

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования

**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт природных ресурсов
Направление подготовки 18.03.01 «Химическая технология»
Кафедра ХТТ и ХК


БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Анализ состава масел нефтей и природных битумов
УДК 665.765+665.6.03

Студент


Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д2В	Орешина Александра Александровна		

Руководитель


Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ТПУ	Мойзес Ольга Ефимовна	к.т.н.		
Ведущ. науч. сотр. лаборатории гетероорганических соединений нефти Института химии нефти СО РАН	Антипенко Владимир Родионович	д.х.н., проф.		25.05.16

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент кафедры менеджмента	Рыжакина Татьяна Гавриловна	к.э.н.		17.05.16

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
профессор кафедры ЭБЖ	Ахмеджанов Рафик Равильевич	д.б.н.		25.05.16

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ХТТ и ХК	Юрьев Егор Михайлович	к.т.н.		

Томск – 2016 г.

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 78 с., 37 рис., 24 табл., 28 источников.

Ключевые слова: Природный битум, масла, структурные фрагменты, связанные через эфирные мостики, состав.

Объектами исследования являются масла природного битума (мальты) Ашальчинского месторождения (Татарстан) и продуктов его биodeградации в лабораторных условиях.

Цель работы - определить состав и структуру фрагментов, связанных через эфирные мостики в маслах нефтей и природных битумов.

В процессе исследования были охарактеризованы методами ИК-, ПМР-спектроскопии и хроматомасс-спектрометрии бромпроизводные нефтяных углеводородов и гетероатомных соединений, полученные при селективном разрыве С–О связей в простых и сложных эфирах в маслах природных битумов.

Наличие бромидов ароматических структур подтверждено результатами анализа методами ИК- и ПМР-спектроскопии. В результате исследования методом ХМС в неполярной фракции продуктов бромирования МАБ идентифицированы моно- и дибромиды гомологического ряда АТМБ(C₁₃-C₂₂). Также были обнаружены ионы соответствующие монобромидам осколочного иона n-алканов, моно- и дибромидам молекулярных ионов нафталина, фенантрена, дибензотиофена и их гомологов.

Область применения: Углубление информации о групповом и молекулярном составе масел нефтей и природных битумов. Определение особенностей состава структурных фрагментов, связанных в сложных высокомолекулярных образованиях через эфирные мостики.

Определения, обозначения, сокращения, нормативные ссылки

МАБ – масла Ашальчинского битума;

МАБ-БИО - масла Ашальчинского битума, биодegradированные в лабораторных условиях;

МАБ-БР-СУМ, МАБ-БИО-БР-СУМ – продукты бромирования МАБ и МАБ-БИО неразделенные;

МАБ-БР-НФ и МАБ-БР-ПФ – неполярная и полярная фракции продуктов бромирования масел Ашальчинского битума;

МАБ-БИО-БР-НФ и МАБ-БИО-БР-ПФ – неполярная и полярная фракции продуктов бромирования масел биодegradированного Ашальчинского битума;

ИК-спектроскопия – инфракрасная спектроскопия;

ПМР-спектроскопия – спектроскопия протонного магнитного резонанса;

ХМС – хроматомасс-спектроскопия;

ГЖХ - газо-жидкостная хроматография;

H_{ar} – доля протонов, содержащихся в ароматических структурах;

H_{α} – доля протонов у атома углерода в α -положении алифатических заместителей ароматических структур;

H_{β} и H_{γ} - доля протонов в метиленовых и в концевых метильных группах алифатических фрагментов молекул;

H_{ol} -доля протонов, содержащихся в олефинах;

АТМБ – алкилтриметилбензол;

m/z – отношение массы к заряду;

ЖАХ – жидкостно - адсорбционная хроматография;

ММ – молекулярная масса.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	6
1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ	8
1.1 Переработка нефти	8
1.2 ИК-, ПМР- спектроскопия и хроматомасс-спектрометрия	9
1.3 Хроматография.....	10
1.4 Информация о наличии в нефтяных маслах «связанных» соединений.....	11
1.4.1 Сульфидные мостики	12
1.4.2 Эфирные мостики	12
2 ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ.....	14
2.1 Колоночная хроматография.....	14
2.2 Методики регистрации ИК-спектров, ПМР-спектров и проведения хроматомасс-спектрометрического анализа	15
3 РАСЧЕТЫ И АНАЛИТИКА.....	
3.1 Сравнительная характеристика ИК – спектров масел, продуктов их бромирования (БР – СУМ), полярной и неполярной фракции.....	
3.2 Сравнительная характеристика ПМР – спектров масел, продуктов их бромирования (БР – СУМ), полярной и неполярной фракции.....	
3.3 Сравнительная характеристика неполярных продуктов бромирования МАБ и МАБ-БИО методом ХМС.....	
3.3.1 Алкилтриметилбензолы	
3.3.2 Алканы	
3.3.3 Нафталины.....	
3.3.4 Фенантрены	
3.3.5 Дибензотиофены	
4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	
4.1 Введение.....	
4.2 Анализ конкурентных технических решений	

4.3 SWOT-анализ.....	
4.4 Структура работ в рамках научного исследования	
4.5 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований.....	
4.6 Определение трудоемкости выполнения работ	
4.7 Разработка графика проведения научного исследования	
4.8 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	
4.8.1 Расчет материальных затрат НТИ.....	
Материальные затраты данного НТИ представлены в табл. 11.....	
4.8.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ	
4.8.3 Основная заработная плата исполнителей темы	
4.8.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	
4.8.5 Накладные расходы	
4.8.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского.....	
проекта	
4.9 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	
5 Профессиональная социальная безопасность	
5.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования	
5.2 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований	
5.3 Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов	
5.4 Экологическая безопасность.....	
5.4.1 Анализ влияния объектов и реактивов исследования на окружающую среду.....	
5.4.2 Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду.....	
5.4.3 Обоснование мероприятий по защите окружающей среды	
5.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	
5.5.1 Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований ...	

5.5.2 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований.....	
5.5.3 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС	
5.6 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	
5.6.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	
5.6.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя	
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	
ПРИЛОЖЕНИЕ А	
ПРИЛОЖЕНИЕ Б	
ПРИЛОЖЕНИЕ В.....	
ПРИЛОЖЕНИЕ Г	
ПРИЛОЖЕНИЕ Д.....	
ПРИЛОЖЕНИЕ Е.....	
ПРИЛОЖЕНИЕ Ж.....	
ПРИЛОЖЕНИЕ З	
ПРИЛОЖЕНИЕ И	
ПРИЛОЖЕНИЕ К.....	
ПРИЛОЖЕНИЕ Л.....	

ВВЕДЕНИЕ

Информация о составе компонентов (масел, смол и асфальтенов) тяжелых высоковязких нефтей и природных битумов, большинство из которых являются биodeградированными, необходима для выявления путей их генезиса, решения проблем их добычи, транспортировки, переработки и рационального использования [1]. Информация о составе насыщенных и ароматических углеводородов нефтей и природных битумов обобщена в [1,2], а гетероатомных соединений в [3]. Использование селективных химических реакций для разрыва сульфидных и эфирных мостиков [4], а также термической деструкции масел в условиях двухступенчатого флэш-пиролиза (300, 600 °С, 15 с) [5] в сочетании с анализом полученных продуктов газовой хроматографией с масс-спектрометрическим детектором в режимах «off-line» и «on-line» позволило установить, что алканы, алкилтриметилбензолы, алкилциклогексаны, хейлантаны, гопаны, фенантрены, бензо- и дибензотиофены присутствуют в маслах нефтей и природных битумов не только в молекулярной форме, но и в виде химически связанных структурных фрагментов в составе сложных высокомолекулярных компонентов. Следует, однако, отметить, что разрыв эфирных мостиков в присутствии VBr_3 сопровождается образованием бромидов органических соединений [6], которые перед ХМС-анализом подвергают восстановлению алюмогидридом лития [7]. При этом атом брома в молекуле замещается на атом водорода [4, 7]. При низком относительном содержании в маслах «связанных» структурных фрагментов изменения в составе анализируемых типов соединений при сравнительном ХМС анализе исходных масел и продуктов их химической модификации могут оказаться незамеченными. Кроме того, при использовании описанной методики информация о числе эфирных мостиков, связывающих упомянутые структурные фрагменты, теряется на стадии восстановления бромидов.

В настоящей работе предложен лишенный вышеназванных недостатков альтернативный вариант методики, в котором исключена стадия восстановления бромидов. Бромпроизводные структурных фрагментов, которые находились в исходных маслах в связанном через эфирные мостики виде, достаточно легко определяются в смеси других органических соединений при ХМС-анализе продуктов селективной реакции по наличию в их масс-спектрах характерных дублетов и триплетов, обусловленных примерно одинаковым относительным содержанием стабильных изотопов брома (^{79}Br и ^{81}Br).

Актуальность работы обусловлена необходимостью получения и обобщения информации о составе и строении масляных компонентов нетрадиционных источников углеводородного сырья: тяжелых высоковязких нефтей и природных битумов, для решения проблем их добычи, транспортировки, переработки, а также рационального использования полученных продуктов. Основной задачей является очистка масел от кислород содержащих полярных фракций методом жидкостно-адсорбционной хроматографии и дальнейшее определение структурного состава бромидов и дибромидов органических соединений с использованием ХМС анализа.

Выпускная квалификационная работы состоит в том, чтобы определить состав соединений, связанных через эфирные мостики в маслах нефти и природных битумов. Работа заключается в выделении бромпроизводных нефтяных углеводородов, полученных при селективном разрыве С-О связей в простых и сложных эфирах, и дальнейшей их характеристики методами ИК-, ПМР-спектрометрии и хроматомасс-спектрометрии.

Методы исследования: жидкостно-адсорбционная хроматография, методы ИК-Фурье-, ПМР и хроматомасс-спектрометрии. Целью данной работы заключается в определении состава и структуры фрагментов, связанных через эфирные мостики в маслах изученных объектов.

1 ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

1.1 Переработка нефти

Нефтяные масла представляют собой высококипящие вязкие фракции нефти, очищенные от нежелательных примесей. Они используются для обеспечения жидкостной смазки в различных машинах и механизмах, а также для других промышленных целей. Существуют базовые масла, полученные непосредственно обработкой нефтяных фракций; масла, в которые для улучшения эксплуатационных показателей введены присадки; синтетические масла, полученные из индивидуальных органических соединений с помощью многоступенчатого органического синтеза. Нефтяные масла классифицируются по способу выделения нефти (дистиллятные, остаточные, смешанные); по методу очистки (выщелоченные, кислотнo-щелочной очистки, селективной очистки, адсорбционной очистки и т.д.), по областям применения (смазочные и специальные) [8].

Сырьем для производства смазочных масел служат нефтяные фракции, выкипающие выше 350 °С. В этих фракциях кроме различных групп углеводородов содержатся высокомолекулярные гетероорганические соединения нефти, в молекулах которых содержатся атомы кислорода, серы, азота и некоторых металлов (никеля, ванадия и др.). Эти компоненты масляных фракций обладают различными свойствами, и содержание их в готовых маслах может быть полезным и необходимым или вредным и нежелательным. Поэтому наиболее распространенным путем переработки масляных фракций для получения масел является удаление из них «нежелательных» высокомолекулярных компонентов при максимально возможном сохранении «желательных», способных обеспечить готовым продуктам необходимые физико-химические и эксплуатационные свойства.

Для выбора наиболее рациональной технологии процесса переработки, позволяющей получать масла заданных качеств с максимальным выходом,

необходимо иметь достаточно полное представление о химическом составе исходных нефтей и тех нефтяных фракций, которые поступают в производство. Очевидно, экономически и технически целесообразно перерабатывать на масла те нефти, в тяжелых фракциях которых преобладают «желательные» компоненты. Наоборот, большое количество смолисто-асфальтеновых веществ, полициклических ароматических углеводородов, серосодержащих и других гетеросоединений усложняет переработку, способствует малому выходу целевых продуктов и во многих случаях не позволяет обеспечить нужное их качество [8, 9].

К продуктам переработки нефти относятся:

- топливо моторное
- топливо энергетическое
- нефтяные масла
- углеродные и вяжущие материалы
- нефтехимическое сырье
- нефтепродукты специального назначения
- Парафины и церезины
- Ароматические углеводороды
- Битумы
- Нефтяной кокс

1.2 ИК-, ПМР- спектроскопия и хроматомасс-спектрометрия

Инфракрасная (ИК) спектроскопия является одним из основных методов анализа органических соединений. Современная ИК-спектроскопия представляет собой экспресс-метод установления структурных особенностей органических соединений. С помощью ИК-спектроскопии быстро и надёжно идентифицируются разнообразные функциональные группы: карбонильная, гидроксильная, карбоксильная, амидная, амино-, циано- и др.; различные

непредельные фрагменты: двойные и тройные углерод-углеродные связи, ароматические или гетероароматические системы. Методами ИК-спектроскопии изучают внутри- и межмолекулярные взаимодействия, например, образование водородных связей [10,11].

Метод ПМР дает обширную информацию о структуре неизвестного вещества. По спектру ПМР можно определить: число типов неэквивалентных протонов (по общему числу сигналов); число протонов каждого типа (по интенсивности сигнала); ориентировочное положение протона в составе той или иной группы атомов (по химическому сдвигу); число протонов у соседних атомов углерода (по характеру расщепления сигнала); особенности пространственного расположения протонов и, следовательно, всей молекулы (по константе спин-спинового расщепления). Во многих случаях, особенно когда имеются дополнительные сведения, например об элементном составе, или данные других спектральных методов, по спектру ПМР можно полностью установить структуру соединения [12].

Хроматомасс-спектрометрия (ХМС) - метод анализа смесей главным образом органических веществ и определения следовых количеств веществ в объеме жидкости. Метод основан на комбинации двух самостоятельных методов - хроматографии и масс-спектрометрии. С помощью первого осуществляют разделение смеси на компоненты, с помощью второго - идентификацию и определение строения вещества, количественный анализ [13]. Известны 2 варианта хромато-масс-спектрометрии, представляющие собой комбинацию масс-спектрометрии либо с газожидкостной хроматографией (ГЖХ), либо с высокоэффективной жидкостной хроматографией [14].

1.3 Хроматография

Хроматография, физико-химический метод разделения и анализа смесей, основанный на распределении их компонентов между двумя фазами - неподвижной и подвижной (элюент), протекающей через неподвижную. Хроматографический анализ является критерием однородности вещества: если каким-либо хроматографическим способом анализируемое вещество не разделилось, то его считают однородным (без примесей)[15].

Принципиальным отличием хроматографических методов от других физико-химических методов анализа является возможность разделения близких по свойствам веществ. После разделения компоненты анализируемой смеси можно идентифицировать (установить природу) и количественно определять (массу, концентрацию) любыми химическими, физическими и физико-химическими методами.

В зависимости от природы взаимодействия, обуславливающего распределение компонентов между элюентом и неподвижной фазой, различают следующие основные виды хроматографии:

- адсорбционную;
- распределительную;
- ионообменную;
- эксклюзионную (молекулярно-ситовую);
- осадочную.

Следует иметь в виду, что очень часто процесс разделения протекает по нескольким механизмам.

По применяемой технике:

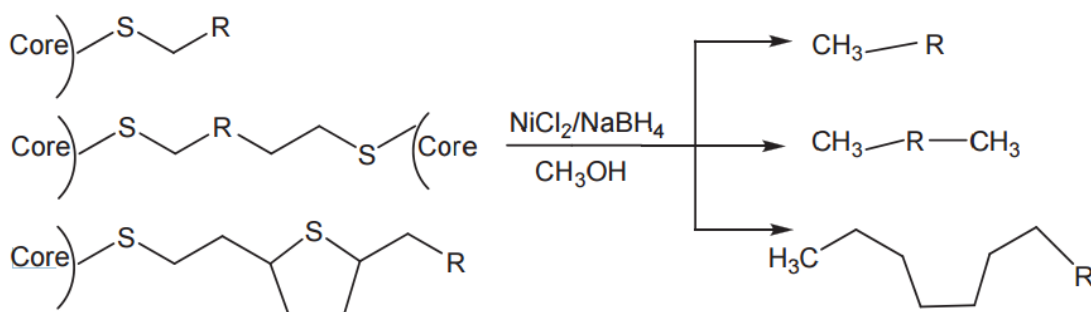
- 1) колоночная хроматография – разделение веществ проводится в специальных колонках;
- 2) плоскостная хроматография [16].

1.4 Информация о наличии в нефтяных маслах «связанных» соединений

В работах [4,5] было показано, что некоторые типы соединений частично находятся в маслах в составе высокомолекулярных компонентов в «связанной» форме, например, через сульфидные и эфирные мостики, а также через С–С связи. В пользу этой концепции свидетельствует установленное нами заметное изменение относительного содержания, группового и молекулярного состава некоторых соединений (гопаны, алкилбензолы, нафталины, дибензотиофены) в летучих продуктах флэш-пиролиза масел высокосернистого природного асфальтита при изменении температуры пиролиза от 400 до 650°C [4]. Эти результаты указывают на наличие в маслах высокомолекулярных компонентов, в которых некоторые соединения находятся в «связанной» форме.

1.4.1 Сульфидные мостики

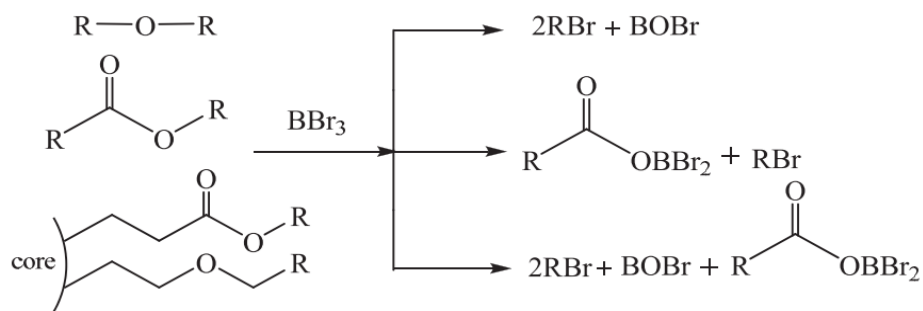
В работе [8] для разрыва сульфидных мостиков (С–S связи) использовали реакцию, схема которой приведена ниже:



где R - структурный фрагмент. Условия реакции позволяют быстро и эффективно разрушать С-S связь в алифатических и насыщенных циклических фрагментах молекул нефтяных компонентов. Сера сульфидных мостиков удаляется в виде сероводорода, который связывается, образуя сульфид никеля.

1.4.2 Эфирные мостики

В работе [8] для разрыва простых и сложноэфирных связей использовали реакции с BBr_3 , протекающие по следующей схеме:



Методика состояла в следующем [5]: К предварительно растворенной в минимальном объеме хлороформа навеске масел (1,5 г) добавляли 40 см^3 1,6 *M* раствора BBr_3 в хлороформе. Смесь кипятили с обратным холодильником при перемешивании с помощью магнитной мешалки в течение 48 ч. Затем смесь охлаждали и добавляли к ней 80 см^3 диэтилового эфира, а после дистиллированную воду (40 см^3). Органический слой отделяли, водную фазу экстрагировали хлороформом. Экстракт и органический слой объединяли, отмывали насыщенным водным раствором KCl , растворитель удаляли с использованием роторного испарителя. Полученный раствор сушили от воды безводным сульфатом натрия и промывали бензолом. Бензол отгоняли в вакууме.

Строение структурных фрагментов *R* в составе исходных эфиров выявляется путем ХМС-анализа продуктов восстановления образовавшихся бромидов алюмогидридом лития [7].

2 ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Исследования проведены на маслах природного битума (мальты) Ашальчинского месторождения [17,18], расположенного на территории Волго-Уральской нефтегазоносной провинции (МАН) и маслах вышеупомянутого Ашальчинского битума, подвергнутого глубокой биодеградации в лабораторных условиях (МАН-БИО, образец предоставлен науч. сотр. ИХН СО РАН, канд. биол. наук Д.А. Филатовым). Для выделения масел была использована методика, включающая осаждение из исходного битума асфальтенов 40-кратным избытком гексана, последующее разделение деасфальтенизата адсорбционной хроматографией на силикагеле на масла, элюированные смесью гексана и бензола (70:30 по объему) и смолы, элюированные смесью этанола и бензола (50:50 по объему). Бромирование МАН и МАН-БИО было проведено аспирантом ИХН СО РАН О.С. Бакановой в соответствии с методикой, изложенной в [8].

2.1 Колоночная хроматография

В нашей работе разделяли продукты бромирования масел с помощью колоночной хроматографии. На рисунке 1 приведена схема устройства для колоночной хроматографии, где:

Адсорбент – неподвижная фаза, Силикагель(150-250 мкм) сухой;

Разделяемая смесь веществ – проба суммарных продуктов разрыва эфирных мостиков в МАН и МАН-БИО;

Элюенты, подвижная фаза – смесь петролейный эфир: бензол (7:3 по объёму), смесь этанол: бензол (1:1 по объёму);

Элюат – выделяемая неполярная и полярная фракции (НФ и ПФ);

Приемник – Приемники фракций. Для сбора фракций использовались обычные плоскодонные конические колбы;

Колонка - хроматографическая колонка - представляет собой стеклянную трубку, один из концов которой заткнут кусочком ваты, для того чтобы сорбент не высыпался.



Рисунок 1 – Устройство для колоночной хроматографии [7]

2.2 Методики регистрации ИК-спектров, ПМР-спектров и проведения хроматомасс-спектрометрического анализа

Исходные МАБ, а также полученные продукты были проанализированы с помощью методов ИК-, ПМР и ХМС, ИК-спектры регистрировали с помощью FTIR-спектрометра «NICOLET 5700» в области $400...4000\text{ см}^{-1}$. Образцы растворяли в CCl_4 , наносили на пластины из KBr. Полученные пленки высушивали. Спектры ПМР регистрировали с помощью ПМР-Фурье спектрометра AVANCEAV 300 фирмы «Bruker» при 300 МГц в растворах CDCl_3 . В качестве стандарта использовали тетраметилсилан. Относительное содержание протонов в различных структурных фрагментах рассчитано исходя из площади сигналов в соответствующих областях спектра: для H_{ar} - (6,6...8,5 м.д.), H_α - (2,2...4,0 м.д.), H_β - (1,1...2,1 м.д.), H_γ - (0,3...1,1 м.д.). Где H_{ar} - доля протонов, содержащихся в ароматических структурах; H_α - доля протонов у атома углерода в α -положении алифатических заместителей ароматических структур; H_β и H_γ - доля протонов в метиленовых и в

концевых метильных группах алифатических фрагментов молекул, соответственно [1].

ХМС-анализ проводили с использованием DFS прибора «TERMO-Scientific». В газовом хроматографе использовали кварцевую капиллярную колонку TR5MS длиной 30 м и внутренним диаметром 0,25 мм. Хроматографирование проводили в режиме программированного подъема температуры от 80 до 300 °С со скоростью 4 град/мин и затем в течение 30 мин при конечной температуре. Газ носитель - гелий. Сканирование масс-спектров веществ, элюированных из колонки, осуществлялось каждую секунду в диапазоне масс до 500 а.е.м. Реконструкцию молекулярно-массового распределения различных типов соединений проводили с использованием характеристических ионов на основе хроматограмм по полному иному току с помощью программы Xcalibur. Идентификацию соединений проводили с использованием литературных данных и компьютерной библиотеки масс-спектров NIST 02 [1].

4 РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОВЕДЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Выделены с использованием колоночной жидкостно-адсорбционной хроматографии и охарактеризованы методами ИК-, ПМР-спектromетрии и хроматомасс-спектromетрии бромпроизводные нефтяных углеводородов, полученные при селективном разрыве С–О связей в простых и сложных эфирах (реагент BBr_3) в маслах природного битума Ашальчинского месторождения, а также в маслах Ашальчинского битума, подвергнутого глубокой биодеградации в лабораторных условиях.

По сравнению с ИК-спектром исходных образцов масел (МАН, МАН-БИО) в ИК-спектрах неполярной фракции продуктов бромирования (МАН-БР-НФ, МАН-БИО-БР-НФ) появилась полоса в области $600\text{--}500\text{ см}^{-1}$, соответствующая наличию связи С–Br. Произошли изменения в относительной интенсивности полос поглощения в области ароматического триплета ($886\text{--}745\text{ см}^{-1}$), произошло заметное уширение и сдвиг полосы, соответствующей наличию ароматических структурных фрагментов: от 1602 до 1582 см^{-1} .

В ИК-спектрах полярных фракций продуктов бромирования в отличие от неполярных фракций значительно выше интенсивность полос поглощения, соответствующих наличию в образцах кислородсодержащих структурных фрагментов, в частности, карбонильной (1705 см^{-1}) и ОН-групп (3420 см^{-1}).

По результатам сравнительного анализа ПМР-спектров исходных масел и неполярной фракции продуктов их бромирования отмечено снижение относительного содержания протонов в ароматических структурах (H_{ar}). Это может быть обусловлено замещением части ароматических протонов атомами брома.

Методом ХМС в неполярной фракции продуктов бромирования МАН идентифицированы моно- и дибромиды гомологического ряда

алкилтриметилбензолов (АТМБ) от АТМБ-С₁₃ до АТМБ-С₂₂. Относительное содержание бромидов заметно выше, чем дибромидов. Важно отметить, что среди моно- и дибромидов присутствуют производные АТМБ состава С₁₃–С₁₇, которые отсутствовали в исходном МАБ. В МАБ-БИО-БР-НФ при ХМС-анализе моно- и дибромидовалкилциклогексанов, хейлантанов, гопанов, стеранов, n-алкилбензолов, алкилметилбензолов и алкилдиметилбензолов признаки их наличия отсутствуют. В МАБ-БР-НФ на хроматограммах предполагаемых монобромидов и дибромидов признаки наличия алкилциклогексанов, стеранов и гопанов не обнаружены (см. Приложение 3, табл. 3.1).

Кроме того, в масс-спектрах некоторых пиков присутствуют ионы, соответствующие монобромидам осколочных ионов n-алканов, моно- и дибромидам нафталина, фенантрена, дибензотиофена и их гомологов. Следовательно, все перечисленные соединения образовались при разрыве эфирных мостиков в компонентах изученных масел из сложных высокомолекулярных образований, в которых соответствующие структурный фрагмент был связан с другими фрагментами молекулы одним или двумя эфирным мостиком.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Введение

Масла являются наиболее легкой частью нефтей и битумов. Информация о составе масел тяжелых высоковязких нефтей и природных битумов необходима для выявления путей их генезиса, решения проблем их добычи, транспортировки, переработки и рационального использования.

Однако при низком содержании в маслах «связанных» структурных фрагментов изменения в составе анализируемых типов соединений по сравнению с исходными маслами могут оказаться незамеченными.

Кроме того, на стадии восстановления бромидов теряется информация о числе эфирных мостиков, связывающих упомянутые структурные фрагменты.

Разработка альтернативного варианта методики определения структуры и состава фрагментов, связанных в нефтяных маслах через эфирные мостики поможет выявить особенность масел природных битумов и направить масла для дальнейшей переработки, и удаления высокомолекулярных соединений, тем самым облагораживая масла нефтей.

Таким образом, масла выделенный из битумов нуждаются в удалении высокомолекулярных соединений, которые можно обнаружить методом разрушения сульфидных мостиков, что еще раз подтверждает значимость заявленной темы выпускной квалификационной работы.

Сегментирование – это разделение покупателей на однородные группы, для каждой из которых может потребоваться определенный товар (услуга).

Сегмент рынка – это особым образом выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками.

Сегментируем рынок услуг по разработке метода анализа масел можно по следующим критериям: размер компании-заказчика, вид метода анализа (рис. 10).

		Вид метода анализа			
		Селективное разрушение	бромирование	ХМС-анализ	ИК-,ПМР-анализ
Размер компании	Крупные				
	Средние				
	Мелкие				

Рисунок 10 - Карта сегментирования рынка услуг по разработке метода анализа масел

 Фирма А
  Фирма Б
  Фирма В

Фирма А – Определение состава масел с помощью алюмогидридалития

Фирма Б – Определение состава масел по масс-спектрам

Фирма В – Определение состава масел с бор-бром-3

4.2 Анализ конкурентных технических решений

При ведении собственного производства необходим систематический анализ конкурирующих разработок во избежание потери занимаемой ниши рынка. Периодический анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности позволяет оценить эффективность научной разработки по сравнению с конкурирующими предприятиями.

Критерии для сравнения и оценки ресурсоэффективности и ресурсосбережения, приведенные в таблица И.1, подбираются, исходя из

выбранных объектов сравнения с учетом их технических и экономических особенностей разработки, создания и эксплуатации.

1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путем, в сумме должны составлять 1.

Подводя итоги оценочной карты, можно сделать вывод, что предлагаемая нами фирма имеет более высокий балл (Бф) по сравнению с баллами конкурента. Плюсы предлагаемой фирмы это высокий балл производительности труда, повышенная конкурента способность и более дешевый реагент, по сравнению с конкурентами. Тем самым, мы можем привлечь покупателей нашей разработкой.

4.3 SWOT-анализ

Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены в табл. 2.

Таблица 2 – Первый этап SWOT-анализа

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Новая методика С2. Анализ с помощью компьютерных программ С3. Анализ проводится при малом кол-ве затраты образцов С4. Возможность модифицировать и добавлять новые идеи в методику</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Нет образцов Томских нефтей для исследования</p>
<p>Возможности: В1. Повышениестоимости конкурентных разработок</p>		
<p>Угрозы: У1. Возможность появленияконкуренциразработки данного метода У2. Появление новых методик со стороны конкурентов</p>		

SWOT– (Strengths – сильные стороны, Weaknesses – слабые стороны, Opportunities – возможности и Threats – угрозы) – это комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Интерактивные матрицы представлены в таблицах 3, 4, 5, 7.

Таблица 3 – Интерактивная матрица проекта «Сильные стороны и возможности»

Сильные стороны проекта					
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4
	B1		+	+	+

Таблица 4 – Интерактивная матрица проекта «Слабые стороны и возможности»

Слабые стороны проекта		
Возможности проекта		Сл1
	B1	

Таблица 5 – Интерактивная матрица проекта «Сильные стороны и угрозы»

Сильные стороны проекта					
Угрозы		C1	C2	C3	C4
	У1	+	-	+	-
	У2	+	-	+	-

Таблица 7 – Интерактивная матрица проекта «Слабые стороны и угрозы»

Слабые стороны проекта			
Угрозы		Сл1	
	У1		-
	У2		-

Таким образом, в рамках третьего этапа может быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа (табл. 8).

Таблица 8 – Итоговая матрица SWOT-анализа

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Новая методика С2. Анализ с помощью компьютерных программ С3. Анализ проводится при малом кол-ве затраты образцов С4. Возможность модифицировать и добавлять новые идеи в методику	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Нет образцов Томских нефтей для исследования
Возможности: В1. Повышение стоимости конкурентных разработок	Методика определения структуры фрагментов, связанных через эфирные мостики в маслах природного битума	По причине отсутствие масел битумов добываемых в Томской области, методика может не показать себя на Томском рынке
Угрозы: У1. Возможность появления конкурентной разработки данного метода У2. Появление новых методик со стороны конкурентов	Новая методика, способность направить масла на улучшения их качества, то есть облагородить масла.	Есть риск возникновения новых методик определения структуры масел, тем самым создавая конкуренции исследуемой методики. А значит будет угроза потери рынка

4.4 Структура работ в рамках научного исследования

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в чей состав входят: бакалавр, научный руководитель, консультант по части социальной ответственности (СО) и консультант по экономической части (ЭЧ) выпускной квалификационной работы. Составим перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования и проведем распределение исполнителей по видам работ (табл. 9)

Таблица 9 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№раб	Содержание работ	Должность исполнителя
1	2	3	4
Выбор направления исследований	1	Выбор направления исследований	Руководитель, бакалавр
	2	Изучение образцов масел	Руководитель, бакалавр
Проведение экспериментов	3	Проведение экспериментов	Бакалавр
	4	Отправка образцов на спектроскопию	Руководитель, бакалавр
	5	Анализ ИК-спектроскопии	Руководитель, бакалавр
	6	Анализ ПМР-спектроскопии	Руководитель, бакалавр
	7	Анализ ХМС	Руководитель, бакалавр
Написание технического задания	8	Составление технического задания	Бакалавр, консультант ЭЧ, СО
	9	Написание технического задания	Бакалавр, консультант ЭЧ, СО
Проведение ВКР			
Написание ВКР	11	Написание ВКР	Бакалавр, Руководитель

4.5 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

Таблица 10 - Морфологическая матрица для проведения анализа

	1	2	3
А. Масла битума(образец)	МАН-БР	МАН-Н	МАН
Б. Растворитель	Петролейныйэфир+безол(7:3)	Петролейныйэфир+безол(7:3)	-
В. Сорбент	Силикагель (150-250 мкм)	Силикагель (150-250 мкм)	-

4.6 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ож\ i}$ используется формула (4):

$$t_{ож\ i} = \frac{3t_{\min\ i} + 2t_{\max\ i}}{5}, \quad (4)$$

где $t_{ож\ i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i – ой работы, чел. – дн.;

$t_{\min\ i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i – ой работы, чел. – дн.;

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

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями:

$$T_{pi} = \frac{t_{ож\ i}}{Ч_i}, \quad (5)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{ож\ i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел. – дн.;

$Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Результаты расчетов занесены в таблице К.1

Р – руководитель

Б – бакалавр

К1 – консультант по экономической части

К2 – консультант по социальной ответственности

4.7 Разработка графика проведения научного исследования

При выполнении дипломных работ студенты становятся участниками сравнительно небольших по объему научных тем, поэтому наиболее удобным и наглядным является построение ленточного графика проведения научных работ в форме диаграммы Ганта.

Диаграмма Ганта – это горизонтальный ленточный график (Таблица К.1), на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ. Данный график строится на основе табл. 16.

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни. Для этого необходимо воспользоваться формулой (6):

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (6)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i – й работы в календарных днях;

T_{pi} – продолжительность выполнения i – й работы в рабочих днях;

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

4.8 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по статьям:

- материальные затраты НТИ;
- основная заработная плата исполнителей темы;
- дополнительная заработная плата исполнителей темы;
- отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления);
- накладные расходы.

4.8.1 Расчет материальных затрат НТИ

Для выполнения данной ВКР требуются материальные затраты на:

- приобретаемые со стороны сырье и материалы, необходимые для создания научно-технической продукции;
- сырье и материалы, покупные комплектующие изделия и полуфабрикаты, используемые в качестве объектов исследований (испытаний) и для эксплуатации.

Таблицы 11 – Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Количество			Цена за ед., руб.			Затраты на материалы, (З _м), руб.		
		Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
МАБ-БР, МАБ-БИО-БР	гр	100	100	100	б/п	б/п	б/п	б/п	б/п	б/п
Гексан	л	1	1	1	720.0	720.0	720.0	720.0	720.0	720.0
Бензол	л	1	1	1	390.0	390.0	390.0	390.0	390.0	390.0
Селикагель	кг	1	1	1	180	180	180	180	180	180
Итого:		3,1	3,1	3,1				1290	1290	1290

Материальные затраты данного НТИ представлены в табл. 11.

4.8.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ

Таблица 12 - Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ

№ п/п	Наименование оборудования			Кол-во единиц оборудования			Цена единицы оборудования, тыс. руб.			Общая стоимость оборудования, тыс. руб.		
	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1.	Масс-спектрометр высокого разрешения, DFS "ThermoScientific"			1	1	1	25205397.25			25205397.25		
2.	Спектрометр инфракрасный Фурье "Nicolet 5700"			1	1	1	7604244.21			7604244.21		
3.	ЯМР-Фурье спектрометр AVANCEAV-300			1	1	1	19141628.43			19141628.43		
Итого:										51951270		

Для оборудования нужно рассчитать величину годовой амортизации по следующей формуле:

$$A_{год} = \frac{C_{перв}}{T_{ни}}, \quad (8)$$

где $C_{перв}$ – первоначальная стоимость, руб;

$T_{ни}$ – время полезного использования, год.

Результаты расчетов приведены в табл.18.

4.8.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НИИ, (включая премии и доплаты) и дополнительную заработную плату. Также включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 – 30 % от тарифа или оклада:

$$З_{зн} = З_{осн} + З_{дон}, \quad (13)$$

где $З_{осн}$ – основная заработная плата;

$З_{дон}$ – дополнительная заработная плата (12 – 20 % от $З_{осн}$).

Основная заработная плата ($З_{осн}$) руководителя от предприятия рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot T_p, \quad (14)$$

где $З_{осн}$ – основная заработная плата одного работника;

$З_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно – техническим работником, раб. дн. (табл.16).

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{дн} = \frac{З_m \cdot M}{F_d}, \quad (15)$$

где Z_m –месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года;

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

Таблица 13–Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Бакалавр	Консультант ЭЧ	Консультант СО
Календарное число дней	140	140	140	140
Количество нерабочих дней				
выходные дни:	16	16	16	16
праздничные дни:	6	6	6	6
Потери рабочего времени				
отпуск:	0	0	0	0
невыходы по болезни:	0	0	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	118	118	118	118

В табл. 13 приведен баланс рабочего времени каждого работника НТИ.

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{mc} \cdot (1 + k_{np} + k_d) \cdot k_p, \quad (16)$$

где Z_{mc} –заработная плата по тарифной ставке, руб.;

k_{np} – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от Z_{mc});

k_d – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5;

k_p –районный коэффициент, для Томска равный 1,3.

Расчет основной заработной платы приведен в табл.14.

Таблица 15 – Общая заработная плата исполнителей

Исполнитель	$Z_{осн}$, руб.	$Z_{доп}$, руб.	$Z_{зн}$, руб.
Руководитель	22137,07	4747,18	26884,25
Бакалавр	24970,9	2103,0	27073,9
Консультант ЭЧ	2552,7	321,6	2874,2
Консультант СО	2552,7	321,6	2874,2

Общая заработная исполнителей работы представлена в табл. 15.

Таблица 14– Расчет основной заработной платы

Категория	$Z_{мс}$, руб.	k_d	k_p	Z_m , руб	$Z_{дон}$, руб.	T_p , раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель							
ППСЗ	12067,25	0,35	1,3	25884,25	1101,34	20,1	22137,07
Бакалавр							
ППС1	8600,25	0,35	1,3	18447,53	745,4	33,5	24970,9
Консультант ЭЧ							
ППСЗ	20080,9	0,35	1,3	34458,8	1276,3	2	2552,7
Консультант СО							
ППСЗ	20080,9	0,35	1,3	34458,8	1276,3	2	2552,6

4.8.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Величина этих отчислений определяется по формуле (17):

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{дон}), \quad (17)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды.

На 2014 г. в соответствии с Федеральным закона от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. Однако на основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2014 году водится пониженная ставка – 30%.

Таблица 16 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	22137,07	4747,18
Бакалавр	24970,9	2103,0
Консультант ЭЧ	2552,7	321,6
Консультант СО	2552,7	321,6
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,30	
Итого:	17912,025	

4.8.5 Накладные расходы

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование графических материалов, оплата услуг связи, электроэнергии, транспортные расходы и т.д. Их величина определяется по следующей формуле:

$$Z_{накл} = k_{нр} \cdot (\text{сумма статей } 1 \div 4), \quad (18)$$

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

Величину коэффициента накладных расходов $k_{нр}$ допускается взять в размере 16%. Таким образом, накладные расходы на данные НТИ составляют 1259933,52руб.

4.8.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Как видно из табл. 17 основные затраты НТИ приходятся на покупку оборудования для проведения исследования.

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в

качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Таблица 17 – Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.			Примечание
	Исп.1	Исп.2	Исп.3	
1. Материальные затраты НИИ	1290	3450	1000	табл. 18
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	51951270	51951270	51951270	табл. 19
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	52213,37	72213,37	32213,37	табл.20
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	7493,38	8976,51	5354,73	табл.21
5. Отчисления во внебюджетные фонды	20897,3	24356,964	11270,43	-
6. Накладные расходы	8325306,248	8329642,695	8320177,365	16 % от суммы ст. 1-5
7. Бюджет затрат НИИ	60358470,3	60389909,54	60321285,9	Сумма ст. 1-6

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект приведен в табл.17.

4.9 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{ri}}{\Phi_{\text{max}}},$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

Φ_{ri} – стоимость i -го варианта исполнения;

Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в размах (значение меньше единицы, но больше нуля).

Таблица 18 - Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Способствует росту производительности труда	0,25	5	5	4
2. Удобство в эксплуатации	0,15	4	4	4
3. Надежность	0,20	5	5	4
4. Воспроизводимость	0,25	4	3	3
5. Материалоемкость	0,15	5	5	4
ИТОГО	1	4,6	4,35	3,75

Таблица 19 - Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	0,797	0,98
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,6	4,35	3,75
3	Интегральный показатель эффективности	4,61	4,3	3,7
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,93	0,81

Вывод: Сравнительный анализ интегральных показателей эффективности показывает, что предпочтительны оба метода определения состава масел (Исп.1 и Исп.2). Второй метод хуже тем, что он дорогостоящий, поэтому альтернативой ему служит первый, исследуемый метод, в котором цена на добавку ниже, что благоприятно влияет на экономическую ситуацию фирмы. Исп.3 менее эффективно в связи с тем, что метод не был модифицирован и у него слабая производительность.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

После очистки масел нефтей от нежелательных примесей в их составе можно обнаружить высокомолекулярные соединения, которые остаются незамеченными. В работе [4,5] были представлены высокомолекулярные компоненты, связанные через сульфидные и эфирные мостики, а также через С–С связи. Главная задача дипломной работы это определение структуры фрагментов, связанных через эфирные мостики. Актуальность работы заключается в разработке метода, который будет эффективным, недорогим и доступным для применения ко всем маслам природных битумов и нефтей.

В литературном обзоре были изучены нефтяные масла, их получение и классификация. Для того чтобы анализировать масла необходимым стало краткое описание ИК -, ПМР- спектроскопии и хроматомасс- спектрометрии. Также рассмотрена хроматография и ее виды. Приведена информация о наличии в нефтяных маслах связанных соединений через сульфидные и эфирные мостики.

Экспериментальная часть дипломной работы была проведена в институте химии нефти СО РАН (город Томск). Цель работы состояла в разделении продуктов бромирования масел с помощью колоночной хроматографии. Всего было разделено 11 образцов. Для полного анализа было выбрано два образца: масла природного битума (мальты) Ашальчинского месторождения и того же образца только подвергнутого глубокой биодеградациии в лабораторных условиях. Разделенную неполярную часть анализировали с помощью методов ИК-, ПМР и ХМС. Задав характеристические ионы для «чистых» соединений и их моно- и дибромидов (таблица Б.1), по методу ХМС определили в полученных масс-спектрах наличия характерных дублетов и триплетов различных соединений и свели полученные данные в таблицу 3.1 для наглядного сравнения образцов. По проделанной работе можно сделать выводы:

- ХМС-анализ бромидов органических соединений, образующихся при разрыве С–О связи в простых и/или сложных эфирах компонентов масел природного битума, позволяет получить информацию о составе структурных фрагментов, связанных через один или два эфирных мостика в составе сложных высокомолекулярных образований;

- Алкилтриметилбензолы, n-алканы, а также нафталин, фенантрен, дибензотиофен и их гомологи присутствуют в маслах изученных объектов не только в молекулярной форме, но и в виде структурных фрагментов, связанных через один или два эфирных мостика в составе сложных высокомолекулярных образований;

- Алкилтриметилбензолы состава С13–С17, в отличие от гомологов состава С18–С21, в исходных маслах были полностью связаны с другими фрагментами сложных высокомолекулярных образований одним или двумя эфирными мостиками.

В разделе финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение произведен расчет бюджета затрат лаборатории (табл. 17), а также представлен календарный план-график проведения ВКР (таблица Л.1).

В разделе социальной ответственности изложены вредные факторы химической лаборатории, перечислены возможные чрезвычайные ситуации на месте исследования и названы негативные влияния на окружающую среду.

Предложенный метод определения структуры фрагментов, связанных через эфирные мостики в маслах природного битума Ашальчинского месторождения, позволяет выполнить поставленные нами цели и задачи.

В дальнейшем есть перспектива продолжить испытывать данный метод анализа на других образцах для подтверждения эффективности предложенного метода.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СТУДЕНТА

1. Орешина А.А., Баканова О.С., Антипенко В.Р. Методика определения структуры фрагментов, связанных через эфирные мостики в маслах природного битума // XIII Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук», Том 2, Химия. 2016г. С. 53-55.
2. Орешина А.А., Искрижицкая Д.В. Изучение адсорбционной активности сорбента мха *Sphagnum Dill* // XV Международная научно-практическая конференция имени профессора Л.П. Кулева студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке», Том 2, Материалы, 2014г. С. 171-173.
3. Орешина А.А., Искрижицкая Д.В., Пименова А.С. Изучение процесса водопоглощения природными сорбентами // XV Международная научно-практическая конференция имени профессора Л.П. Кулева студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке», Том 2, Материалы, 2014г. С. 278-279.