать коллективное колебание электронов. В случае, когда частота падающей волны совпадет с частотой возбужденного электронного колебания, возникает поверхностный плазмонный резонанс (ППР). Резонансная частота зависит от размера частицы, формы, среды, плотности электронов, эффективной электронной массы и т.д. В металлических наноструктурах ППР может быть сильно локализован в определенной позиции, такое явление названо локализованным поверхностным плазмонным резонансом (ЛППР).



Наночастицы, способные генерировать сильный эффект ЛППР, называются плазмонными наночастицами (ПНЧ). Материалами обычно выступают серебро, золото и медь, потому что они показывают сильный ЛППР в видимой и близкой к инфракрасным областям длин волн. ЛППР приводит к резонансному поглощению или рассеянию падающего света. Таким образом, энергия падающего света может быть эффективно поглощена металлическими наночастицами и приведет к увеличению интенсивности локального электромагнитного поля на поверхности наночастиц на 2-5 порядков, что является ключом к огромному увеличению сигнала SERS [23].

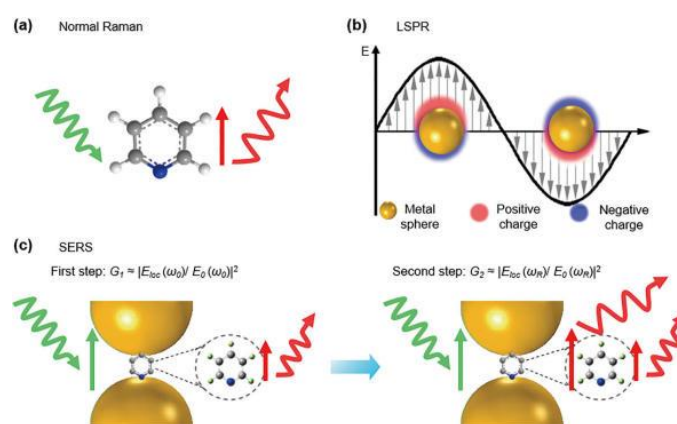


Рисунок 4 – Схемы (а) нормального комбинационного рассеяния, (b) локализованного поверхностного плазмонного резонанса и (с) механизма электромагнитного усиления в SERS, включая двухэтапное усиление [23].

Когда молекулы располагаются вблизи плазмонного материала, процесс неупругого рассеяния может быть значительно усилен, что приводит к так называемому усилению гигантского комбинационного рассеяния. Процесс SERS можно понять с помощью двухэтапного процесса, как показано на рисунке 1с [24]. Первый шаг является результатом усиления локального поля (ближнего поля), окружающего ПНЧ (в качестве приемных оптических антенн) на длине волны возбуждения. ( $\lambda_{ex}$ ):  $E_{loc}(\lambda_{ex}) = G_1 E_0$  где  $G_1$  - коэффициент усиления электромагнитного поля в ближнем поле при  $\lambda_{ex}$ , а  $E_0$  - возбуждающий свет с  $\lambda_{ex}$ . На втором этапе ПНЧ служат в качестве передающих оптических антенн для передачи рамановского сигнала из ближнего поля в

дальнее поле, а рамановский сигнал пропорционален квадрату усиленного локального электрического поля на длине волны комбинационного излучения  $\lambda_{em}$ :  $E_{loc}(\lambda_{em}) = G_2 E_0$ . Следовательно, общее усиление SERS зависит от «возбуждающего» и «излучающего» поля:  $G_{SERS} \propto [E_{loc}(\lambda_{ex})/E_0]^2 [E_{loc}(\lambda_{em})/E_0]^2 = G_1^2 G_2^2$ . Оптимальное усиление SERS требует тонкого баланса между возбуждающими длинами волн и излучения с плазмонным пиком металлической наноструктуры. Когда длины волн падающего лазера и сигнала комбинационного рассеяния Стокса близки друг к другу,  $G_1$  равен  $G_2$ , а коэффициент усиления SERS приблизительно равен четвертой степени локального усиления электрического поля Рис. 4.

Поскольку напряженность локального электрического поля зависит от расстояния между молекулой и поверхностью металла ( $r$ ) на  $E(r) \propto (1 + r/a)^{-3}$  (см. Рисунок 5а), усиление SERS может масштабироваться с  $r$  примерно на  $(1 + r/a)^{-12}$ ;  $a$  - радиус наночастицы. Это соотношение указывает на то, что интенсивность SERS будет значительно уменьшаться с увеличением расстояния (см. Рисунок 5b) [25, 26]. Поэтому необходимо закрепить молекулы на поверхности с наибольшим усилением, чтобы достичь максимальной чувствительности при измерениях SERS.

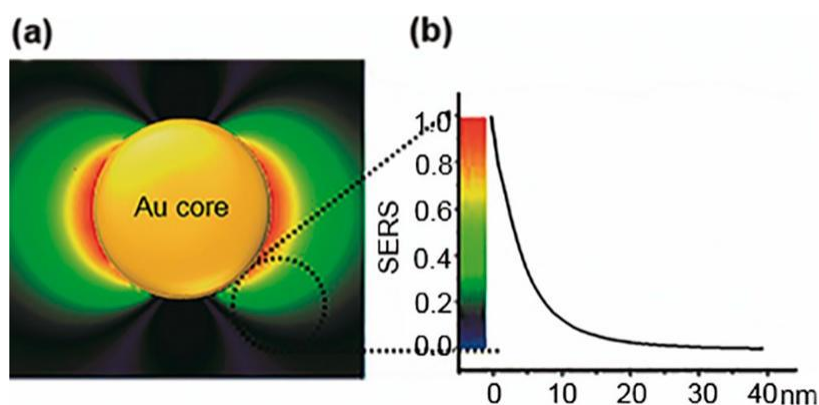


Рисунок 5 – (а) Моделирование распределения электрического поля в золотых наночастицах с помощью метода конечных разностей временной области. (b) Зависимость усиления SERS от расстояния от поверхностей Au [23].

Из рисунка 2b также видно, что, когда аналит находится в непосредственной близости от поверхности ПНЧ (в пределах 5 нм), он может испытывать некоторое, хотя и не самое высокое, усиленное электромагнитное поле от ПНЧ (рисунок 2). Другими словами, рамановские сигналы молекул, которые не находятся в прямом контакте с поверхностью плазмонов, также могут быть усилены.

## 2 ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

### 2.1 Нанесение золотых наночастиц на подложку

Раствор золотых наностержней был предоставлен А. Голубевым из Института биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН. Нанесение раствора золотых наночастиц (Rods 8) производилось с помощью одноканальной микропипетки в объеме 10 мкл. Подложкой выступал высокоориентированный пиролитический графит НОРГ, т.к. он имеет ровную проводящую поверхность. Для достижения хорошей дисперсности и наблюдения индивидуальных наночастиц, перед нанесением раствор был помещен в ультразвуковую ванну на 10 минут. Использовалась модель Skymen Ultrasonics cleaner JP-008 (рис 6) с частотой ультразвука – 40 кГц. Для наблюдения влияния лазерного облучения на наностержни аналогичный раствор Rods 8 был нанесен на НОРГ, в объеме 10 мкл, без удаления остаточного раствора. Таким образом был подготовлен образец для наблюдения и модификации наночастиц золота.



Рисунок 6 – Внешний вид ультразвуковой ванны Skymen Ultrasonics cleaner JP-008.

Полученные результаты наблюдались с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ), сканирующей емкостной микроскопии (СЕМ), а также с помощью ультрафиолетовой спектроскопии, описанных ниже. [27].

## 2.2 Атомно-силовая микроскопия

Для снятия топографии наночастиц, нанесенных на подложку, использовался метод атомно-силовой микроскопии. Микроскоп состоит из следующих блоков (рисунок 7):

- базовый блок;
- измерительный блок:
- измерительная головка;
- сменное основание;
- сканер;
- система видеонаблюдения;
- система управления:
- контроллер;
- компьютер.



Рисунок 7 – Основные элементы атомно-силового микроскопа. 1 – Базовый блок; 2 – измерительная головка; 3 – ПК с системой видеонаблюдения и программным обеспечением; 4 – контроллер [28].

Рассмотрим принцип работы АСМ: на рисунке 8 показан острый наконечник рядом с образцом. Потенциальная энергия между наконечником и образцом  $V_{ts}$  меняет  $z$ -компоненту силы зонд-образец  $F_{ts} = \partial V_{ts} / \partial z$  и жесткость  $k_{ts} = \partial F_{ts} / \partial z$ . В зависимости от режима работы АСМ использует  $F_{ts}$  или некоторое значение, полученное из  $F_{ts}$ , в качестве сигнала для получения изображения.

В отличие от туннельного тока, который имеет очень малую дальность действия,  $F_{ts}$  вносит вклад на дальние и ближние расстояния. Мы можем классифицировать вклады по их диапазону и силе. В вакууме действуют химические силы ближнего действия (доли нм) и Ван-дер-Ваальсовы, электростатические и магнитные силы с большим диапазоном (до 100 нм). При этом значительный вклад в отклонение положения зонда играют силы Ван-дер-Ваальса ( $\approx 10$  нН) и электростатики ( $\approx 5,5$  нН).

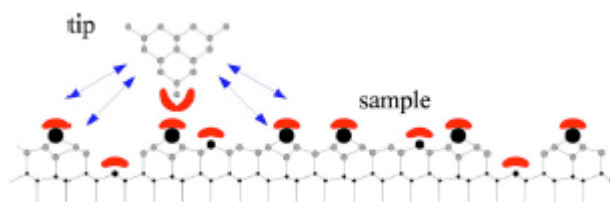


Рисунок 8 – Схематическое изображение наконечника АСМ рядом с образцом. Химические силы ближнего действия действуют, когда электронные орбитали наконечника и образца перекрываются. Силы дальнего действия (обозначены стрелками) возникают во всем объеме и на поверхности наконечника и являются критической функцией мезоскопической формы наконечника [29].

Измерение топографии производилось с помощью полуконтактного метода. Работа прибора при измерении рельефа поверхности с использованием полуконтактного метода является основой для реализации ряда других методов и методик, связанных с использованием резонансных колебаний кантилевера. Особенностью полуконтактного метода – раскачка кантилевера на определенной

резонансной частоте (пределы частоты указываются изготовителем), подаваемый сигнал также регулирует значение амплитуды раскачки Mag.

При проведении измерений использовались сканирующая измерительная головка; АСМ кантилевер серии “GOLDEN” NSG01/Pt, сделанный из монокристаллического кремния N-типа, легированный сурьмой и с покрытием из платины на отражающей стороне и проводящим покрытием из PtIr на стороне зонда. Характеристики зонда приведены в таблице ниже (табл. 1).

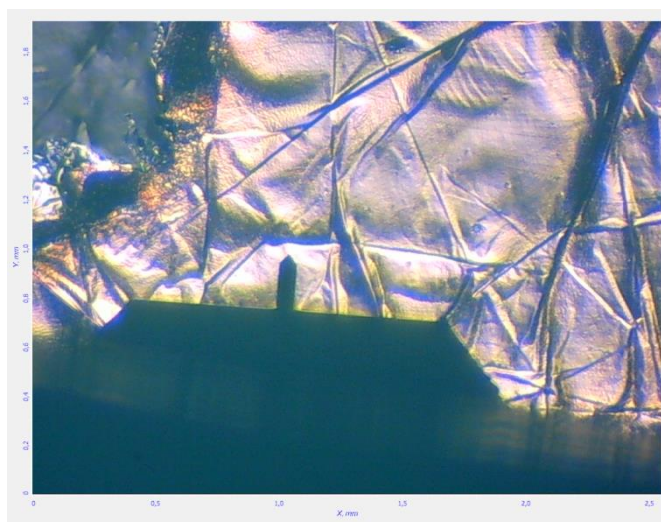


Рисунок 9 – Снимок зонда АСМ и поверхности образца с камеры АСМ.

Исследуемый образец закрепляется на специальном держателе, расположенном на базовом блоке. Сверху устанавливается измерительная головка с измерительной системой и кантилевером. Подвод и изменение расстояния зонд-образец осуществляется с помощью шагового механизма и специального программного обеспечения.

Таблица 1 – Технические параметры зонда. [30]

Высота зонда, мкм	14-16
Радиус острия, нм	35
Толщина покрытия на стороне зонда, нм	20-30

Резонансная частота, кГц	87-230
Модуль упругости, Н/м	5,1

При снятии топографии использовались следующие установленные параметры:

- SetPoint – 2-2.2 нА – параметр, поддерживающий амплитуду колебаний зонда. В среднем выставляется 70% амплитуды на резонансной частоте;
- Gain – 5.00 – коэффициент обратной связи регулирует чувствительность петли на сигнал, подаваемый с зонда;
- Rate – 0.5 Гц – скорость движения зонда;
- Размер изображения: 10x10 мкм, 400 пикселей – количество пикселей влияет на качество изображения.

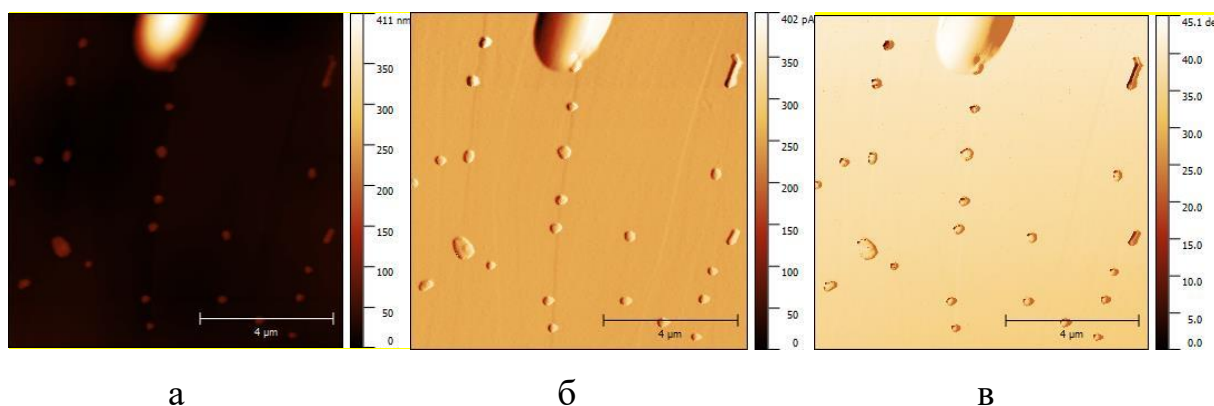


Рисунок 10 – Сигналы, полученные с атомно-силового микроскопа от образца с наночастицами, нанесенных на поверхность высокоориентированного пиролитического графита (HOPG): (а) SensHeight; (б) Mag; (в) Phase.

### 2.3 Сканирующая емкостная микроскопия

Сканирующая емкостная микроскопия (СЕМ) предназначена для исследования распределения поверхностной емкости по образцу. С помощью СЕМ можно изучать локальные диэлектрические свойства приповерхностных слоев образца. Для исключения влияния рельефа поверхности на результаты исследования используется двухпроходная методика. В процессе сканирования



производится следующая процедура. На первом проходе снимается изображение рельефа по полуконтактному методу (Рис. 11).

Затем зондовый датчик отводится от поверхности на расстояние  $dZ$ , между зондом и образцом подается напряжение смещения  $U_0$ , переменное напряжение  $U_1 \sin(\omega t)$ , и осуществляется повторное сканирование. Для увеличения колебаний зонда на второй гармонике частота  $\omega$  выбирается равной половине резонансной частоты зондового датчика. На втором проходе датчик движется над поверхностью по траектории, повторяющей рельеф образца (Рис. 12). Поскольку в процессе сканирования локальное расстояние между зондовым датчиком и поверхностью в каждой точке постоянно, изменения амплитуды колебаний зонда на частоте  $2\omega$  будут связаны с изменением емкости системы зонд-образец.

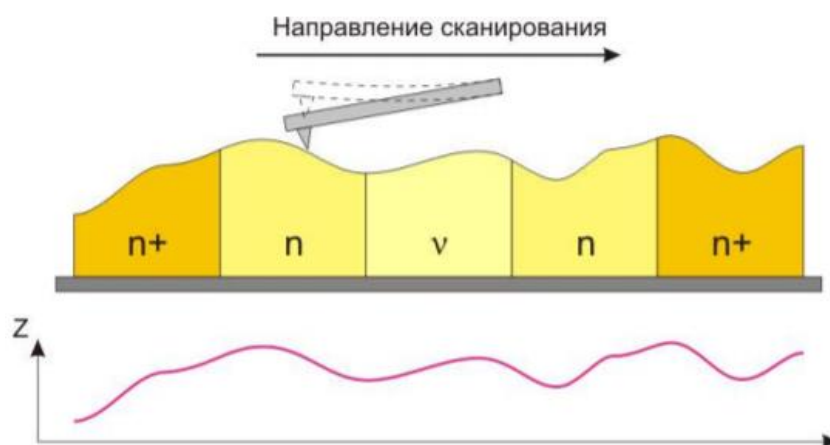


Рисунок 11 – Первый проход. Получение рельефа поверхности [28].

Во время второго прохода расстояние между сканируемой поверхностью и зондовым датчиком должно быть достаточно большим, чтобы исключить влияние рельефа. В таком случае зонд подвергается воздействию только дальнodelствующиx сил, основной вклад в которые осуществляется емкостными свойствами образца. Но расстояние  $dZ$  (рисунок 12) не должно быть чрезмерно большим, так как в этом случае уменьшается измеряемый сигнал и ухудшается латеральное разрешение.



Общая сила на наконечнике во втором сканировании,  $F$ , является суммой двух компонентов: кулоновская сила,  $F_{cou}$ , из-за статического заряда и мультиполей силы образца и емкости,  $F_{cap}$ , из-за поверхностного потенциала и диэлектрического отклика.

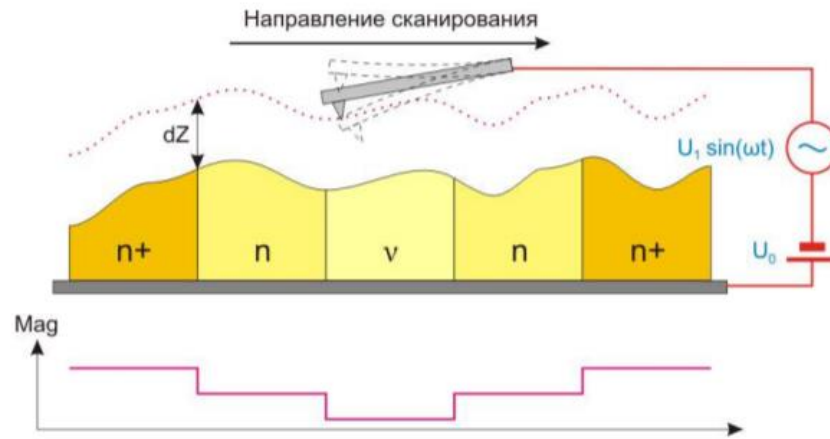


Рисунок 12 – Второй проход  $Mag$  – токовый сигнал пропорциональный амплитуде колебаний зонда [28].

$$F = F_{cou} + F_{cap} = E_z Q_{tip} + \frac{1}{2} \frac{dC}{dz} V^2,$$

где  $E_z$  - z-компонента электрического поля, создаваемого статическим зарядом и мультипольными моментами на поверхности,  $Q_{tip}$  - заряд на наконечнике,  $C$  - емкость между наконечником и подложкой,  $z$  - расстояние между наконечником и подложкой, и  $V = V_{dc} + \phi + V_{ac} \sin(\omega t)$  - это напряжение смещения, приложенное к наконечнику, в котором  $V_{dc}$  - это напряжение смещения постоянного тока,  $V_{ac}$  - амплитуда компонента смещения переменного тока, а  $\phi$  - разность контактного потенциала между наконечником и образцом. Поскольку как электропроводность, так и диэлектрический отклик определяются концентрацией и подвижностью носителей заряда, диэлектрический отклик материала косвенно отражает его электропроводность [28].

## 2.4 Изменение кристалличности золотых наночастиц лазерным облучением

Известно, что размер и форма облученных золотых наночастиц зависит от нескольких параметров – энергии импульса, диаметра лазерного пучка и длины волны излучения. В литературе существует множество статей [18, 31] об облучении и последующем изменении формы ПНЧ с помощью фемтосекундных и наносекундных импульсных лазеров с длиной волны, варьирующейся от 532 до 1064 нм, была выявлена зависимость от энергии фемтосекундных импульсов в пределах от 0,5 до 20 мкДж. Однако ни одна не посвящена исследованию воздействия лазерного облучения.

Таблица 2 – Техническая характеристика лазера Neje DK-8-KZ [32]

Параметр	Значение
Выходная мощность, Вт	1
Длина волны, нм	405
Температура, °С	500
Напряжение питания, В	4.2-5.5
Ток питания, А	1

Настройка кристалличности наночастиц золота была произведена с помощью лазера Neje DK-8-KZ. Технические параметры приведены в табл. – 2. Облучение двух образцов производилось аналогичным образом, с одинаковыми параметрами, используемое время облучения  $t_{\text{обл}} = 50$  мс.

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕДИНЕНИЕ  
И РЕСУРСОБЪЕДИНЕНИЕ»**

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
4B51	Ким Ларисе Робертовне

<b>Школа</b>	<b>ИШНПТ</b>	<b>Отделение</b>	<b>ОМ</b>
<b>Уровень образования</b>	Бакалавр	<b>Направление/специальность</b>	12.04.02 «Оптотехника»

**Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:**

<i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>В исследовании задействовано 2 человека.</i>
<i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Нормы рабочего времени, выполнения исследования</i>
<i>Использованная система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>Отчисления во внебюджетные фонды от ФОТ – 27,1%</i>

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

<i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведение НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	<i>1. Потенциальные потребители НИИ 2. Разработка структуры проекта</i>
<i>Разработка устава научно-технического проекта</i>	<i>Определение: цели и результата проекта, организационной структуры проекта и ограничений, и допущении проекта</i>
<i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	<i>Планирование этапов работы, определение календарного графика и трудоемкости работы, расчет бюджета, определение рисков</i>
<i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	<i>Оценка экономической эффективности проекта</i>

**Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):**

Диаграмма Ганта

**Дата выдачи задания по линейному графику**

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Ассистент	Николаенко Валентин Сергеевич			

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
4B51	Ким Лариса Робертовна		

## 4 ОЦЕНКА КОММЕРЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА И ПЕРСПЕКТИВНОСТИ ПРОВЕДЕНИЯ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ С ПОЗИЦИИ РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТИ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЯ

### 4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Плазмонные наночастицы являются универсальным приспособлением для диагностирования и лечения раковых заболеваний, не имея особых рекомендаций к организму пациента.

В связи с быстро растущей потребностью лечения злокачественных опухолей, применение плазмонов в медицине может стать одним из наиболее востребованных в медицине, в связи с этим плазмонные структуры могут заинтересовать различного рода медицинские учреждения как государственные, так и частные больницы, клиники, медицинские центры, предоставляющие медицинские услуги.

Более того, данная область исследований малоизучена, по этой причине изучение внутренних структур и разработка нового оборудования на основе плазмонных частиц является также привлекательной целью для научно-исследовательских групп, R&D отделов крупных компаний и других научных организаций.

### 4.2 Анализ конкурентных технических решений

На характеристики плазмонных частиц могут влиять несколько параметров. Для получения необходимого результата - усиления сигнала спектроскопии комбинационного рассеяния поверхности и увеличения нагрева частицы от фототермического эффекта - было решено изменить степень кристаллизации структуры плазмона.

Для оценки конкурентоспособности решения было произведено сравнение между результатами от плазменных структур модифицированных по различным параметрам - форма (Бк1), размер (Бк2), кристаллизация (Бк3)

Таблица 3 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Бк1	Бк2	Бк3	Кк1	Кк2	Кк3
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Сложность процесса модификации	0,2	3	4	5	0,6	0,8	1
2. Материалоемкость	0,05	5	2	5	0,25	0,1	0,25
3. Пик усиления электрического сигнала	0,2	3	5	4	0,6	1	0,8
4. Уровень шума выходного сигнала	0,05	3	4	4	0,15	0,2	0,2
5. Пик усиления фототермического эффекта	0,2	4	2	5	0,8	0,4	1
6. Продолжительность процесса модификации	0,05	5	4	3	0,25	0,2	0,15
Экономические критерии оценки эффективности							
7. Конкурентоспособность	0,1	5	4	5	0,5	0,4	0,5

продукта							
8. Срок выхода на рынок	0,05	5	5	4	0,25	0,25	0,2
9. Цена	0,05	2	1	2	0,1	0,05	0,1
Итого	1	35	31	37	3,5	3,4	4,2

Критерии разбалловки проводились по 5-балльной шкале.

Конкурентоспособность параметра вычислялась по формуле:

$$K = \sum B_i * B_i, \text{ где}$$

- $K$  – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;
- $B_i$  – вес показателя (в долях единицы);
- $B_i$  – балл  $i$ -го показателя.

Рассчитав коэффициент конкурентоспособности можно сделать вывод, что модификации плазмонных структур путем изменения кристаллизации является наиболее выгодным вариантом т.к.:

1. Данный способ наиболее эффективен и прост при одинаковых ресурсных затратах в сточки зрения технического процесса;
2. Экономические критерии напрямую будут зависеть от простоты изготовления наночастиц, а значит выбранный вариант окажется верным.

#### 4.3 Планирование научно-исследовательских работ. Структура работ в рамках научного исследования

Планирование комплекса предполагаемых работ осуществляется в следующем порядке:

- определение структуры работ в рамках научного исследования;
- определение участников каждой работы;
- установление продолжительности работ;

- построение графика проведения научных исследований.

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой могут входить научные сотрудники и преподаватели, инженеры, техники и лаборанты, численность групп может варьироваться. По каждому виду запланированных работ устанавливается соответствующая должность исполнителей. В данном разделе необходимо составить перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования, провести распределение исполнителей по видам работ.

Таблица 4 - Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Подбор темы проекта	1	Составление и утверждение плана технического задания	Научный руководитель
Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материалов по теме	Инженер
	3	Календарное планирование выполнения задач	Научный руководитель
Теоретические исследования	4	Моделирование и подтверждение ожидаемых результатов	Инженер
	5	Теоретический расчет и обоснование	Научный руководитель, Инженер
Экспериментальные исследования	6	Синтез плазмонных наноструктур	Инженер
	7	Модификация плазмонов	Инженер

	8	Наблюдение результатов с помощью атомного силового микроскопа	Инженер
	9	Выявление усиления электрического сигнала от спектроскопии комбинационного рассеяния	Инженер
	10	Усиление фототермического отклика модифицированной системы	Инженер
	11	Сопоставление с теоретическими расчетами	Инженер
Оценка результатов	12	Итоговое оформление ВКР	Инженер
	13	Проверка работы с научным руководителем	Научный руководитель, Инженер

#### 4.4 Определение трудоемкости выполнения работ

Важным элементом проведения научного исследования стоит определение трудоемкости выполнения работ каждого из участников. Данная трудоемкость оценивается в человеко-днях, и т.к. зависит от набора факторов, то носит характер вероятности. Среднее значение ожидаемой трудоемкости оценивается с помощью формулы:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{minі} + 2t_{maxі}}{5}, \text{ где}$$

$t_{ожі}$  - ожидаемая трудоемкость выполнения  $i$ -ой работы чел.-дн.;



$t_{minI}$  – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной  $i$ -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{maxI}$  – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной  $i$ -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Далее производится подсчет трудоемкости каждого пункта в рабочих днях  $Tr$ , здесь учитывается параллельность выполнения несколькими исполнителями. Этот расчет необходимо учитывать при расчете заработной платы, т.к. удельный ее вес в общих сметных затратах научных работ составляет примерно 65%.

$$Tr_i = \frac{t_{ожi}}{Ч_i},$$

Где,  $Tr_i$  - продолжительность одной работы, раб. Дн.;

$t_{ожi}$  - ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.

$Ч_i$  - численность исполнителей, одновременно делающих одну и ту же работу на конкретном этапе, чел.

#### 4.5 Разработка графика проведения научного исследования

Наиболее наглядным способом представления графика проведения научных работ является построение диаграммы Ганта.

Диаграмма Ганта - столбчатая гистограмма для иллюстрации временных промежутков, отведенных на определенные операции в проекте.

Временные отрезки в диаграммы представляются в календарных днях. Для их расчета воспользуемся следующей формулой:

$$T_{ki} = Tr_i * k_{кал},$$

Где  $T_{ki}$  - продолжительность выполнения работы в календарных днях,

$Tr_i$  - продолжительность выполнения работы в рабочих днях;

$k_{кал}$  - коэффициент календарности.

Коэффициент календарности рассчитывается по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = T_{\text{кал}} * T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}},$$

Где  $T_{\text{кал}}$  - количество календарных дней в году;

$T_{\text{вых}}$  - количество выходных дней в году;

$T_{\text{пр}}$  - количество праздничных дней в году.

Расчет приводится для пятидневной рабочей недели: где календарных дней в году - 365, выходных дней в году - 104, праздничных дней в году - 14

$$k = 365 * 365 - 104 - 14 = 1,48$$

Представленные данные приведем в таблицу 5:

Название работы	Трудоемкость работ						Исполнит ели		Длительн ость работ в рабочих днях		Длитель ность работ в календар ных днях	
	tmin, чел-дни		tmax, челдн и		тожі , чел-дни				И		И	
	И	НР	И	Н Р	И	НР	И	НР	И	НР	И	НР
Подбор темы проекта	-	3	-	5	-	3,8	-	+	-	4	-	6
Подбор и изучение материалов по теме	1	-	20	-	8,6	-	+	-	8	-	12	-
Календар- ное планирова- ние	-	1	-	2	-	1,4	-	+	-	1	-	2

выполнения задач												
Моделиро- вание и подтверж- дение ожидаемых результатов	1	-	21	-	9	-	+	-	9	-	13	-
Теоретичес- кий расчет и обоснова- ние	1	2	21	4	9	2,8	+	+	9	2	7	3
Синтез плазмонных нанострук- тур	1	-	14	-	6.2	-	+	-	6	-	8	-
Модифика- ция плазмонов	1	-	21	-	9	-	+	-	9	-	7	-
Наблюде- ние результатов с помощью атомного силового микроскопа	2	2	18	6	8.6	3.6	+	+	9	4	13	6

Выявление усиления электричес- кого сигнала от спектроско- пии комбинацио нного рассеяния	2	-	7	-	4	-	+	-	4	-	6	-
Усиление фототерми- ческого отклика модифици- рованной системы	1	-	21	-	9	-	+	-	9	-	7	-
Сопостав- ление с теоретичес- кими расчетами	1	-	2	-	1,4	-	+	-	1	-	2	-
Итоговое оформление ВКР	3	-	14	-	7,4	-	+	-	8	-	11	-
Проверка работы с	2	2	4	4	3	3	+	+	3	3	4	4

научным руководите лем												
Итого									68	13	79	19

Таблица 6 – Календарный план-график проведения НИР

№	Вид работ	Исполнители	$T_{ki}$ , Кал.дн	Продолжительность выполнения работ											
				Февраль			Март			Апрель			Май		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	Подбор темы проекта	Руководитель	6	■											
2	Подбор и изучение материалов по теме	Студент	12		■										
3	Календарное планирование выполнения задач	Руководитель	2			■									
4	Моделирование и подтверждение ожидаемых результатов	Студент	13			■									
5	Теоретический расчет и обоснование	Руководитель/ Студент	7/3				■	■							
6	Синтез плазмонных наноструктур	Студент	8					■							
7	Модификация плазмонов	Студент	7						■						
8	Наблюдение результатов с помощью атомного силового микроскопа	Руководитель/ Студент	13/6						■	■	■				
9	Выявление усиления электрического сигнала от спектроскопии комбинационного рассеяния	Студент	6								■	■			
10	Усиление фототермического отклика модифицированной системы	Студент	7									■	■		
11	Сопоставление с теоретическими расчетами	Студент	2											■	
12	Итоговое оформление ВКР	Студент	11											■	
13	Проверка работы с научным руководителем	Руководитель/ Студент	4/4												■

#### 4.6 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением. В

процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- затраты научные и производственные командировки;
- контрагентные расходы;
- накладные расходы.

#### 4.7 Расчет материальных затрат НТИ

В данном разделе производится подсчет расходов на материалы, необходимые для реализации проекта: сырье для технического обслуживания, материалы на упаковку, предметы для производственной и хозяйственной нужд, изделия монтажа и обработки, средства для испытаний и т.д.

Материальные затраты рассчитываются по формуле:

$$З_m = (1 + k_T) * \sum_{i=1}^m C_i * N_{расхi}$$

где  $m$  – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;

$N_{расхi}$  – количество материальных ресурсов  $i$ -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м<sup>2</sup> и т.д.);

$C_i$  – цена приобретения единицы  $i$ -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м<sup>2</sup> и т.д.);

$k_T$  – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Стоимость транспортных расходов составляет приблизительно 15-25% от общей стоимости материалов.

Таблица 7 - Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы (Зм), руб.
Ручка	шт.	3	20	70
Тетрадь	шт.	4	15	70
Упаковка бумаги (А4)	шт.	1	175	200
Синтезированный раствор золотых наностержней	г/мл <sup>3</sup>	1	2780	3200
Микропипетка механическая одноканальная	шт.	1	2500	2875
Стеклоплатформа	шт	2	30	70
Итого:				6485

#### 4.8 Основная заработная плата исполнителей темы

В эту статью включаются расходы, отведенные на заработную плату научных сотрудников и инженерно-технических рабочих, совместно работающих над исследованием. Величина зарплаты определяется трудоемкостью выполненной работы, системы окладов и тарифных ставок.

Работники, вовлеченные в НТИ, получают заработную плату общей суммой в размере основной и дополнительной (12-20% от основной), вычисленную по следующей формуле:

$$З_{зп} = З_{осн} + З_{доп}$$

Зарплата руководителя предприятия равна произведению среднедневной заработной платы работника и продолжительности работ научно-технического работника:

$$З_{осн} = З_{дн} * T_p$$

Среднедневная зарплата рассчитывается следующим образом:

$$З_{дн} = \frac{З_м * М}{F_d},$$

Где  $З_м$  – месячный должностной оклад работника, руб.;

$М$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 24 раб. дня  $М = 11,2$  месяца, 5-дневная неделя;

при отпуске в 48 раб. дней  $М = 10,4$  месяца, 6-дневная неделя;

$F_d$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Таблица 8 - Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Научный руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	-104	-104
- праздничные дни	-14	-14
Потери рабочего времени	50	93
- отпуск		



- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	197	154

Месячный должностной оклад:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{тс}} * (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) * k_{\text{р}},$$

Где  $З_{\text{тс}}$  – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_{\text{пр}}$  – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от  $З_{\text{тс}}$ );

$k_{\text{д}}$  – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5 (в НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: 15- 20 % от  $З_{\text{тс}}$ );

$k_{\text{р}}$  – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Таблица 9 - Расчет основной заработной платы

Исполнители	Разряд	кт	Зтс, руб.	кпр	кд	кр	Зм, руб	Здн, руб	Тр, раб. дн	Зосн, руб.
Научный руководитель	ДН (PhD)	-	31434	0,3	0,5	1,3	66011	3351	8	26808
Инженер	-	1	1970	0,3	0,5	1,3	4137	268	74	21164
Итого Зосн										47972

#### 4.9 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

Дополнительная заработная плата включает доплату за отклонения от нормальных условий труда, а также за обеспечение компенсаций и гарантий согласно ТК РФ по следующей формуле:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} * З_{\text{осн}}$$

Где  $k_{\text{доп}}$  - коэффициент дополнительной заработной платы (принимается равным 0,12-0,15).

Дополнительная заработная плата научного руководителя составляет:

$$З_{\text{доп}} = 0,12 * 26808 = 3217 \text{ руб.}$$

Дополнительная заработная плата инженера:

$$З_{\text{доп}} = 0,12 * 21164 = 2540 \text{ руб.}$$

#### 4.10 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

В данном пункте отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством РФ нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Формула для отчислений во внебюджетные фонды:

$$З_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} * (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}),$$

где  $k_{\text{внеб}}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.)

Таблица 10 - отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Научный руководитель	26808	3217
Инженер	21164	2540

Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,30
Итого	
Научный руководитель	9008
Инженер	7111

#### 4.11 Накладные расходы

Величина накладных расходов определяется по формуле:

$$З_{\text{накл}} = (\text{сумма статей}) * k_{\text{нр}}$$

где:  $k_{\text{нр}}$  – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

$$З_{\text{накл}} = 320,556 * 0,16 = 51,289 \text{ тыс. руб.}$$

#### 4.12 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Величина затрат НИР – неотъемлемая часть формирования бюджета проекта, который является отправной точкой при оформлении договора на разработку с заказчиком.

Таблица 11 - расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.	Доля затрат, %
1. Материальные затраты ВКР	6485	5
2. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	47972	37,6

3. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	5757	4,5
4. Отчисления во внебюджетные фонды	16119	12,6
5. Накладные расходы	51289	40,3
6. Бюджет затрат НТИ	127622	100

#### 4.12 Вывод

В разделе «финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» была произведена оценка конкурентоспособности научной работы по сравнению с существующими вариациями на рынке, коммерческая ценность разработки и финансовый расчет технологии разработки.

На основании данных, полученных в разделе «финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение», можно сделать следующие выводы: среди имеющихся альтернатив на рынке модифицированные плазмонные наночастицы являются одним из наиболее многообещающих методов для лечения и диагностирования tumors. Процесс производства и модификации путем изменения степени кристаллизации структуры прост и мало затратен в ресурсном плане, а главное эффективен в применении, а значит производство препарата таким путем – выгодное и конкурентоспособное мероприятие.