

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



Институт физики высоких технологий
Направление подготовки 19.04.01 Биотехнология
Кафедра биотехнологии и органической химии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Получение бензгидриламинов с использованием реакции Риттера
УДК 661.715

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ДМ41	Ахманова Оксана Евгеньевна	<i>О. Ахманова</i>	17.06.16

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры БИОХ ИФВТ НИ ТПУ	Штрыкова В.В.	к.х.н., доцент	<i>В.В. Штрыкова</i>	03.06.2016

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент кафедры МЕН ИСГТ НИ ТПУ	Грахова Е.А.		<i>Е.А. Грахова</i>	25.05.2016

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор кафедры ЭБЖ ИНК НИ ТПУ	Ахмеджанов Р.Р.	д.б.н.	<i>Р.Р. Ахмеджанов</i>	16.05.16

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор кафедры БИОХ ИФВТ НИ ТПУ	Краснокутская Е.А.	д.х.н., профессор	<i>Е.А. Краснокутская</i>	3.06.16

Планируемые результаты обучения
по ООП 19.04.01 «Биотехнология» (магистр)
профиль «Биотехнология»

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
Профессиональные компетенции	
P1	Профессионально эксплуатировать современные биотехнологические производства, обеспечивая их высокую эффективность и безопасность
P2	Разрабатывать и внедрять новые биотехнологические процессы и оборудование в рамках проектирования новых и усовершенствования действующих производств
P3	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в различных областях прикладной биотехнологии
Универсальные компетенции	
P4	Ставить и решать задачи инженерного анализа для создания инновационных биотехнологических процессов и продуктов
P5	Эффективно организовывать и участвовать в работе коллективов, в том числе международных, демонстрировать ответственность за результаты инженерной деятельности
P6	Демонстрировать глубокие знания социальных, этических и правовых аспектов инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах устойчивого развития
P7	Постоянно повышать интеллектуальный и общекультурный уровень и профессиональную квалификацию, способствовать обучению персонала

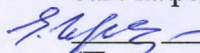
Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»



Институт физики высоких технологий
Направление подготовки 19.04.01 Биотехнология
Кафедра биотехнологии и органической химии

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. кафедрой БИОХ

 Краснокутская Е.А.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФИО
4ДМ41	Ахмановой Оксане Евгеньевне

Тема работы:

Получение бензгидриламинов с использованием реакции Риттера	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	№ 3085/с от 25.04.16

Срок сдачи студентом выполненной работы:

3.06.16

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе

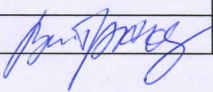
(наименование объекта исследования или проектирования;
производительность или нагрузка;
режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.);
вид сырья или материал изделия;
требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).

Объектом исследования являются бензгидриламины, получаемые с использованием реакции Риттера.

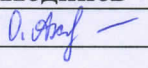
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов (аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).	1. Литературный обзор 2. Объект и методы исследования 3. Экспериментальная часть 4. Результаты исследования 5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение 6. Социальная ответственность Заключение
Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)	
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Ассистент кафедры менеджмента ИСГТ НИ ТПУ Грахова Е.А.
Социальная ответственность	Профессор кафедры ЭБЖ ИНК НИ ТПУ Ахмеджанов Р.Р.
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
Литературный обзор	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	14.03.16
--	-----------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Штрыкова В.В.	к.х.н., доцент		14.03.16

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ДМ41	Ахманова О.Е.		14.03.16

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА

«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСООБЪЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ» Студенту:

Группа	ФИО		
4ДМ41	Ахмановой Оксане Евгеньевне		
Институт	физики высоких технологий	Кафедра	биотехнологии и органической химии
Уровень образования	Магистр	Направление	19.04.01 Биотехнология

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	При проведении исследований используется оборудование и лабораторная посуда лаборатории НИ ТПУ. В исследовании задействованы 2 человека: дипломник и научный руководитель.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	В соответствии с ГОСТ 14.322-83 «Нормирование расхода материалов» и ГОСТ Р 51541-99 «Энергосбережение. Энергетическая эффективность»
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Отчисления на социальные нужды (27,1% от заработной платы)

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	1.1.Инициация проекта и его технико-экономическое обоснование 1.2.Анализ потенциальных потребителей исследования. 1.3.Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения 1.4.SWOT-анализ
2. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	2.1. Структура работ в рамках научного исследования 2.2. Определение трудоемкости выполнения работ 2.3.План проекта
3. Формирование бюджета научных исследований	3.Бюджет научного исследования
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	4.1.Оценка сравнительной эффективности исследования

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

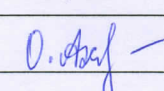
1. Сегментирование рынка
2. Матрица SWOT
3. График проведения и бюджет НТИ
4. Оценка сравнительной эффективности НТИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	14.03.16
--	----------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Грахова Е.А.			19.04.16

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ДМ41	Ахманова Оксана Евгеньевна		29.04.16

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
4ДМ41	Ахмановой Оксане Евгеньевне

Институт	Физики Высоких Технологий	Кафедра	Биотехнологии и органической химии
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	19.04.01 Биотехнология

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<i>Объектом исследования являются бензгидриламины, полученные с использованием реакции Риттера.</i> <i>Рабочая зона – лаборатория органического синтеза.</i> <i>Область применения – органическая химия.</i>
--	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Производственная безопасность 1.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности: – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты; – (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства). 1.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности: – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения).	<i>Выявление вредных и опасных факторов в лаборатории органического синтеза при разработке и эксплуатации проекта:</i> - вредные вещества, освещение, шум - физико-химическая природа вредности веществ и их связь с разрабатываемой темой; - действие вредных веществ на организм (этанол, ацетон, изопропанол, этилацетат и т.д.); - микроклиматические условия - термическая опасность (оборудования с повышенной температурой) - электробезопасность (наличие химически активной и органической среды, разрушающей изоляцию и токоведущие части электрооборудования) - пожаровзрывоопасность (оборудование, работающее под давлением и наличие легковоспламеняющихся жидкостей) - предлагаемые средства защиты для работы в лаборатории (халаты, маски, перчатки).
2. Экологическая безопасность: – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками	- вредные вещества, которые выделяются в окружающую среду во время проведения исследований - химическое загрязнение водотоков в результате удаления неорганических и органических отходов в канализационную сеть - твердые отходы - разработка решения по обеспечению экологической безопасности

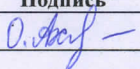
на НТД по охране окружающей среды.	
3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях: – перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.	- пожар - взрыв - разрушение зданий в результате разрядов атмосферного электричества - ураган - землетрясения
4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	- "Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 31.12.2014) - Приказ Министерства здравоохранения и социального развития Российской Федерации от 17 декабря 2010 г.

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	14.03.16
--	----------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ахмеджанов Р.Р.	д.б.н.		15.04.16

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ДМ41	Ахманова О.Е.		15.04.16

РЕФЕРАТ

Магистерская диссертация с.111, рис. 22, табл. 22, 81 источник

Ключевые слова: БЕЗГИДРИЛАМИНЫ, БЕНЗГИДРИЛАЦЕТАМИДЫ, РЕАКЦИЯ ЛЕЙКАРТА - ВАЛЛАХА, РЕАКЦИЯ РИТТЕРА, СИНТЕЗ.

Объектом исследования являются бензгидриламины, синтезируемые в процессе данной работы.

Цель работы – разработка нового метода получения бензгидриламинов.

В процессе исследования проводилась апробация реакции Риттера для получения алкиламинов.

В результате исследования получены бензгидриламины.

Степень внедрения: лабораторная методика получения бензгидриламинов.

Область применения: органическая химия, медицина.

В будущем планируется использование метода в технологии получения препарата «Галодиф».

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

БГМ – бензгидрилмочевина

БГА – бензгидриламин

БГАА – бензгидрилацетамид

БГ – бензгидрол

БФ – бензофенон

ХА – хлорангидрид

ТСХ – тонкослойная хроматография

ГХ МС – газовая хроматография масс-спектрометрия

НТИ – научно – техническое исследование

ГОСТ – государственный стандарт

ССБТ – система стандартов безопасности труда

ПДК – предельно допустимая концентрация

ПДК м.р. – предельно допустимая концентрация максимальная разовая

ПДК с.с. – предельно допустимая концентрация среднесуточная

ФЗ – федеральный закон

ЛВЖ – легко – воспламеняющиеся жидкости

СЗЗ – санитарно – защитная зона

ЧС – чрезвычайная ситуация

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	14
1. Литературный обзор	15
1.1. Получение аминов реакцией восстановления нитросоединений	15
1.2. Получение аминов восстановлением амидов	17
1.3. Получение первичных аминов восстановлением нитрилов	18
1.4. Получение аминов восстановительным аминированием	19
1.5. Получение аминов алкилированием аммиака галогеналканами	23
1.6. Реакция Лейкарта – Валлаха	23
1.7. Реакция Риттера	26
2. Объект и методы исследования	29
3. Экспериментальная часть	37
3.1. Краткая характеристика используемых веществ	37
3.2. Марки приборов	37
3.3. Лабораторные методики	38
3.3.1. Общая методика получения хлорангидридов бензойной кислоты (1а-г)	38
3.3.2. Общая методика получения замещенных бензофенонов (2а – г)	38
3.3.3. Общая методика получения гидролов (3а – з)	39
3.3.4. Общая методика получения ацетамидов (4а – к) по реакции Риттера	40

3.3.5. Общая методика получения солей (5а – к)	40
3.4. Анализ синтезируемых веществ	40
4. Результаты исследования	42
5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	44
5.1. Предпроектный анализ	44
5.1.1. Инициализация проекта и его технико-экономическое обоснование	44
5.1.2. Потенциальные потребители результатов исследования	45
5.1.3. Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	46
5.1.4. SWOT-анализ	48
5.2. Планирование научно-исследовательских работ	51
5.2.1. Структура работ в рамках научного исследования	51
5.2.2. Определение трудоемкости выполнения работ	52
5.2.3. План проекта	53
5.3. Бюджет научного исследования	56
5.3.1. Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты	56
5.3.2. Специальное оборудование для научных работ	57
5.3.3. Основная заработная плата	59
5.3.4. Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала	60

5.3.5. Отчисления на социальные нужды	61
5.3.6. Накладные расходы	61
5.4. Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	62
5.4.1. Оценка сравнительной эффективности исследования	62
6. Социальная ответственность	67
6.1. Производственная безопасность	68
6.1.1. Вредные вещества	69
6.1.2. Микроклиматические условия в лаборатории	70
6.1.3. Производственный шум	71
6.1.4. Производственное освещение	72
6.1.5. Механическое травмирование	73
6.1.6. Термическое травмирование	73
6.1.7. Электробезопасность	74
6.1.8. Пожаровзрывоопасность	75
6.2. Экологическая безопасность	77
6.2.1. Защита гидросферы	77
6.2.2. Защита воздушного бассейна	78
6.2.3. Защита литосферы	78
6.3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях	78
6.4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	80

6.4.1. Специальные правовые нормы трудового законодательства	80
6.4.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя	81
Заключение	83
Список публикаций студента	84
Список использованных источников	85
Приложение А	93
Приложение Б	108
Приложение В	109

ВВЕДЕНИЕ

На кафедре Томского Политехнического Университета был разработан препарат «Галодиф», обладающий противосудорожной активностью. Несмотря на различные предлагаемые методы получения, наиболее технологичным остается метод получения галодифа взаимодействием *м*-хлорбензгидриламина с цианатом натрия. Ранее данный амин получали по реакции Лейкарта – Валлаха, которая имеет ряд существенных недостатков, главными из которых является высокая температура процесса, вследствие чего происходит осмоление реакционной массы, и длительность его течения. Поэтому в качестве альтернативного метода получения *м*-хлорбензгидриламина предлагается использовать реакцию Риттера.

Цель исследования: разработка нового метода получения *м*-хлорбензгидриламина для дальнейшего использования его в синтезе галодифа.

Задачи исследования:

- Разработать новый метод получения *м*-хлорбензгидриламина - субстрата в синтезе противосудорожного препарата галодиф.
- Апробация возможности использования реакции Риттера для получения различных бензгидриламинов.
- Апробация возможности использования реакции Риттера в синтезе алкиламинов.

Практическая значимость результатов ВКР: разработка нового метода получения *м*-хлорбензгидриламина, а также других аминов.

1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

Амины находят широкое применение в медицине и промышленности. В основном их используют в виде промежуточных продуктов при получении органических веществ, а также в качестве красителей, ракетного топлива, для получения полиамидов, которые применяются для изготовления полимерных пленок и волокон, служат катализатором при образовании эпоксидных смол и пенополиуретанов.

Кроме того, амины являются полупродуктами в производстве многих лекарственных средств, например анальгетиков, антигистаминных препаратов, транквилизаторов, бактерицидных и сульфаниламидных препаратов.

Способы получения аминов разнообразны и чаще всего они сводятся к реакции восстановления различных азотсодержащих соединений: нитросоединений, амидов, нитрилов, оксимов, азометинов, иминов.

1.1. Получение аминов реакцией восстановления нитросоединений.

Родоначальником данной реакции был Н.Н. Зинин, который провел восстановление нитробензола под действием сульфида аммония и получил анилин. Реакция впервые была проведена в 1842 году и актуальна в настоящее время (см. рисунок 1).

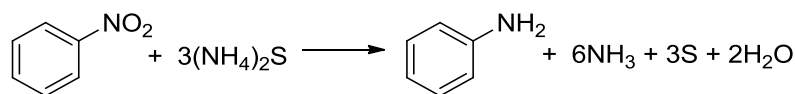


Рисунок 1 – Реакция Зинина

Для восстановления нитрогруппы до аминогруппы в настоящее время в промышленных условиях применяется каталитическое гидрирование. Медь используют в качестве катализатора на силикагеле в качестве носителя. Для приготовления катализатора карбонат меди из суспензии наносят в растворе силиката натрия и при нагревании восстанавливают водородом. Получают анилин с выходом 98%. Иногда в качестве катализатора используют никель

совместно с оксидом алюминия или ванадия, он эффективен только при температурах 250-300 °С, при окислении воздухом легко подвергается регенерации. Выход составляет 97-98%. Также при восстановлении нитросоединений до соответствующих аминов может возникнуть гидрирование бензольного кольца. В связи с этим при получении ароматических аминов не используют в качестве катализаторов палладий, платину или никель Ренея.

Альтернативным методом является восстановление металлом в щелочной или кислой среде. Последовательность действий при восстановлении в кислой и щелочной среде различается.

В кислой среде применяют соляную кислоту, цинк, олово и железо в качестве восстановителей. В соляной кислоте хлорид олова (II) эффективно восстанавливает нитрогруппу. Реагент эффективен главным образом в случаях, когда ароматическое нитросоединение содержит другие функциональные группы: COOR, COR, CHO восприимчивые к действию других восстановителей. В кислой среде нитросоединения восстанавливаются до первичных аминов ступенчато и происходит это в три стадии с переносом на каждой двух электронов.

В щелочной среде в избытке восстановителя конечным продуктом восстановления нитроарена является гидразоарен (диарилгидразин). В щелочной среде процессы восстановления нитрозоарена и гидроксилamina замедляются настолько, что основным становится процесс их конденсации с образованием азоксиарена. Эта реакция по существу подобна присоединению азотистых оснований к карбонильной группе альдегидов и кетонов. Азоксибензол при действии цинка в спиртовом растворе щелочи восстанавливается сначала до азобензола, а при действии избытка цинка далее до гидразобензола. Сам азоксибензол может быть получен восстановлением нитробензола метилатом натрия в метиловом спирте. В качестве восстановителей нитроаренов используют также сульфиды щелочных металлов и аммония.

Для восстановления нитросоединений до аминов применяют и другие восстановители, такие, как гидросульфит натрия ($\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_4$) [1], сульфат железа (II) и концентрированный водный аммиак [2], цинк в воде [3], цинк и едкий натр в водно - спиртовом растворе [4], сульфид аммония [5], гидразин в присутствии палладия на угле [6] или в присутствии никеля, платины или рутения [7] и фенилгидразин без катализатора, но при высокой температуре [8].

Метод остается актуальным и сейчас, за прошедшие годы были предложены новые катализаторы и используются различные наночастицы для улучшения выхода и сокращения времени реакции, например, наночастицы кобальта, катализатором является боргидрид натрия в присутствии воды [9,10], гидразин в присутствии этилового спирта [11], но, тем не менее он не пригоден для алифатических аминов.

1.2 Получение аминов восстановлением амидов

Другим методом является получение аминов из соответствующих амидов в присутствии сильных восстановителей. Алюмогидрид лития используют для восстановления амидов кислот до аминов в качестве восстановителя, в результате чего карбонильная группа $\text{C}=\text{O}$ превращается в CH_2 -группу, согласно рисунку 2. Так, из соответствующих амидов образуются не только первичные, но и вторичные и третичные, а также и ароматические амины с высокими выходами.

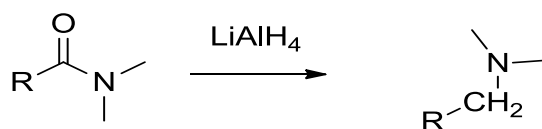


Рисунок 2 - Восстановление амидов до аминов алюмогидридом лития

Алюмогидрид лития по сравнению, например, с боргидридом натрия является более сильным восстановителем, что позволяет уменьшить время реакции и сократить его количество в реакции, однако, его не целесообразно использовать, так как он является дорогостоящим.

В синтезе тапентадола (нового анальгетика) [12] на одной из стадий амид восстанавливали алюмогидридом лития в присутствии тетрагидрофурана ТГФ с выходом 90%. В работе по получению мочевины и тиомочевины [13] на одной из стадий использовали алюмогидрид лития в диэтиловом эфире для восстановления амидов до аминов с хорошими выходами.

Также амиды гидрируются до аминов на хромите меди (II) или никелевом катализаторе при 210-300°C и 100-350 атм. N-Моно- и N,N-дизамещенные амиды дают соответственно вторичные и третичные амины в аналогичных условиях.

В последнее время показано [14], что диборан является эффективным агентом для восстановления амидов до первичных или вторичных аминов. Восстановление в тетрагидрофуране при низкой температуре требует от 1 до 8 часов и дает для ряда амидов выходы от 79 до 98%.

1.3 Получение первичных аминов восстановлением нитрилов

Известен также метод восстановления нитрилов до первичных аминов. Его механизм заключается в восстановлении имида - промежуточного продукта, который координационно связан с металлом. При восстановлении имида получают первичный амин, если же реакцию останавливают, то после гидролиза получится альдегид (см. рисунок 3).

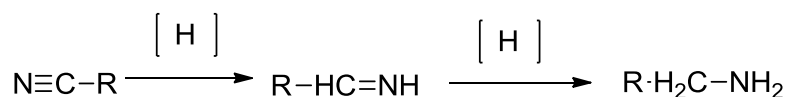


Рисунок 3 – Восстановление нитрилов до аминов в присутствии водорода

Восстановление проводят с помощью щелочных восстановителей, например натрия в спирте (метод Буво и Блана). Восстановление нитрилов до первичных аминов происходит постадийно. Обычно реакцию проводят в присутствии водорода на палладиевом, платиновом (20 - 50 °C при 1 - 3 атм.) или кобальтовом, никелевом катализаторах (100 - 200 °C, при 100 - 250 атм.) в

присутствии аммиака, его рекомендуют добавлять, так как последний тормозит последующее превращение первичного амина во вторичный и третичный.

Известно, что металлы в водных растворах кислот не подходят для восстановления нитрилов, поскольку при этом происходит гидролиз с образованием карбоновых кислот. Поэтому в данном случае в основном применяют два реагента: водород в присутствии катализатора и гидриды металлов. Каталитический метод осложняется тем, что образующийся первоначально имин реагирует с первичным амином, образуя вторичные амины. Эту трудность легко преодолеть, осуществляя каталитическое восстановление при низком давлении и используя никель Ренея в кислом растворителе, например, ангидриде уксусной кислоты с ацетатом натрия в качестве сокатализатора, который удаляет первичный амин в виде соли или производного ацетамида [15].

Гидриды металлов, такие, как алюмогидрид лития, или диборан, являются удовлетворительными реагентами для восстановления нитрилов до аминов. Для получения низкокипящих (температура кипения ниже 117 °C) аминов, по-видимому, следует предпочесть алюмогидрид лития. При получении из нитрилов высокомолекулярных аминов некоторые преимущества, очевидно, имеет гидрид алюминия, поскольку при этом не образуются анионы нитрилов, что сопровождалось бы побочными реакциями.

1.4 Получение аминов восстановительным аминированием

Альдегиды и кетоны при обработке водородом и аммиаком в присутствии катализатора превращаются в амины: этот процесс, изображенный на рисунке 4, называется восстановительное аминирование. Механизм реакции полностью не изучен, по всей видимости, проходит она через стадию гидрирования с образованием ими́на ($RCH=NH$ или $R_2C=NH$), промежуточного соединения, содержащего двойную связь углерод — азот.

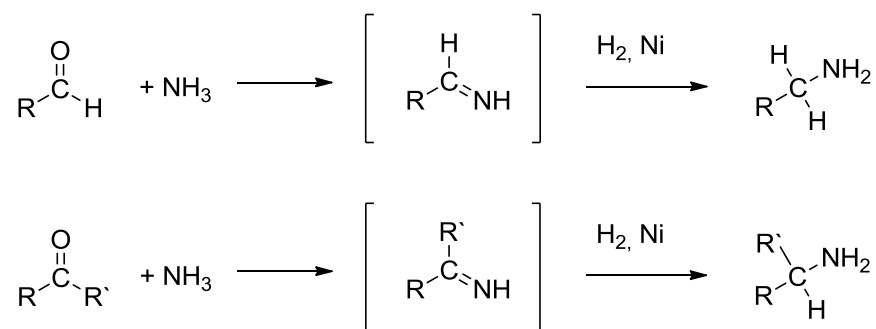


Рисунок 4 – Восстановительное аминирование альдегидов и кетонов

Восстановительное аминирование проходит одинаково хорошо с разнообразными замещенными альдегидами и кетонами, алифатическими и ароматическими, если только заместитель не восстанавливается в данных условиях.

Карбонильное соединение можно смешать с амином или аммиаком и восстанавливать непосредственно в смеси [16] или выделить и восстановить азометин, если он стабилен [17]. Такой метод синтеза – один из лучших методов получения вторичных аминов из кетонов и первичных аминов. Реакция является общей, поскольку аммиак, первичные и вторичные амины (а также такие соединения, как нитропроизводные, восстановленные до аминов) можно подвергать восстановительному алкилированию как альдегидами, так и кетонами. Реакция с альдегидами и аммиаком или первичными аминами может идти дальше, давая смесь первичных, вторичных и третичных аминов. При алкилировании вторичного амина промежуточно образуется диамин или енамин.

В этой реакции в качестве восстановителя чаще всего используется водород над платиной или никель Ренея [18], можно также применять натрий, амальгаму натрия или гидриды металлов в спирте [19,20], диметиламиноборан [21] или цинк и кислоту. При электролитическом восстановлении можно применять катоды, изготовленные из свинца или меди [22-24]. С амальгамой алюминия бензальбутилимин образует значительные количества этилендиамина в результате димеризации. Выходы существенно колеблются.

Наиболее устойчивые выходы, по имеющимся сведениям, дает применение в качестве восстановителей гидридов металлов [19,20] и диметиламиноборана [21]. При реакции алюмогидрида лития [20] с рядом бензгидрилидениминов и родственными соединениями выходы составляют от 71 до 94%, при взаимодействии боргидрида натрия [19] с рядом соединений типа N-бензилиденанилина – от 83 до 98%, а для диметиламиноборана [21] с N-бензилиденанилином и его производными – от 71 до 97%.

Другим примером восстановительного аминирования является восстановление оксимов. Оксимы – соединения, содержащие в своем составе одну или несколько изонитрогрупп $RC=N-OH$, обычно рассматриваются как производные альдегидов или кетонов. До аминов оксимы восстанавливаются в присутствии сильных восстановителей. Для восстановления применяют восстановители четырех основных типов: активный металл или амальгаму натрия и кислоту; водород с такими катализаторами, как платина или палладий на угле или окиси алюминия и никель Ренея; гидриды металлов, например алюмогидрид лития, и, наконец, натрий и спирт. Обычно идет прямое восстановление; выходы, как правило, составляют около 80% или выше. Следует упомянуть о нескольких специальных восстановителях. При восстановлении трудновосстанавливаемых α -оксиминокарбоновых кислот [25] предпочтение отдается двуххлористому олову в соляной кислоте, а кетоксимы более успешно восстанавливаются цинковой пылью и ацетатом аммония в концентрированном водном растворе аммиака и этиловом спирте (а не металлами в растворе кислот) [26]. Гидрирование при низком давлении довольно успешно проходит в присутствии никеля Ренея в 95% этиловом спирте, однако получаемые при этом выходы низки из-за гидролиза оксима с образованием кетона [27]. Оксим циклогептанона легко восстанавливается до амина гидрированием при низком давлении в присутствии радия на окиси алюминия [28]. При восстановлении оксимов фенилкетонов алюмогидридом лития получают как первичный (I), так и вторичный (II) амины (см. рисунок 5) [29]. Выход амина II возрастает при увеличении электронодонорной

способности заместителя X, находящегося, в пара-положении. Этот эффект аналогичен эффектам, наблюдаемым при перегруппировке Бекмана в оксимах.

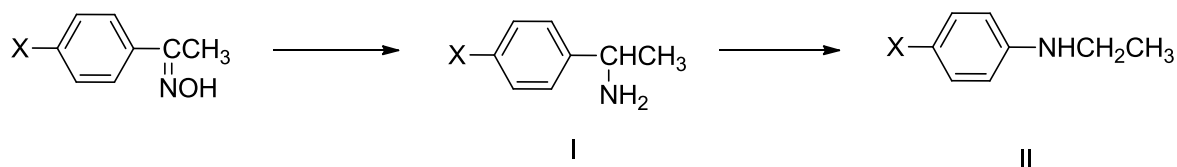


Рисунок 5 – Восстановление оксима

В работе [30] восстанавливали различные оксимы боргидридом натрия в присутствии ZrCl_4 и Al_2O_3 без растворителей были получены амины с выходами 90-98%. В источнике [31] кетоны превращали в соответствующие оксимы, которые водородом в присутствии ТГФ в метаноле восстанавливались до аминов. Выходы составили 45-98%.

Также восстановительным аминированием получают амины через азометины (основания Шиффа) - N-замещенные имины, органические соединения общей формулы $\text{R}_1\text{R}_2\text{C}=\text{NR}_3$, в которых азот связан с арильной или алкильной группой, но не с водородом. Азометины образуются на основе альдегидов (кетонов) и аминов в кислой среде. Вторичные амины могут быть получены из азометинов с помощью боргидрида натрия или алюмогидрида лития. В более жестких условиях восстановление азометинов осуществляют и муравьиной кислотой. В этом случае в реакцию можно вводить не азометин, а альдегид и амин, из которых он получается. Если использовать формиат аммония и альдегид или кетон, то образуется первичный амин.

С помощью никеля Ренея карбонильные соединения можно получать из спиртов [32]. Следовательно, при кипячении спирта и амина можно получить основание Шиффа и восстановить его в присутствии довольно больших количеств никеля Ренея.

1.5 Получение аминов алкилированием аммиака галогеналканами

Как и аммиак, амины подвергаются алкилированию галогеналканами. Реакция была открыта в 1850 году немецким химиком А. В. Гофманом и названа в его честь реакцией Гофмана. В результате алкилирования первичные амины превращаются во вторичные, а вторичные в свою очередь в третичные (см. рисунок 6). Третичные амины также способны подвергаться алкилированию за счет наличия неподеленной пары электронов у атома азота, превращаясь при этом в четвертичные аммониевые соли. Этот метод наиболее широко применяется для синтеза вторичных и третичных аминов, содержащих разные углеводородные радикалы [33]. Но, все же, этот метод получения аминов не совсем пригоден, так как образуются смеси различных аминов и выход первичного амина довольно низкий.

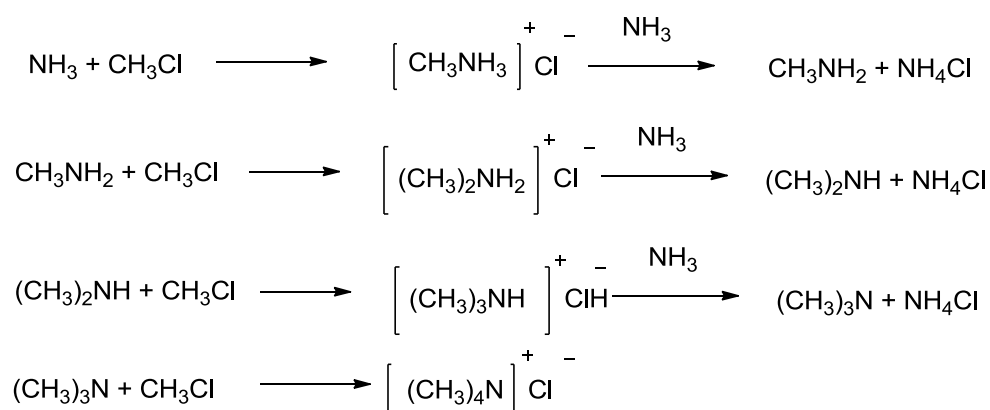


Рисунок 6 – Алкилирование аммиака галогеналканами

1.6 Реакция Лейкарта – Валлаха

Реакция Лейкарта — Валлаха — это метод восстановительного аминирования карбонильных соединений при взаимодействии муравьиной или уксусной кислоты с формамидом, формиатом аммония или эквимольной смеси первичного либо вторичного амина (см. рисунок 7).

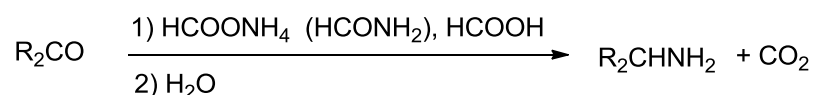


Рисунок 7 – Реакция Лейкарта - Валлаха

Реакция проходит при температуре 100 - 200 °С, смесь карбонильного соединения нагревают с формиатом либо формамидом в отсутствии растворителя либо в растворе муравьиной или уксусной кислоты, в ходе реакции первичные и вторичные амины обычно образуются в виде N-формильных производных, затем их гидролизуют до свободных аминов, выходы - до 84 % согласно рисунку 8.

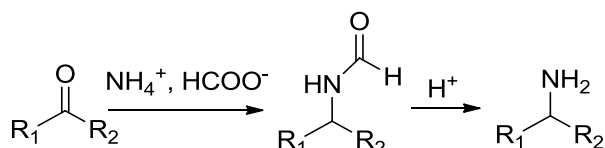


Рисунок 8 – Реакция Лейкарта – Валлаха

Иногда применяют катализаторы - хлориды магния, железа, цинка, сульфат аммония, катализаторы гидрирования. Реакцией можно проводить восстановительное аминирование карбонильных соединений, содержащих группы чувствительные к восстановлению. При одновременном присутствии в молекуле кетонной и альдегидной групп, реакция обычно идет преимущественно по альдегидной группе [34].

Модификацией реакции Лейкарта-Валлаха - получение N-метилированных аминов при взаимодействии первичных или вторичных аминов с формальдегидом и муравьиной кислотой является реакция Эшвейлера – Кларка, изображенная на рисунке 9 [35].

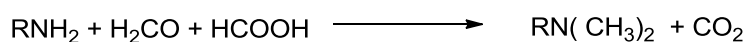


Рисунок 9 – Реакция Эшвейлера – Кларка

В литературе описано много вариантов этих методов. Например, муравьиная кислота при метилировании аминов в присутствии формальдегида приводит к получению более высоких выходов [36] и при образовании пиренметиламинов из формамида и карбоксальдегида [37]. Но метилирование аммиака с образованием триметиламина может быть осуществлено с высоким

выходом без добавления муравьиной кислоты. Кроме того, щелочные катализаторы, например, пиридин, мочеви́на или аммиак, в присутствии никеля Ренея ускоряют реакцию и приводят к преимущественному образованию вторичных аминов [38]. Иногда в качестве катализатора применяют хлористый магний [39].

Из многообразия используемых реагентов, которые применяются в реакции Лейкарта, самый эффективный выбрать невозможно. С аммиаком или амином и муравьиной кислотой получают более высокие выходы, чем с муравьинокислым аммонием. Реагент, состоящий из смеси муравьинокислого аммония с формамидом, превосходит безводный формамид [40]. При взаимодействии с кетонами разных типов в присутствии этого смешанного реагента выходы составляли от 52 до 85%. В некоторых случаях лучше всего применять формамид или муравьинокислый аммоний, к которым добавлена муравьиная кислота в количестве, достаточном как для создания кислотной среды, так и для осуществления восстановления [41]. С другой стороны щелочные катализаторы в присутствии никеля Ренея ускоряют реакцию и приводят к образованию преимущественно вторичного амина [38].

Для получения первичных аминов по реакции Лейкарта - Валлаха обычно берут одну часть карбонильного соединения на четыре или пять частей муравьинокислого аммония или формамида. Избыток муравьинокислого аммония служит для подавления образования вторичных или третичных аминов.

В эту реакцию вступает множество различных альдегидов и кетонов иногда с удовлетворительными, а иногда и с неудовлетворительными результатами. Алифатические кетоны образуют первичные амины с выходами от 30 до 80%. При взаимодействии ряда алифатических и ароматических кетонов, аммиака и муравьиной кислоты получены выходы от 50 до 85%.

Альдольная конденсация является основной побочной реакцией. Довольно жесткие условия проведения реакции во многих случаях ограничивают область ее применения, например, в реакции не могут быть использованы α,β -непредельные альдегиды и кетоны. К преимуществам этой реакции можно отнести простоту её проведения и доступность исходных веществ, достаточно высокий выход продуктов (60-90%). К недостаткам относят высокую температуру реакции 180-200°C, вследствие этого происходит осмоление реакционной смеси, длительность процесса, достаточно высокий расход муравьиной кислоты и формамида.

Предложены различные модификации реакции Лейкарта – Валлаха с целью повысить выход продуктов реакции, например, модификация с использованием катализа наночастицами меди [42].

1.7 Реакция Риттера

Реакция Риттера является удобным способом получения N-замещенных амидов карбоновых кислот, заключающимся в алкилировании нитрилов соответствующими карбокатионами [43]. В последнее время проявляется интерес к реакции Риттера, поскольку варьируя спиртами и нитрилами можно получать различные амиды [45-52].

В качестве предшественников карбокатионов могут выступать спирты, оксираны, алкены или их производные (например, α,β -ненасыщенные кислоты, их эфиры либо амиды, α -галогеналкены) в условиях кислотного катализа. В условиях реакции Риттера гликоли со вторичными группами ОН, вторичные и третичные спирты также образуют карбокатионы. Поэтому в широком смысле к реакции Риттера иногда относят реакции с участием и таких соединений. В данную реакцию не вступают вещества, способные образовывать неустойчивые карбокатионы (например, изопропиловый спирт).

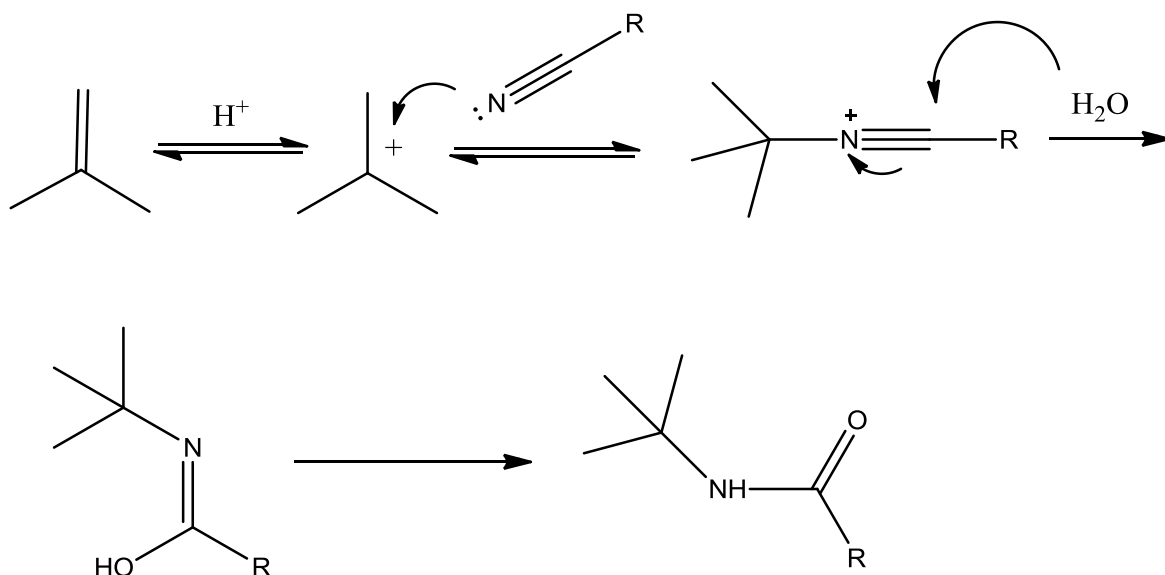


Рисунок 10 – Механизм реакции Риттера

Механизм реакции Риттера, представленный на рисунке 10, состоит из трех стадий: сначала образуется карбокатион путем протонирования алкена. Далее происходит N-алкилирование нитрила с образованием нитрилиевой соли. На заключительной стадии нитрилиевая соль реагирует с водой, образуется таутомер амида, который изомеризуется в N-замещенный амид.

В катионах нитрилия, полученных взаимодействием нитрилов с гликолями, происходит самопроизвольное электрофильное замыкание цикла, позволяющее получать разнообразные гетероциклические соединения с высокими выходами (синтез Тильманса-Риттера).

Известно, что помимо серной кислоты, в качестве катализаторов применяют фосфорную кислоту, смесь серной кислоты и трифторида бора, фтор-, хлор- и метансульфоновую кислоты [44].

В настоящее время интересной и активно изучаемой задачей является разработка различных новых катализаторов используемых в реакции Риттера для повышения выхода продуктов и максимального снижения количества растворителей, в некоторых работах и вовсе проводятся синтезы без содержания растворителей. Например, в работе с использованием магнитных наночастиц CoFe_2O_4 , иммобилизованных диамином- N- серной кислотой в качестве

модельной была выбрана реакция взаимодействия дифенилкетона с ацетонитрилом. В отсутствие катализатора после 6 часов синтеза при температуре 80°C наблюдались только следовые количества желаемого продукта на ТСХ пластине. Реакция проходит успешно в присутствии 10 мг $\text{CoFe}_2\text{O}_4 @ \text{SiO}_2\text{-DASA}$, что приводит к желаемому продукту с выходом 90% [45]. Использование $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ в качестве катализатора в присутствии ацетонитрила в водной среде при температуре 150°C позволяет получить амиды с выходами до 96% [46].

В работе с использованием в качестве катализатора пентафторфенил аммония трифлата (PFPAT) были использованы трет - бутанол, ацетофенон, дифенилкетон с различными нитрилами. Реакция проходила без использования растворителей при температуре 90 °C с выходами от 90 до 95% [47].

Также в качестве катализаторов использовали кремниевую стружку в N - пропил серной кислоте (SBNPSA) с выходами 91-98% [48], хлорную кислоту в присутствии силикагеля и магнитных наночастиц ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3 @ \text{SiO}_2\text{-HClO}_4$) [49], $\text{KAl}(\text{SO}_4)_2 \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ [50], Bu_4NPF_6 и $\text{Ca}(\text{OTf})_2$ в H_2O [51], алюминий – метансульфоновую кислоту (АМА) [52].

С нашей точки зрения реакцию Риттера можно использовать для получения первичных аминов через гидролиз соответствующих амидов. Разнообразие ряда получаемых аминов будет зависеть от спиртов, поскольку в качестве нитрила лучше использовать ацетонитрил, так как ацетамид легко гидролизуется.

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

3.1. Краткая характеристика используемых веществ

Таблица 3- Характеристики используемых веществ

Вещество	Молекулярная масса, г/моль	Плотность, г/см ³	T _{пл.} , °C	T _{кип.} , °C	Агрегатное состояние
Ацетон	58,08	0,7899	-95	56,1	жидк.
Ацетонитрил	41,05	0,7875	-44	81,6	жидк.
Бензол	78,11	0,8786	5,5	80,1	жидк.
Борогидрид натрия	37,83	1,07	400	500	тв.
Бромид алюминия	266,69	3,205	97,5	255	тв.
Гексан	86,18	0,6548	-95	68	жидк.
Гидроксид натрия	39,997	2,13	318	1388	тв.
Диметилформамид	73,09	0,9445	-61	153	жидк.
Изопропиловый спирт	60,09	0,7851	-89,5	82,4	жидк.
Натрий серноокислый	126,037	2,63	884	1429	тв.
Серная кислота	98,078	1,8356	10	337	жидк.
Соляная кислота	36,46	1,19	-30	48	жидк.
Тионил хлористый	118,97	1,638	-104,5	76,11	жидк.
Четыреххлористый углерод	153,82	1,5954	-22,87	76,5	жидк.
Этанол	46,069	0,7893	-114,3	78,4	жидк.
Этилацетат	88,11	0,902	-84	77	жидк.

3.2. Марки приборов

Контроль за ходом реакции и чистотой полученных соединений проводили методом тонкослойной хроматографии (ТСХ) на пластинах Silufol УФ-254. Детектирование пятен проводили УФ светом. Элюент для ТСХ бензол: этанол (9:1). Температуру плавления определяли на микронагревательном столике Boetius. Идентификацию части полученных соединений проводили

сопоставлением аналитических и физико-химических характеристик с образцами, синтезированными ранее. Хромато-масс спектры получали при помощи системы ГХ-МС, состоящей из масс-детектора Agilent 5975С и газового хроматографа Agilent 7890А. Отгонку излишка растворителей осуществляли на ротационном испарителе Buchi Rotavapor® R-100.

5. ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ.

В данном проекте разрабатывается метод получения бензгидриламинов с использованием реакции Риттера. Бензгидриламины являются субстратами в синтезе замещенных бензгидрилмочевин. Известно, что замещенные бензгидрилмочевины (галодиф) проявляют выраженную биологическую активность, могут быть использованы в качестве:

- антиконвульсанта
- препарата для профилактики эпилепсии
- препарата от алкогольной зависимости

Целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является оценка коммерческого и инновационного потенциала научно-технического исследования (НТИ), разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации проекта, определение ресурсной, финансовой и экономической эффективности.

Для этого были поставлены следующие задачи:

- Проведение предпроектного анализа
- Планирование научно-исследовательских работ
- Расчет бюджета научного исследования
- Определение ресурсной, финансовой, бюджетной и экономической эффективности исследования

5.1. Предпроектный анализ

5.1.1. Инициализация проекта и его технико-экономическое обоснование

Проект выполняется при финансовой поддержке Гос. Задания «Наука», проект № 2387, поэтому ограничения по бюджету отсутствуют. Срок работы ограничен сроком обучения дипломника. Данный проект решает вопросы

разработки нового метода бензгидриламинов с использованием реакции Риттера и дальнейшего их получения. Использование реакции Риттера позволяет снизить количество растворителей и реагентов в синтезе бензгидриламинов, получать конечный продукт, избегая побочных, в этом заключается инновационность и ресурсоэффективность данного проекта. У проекта имеется конкретный заказчик, но не исключается возможность перепродать результаты данного исследования заинтересованным сторонам в лице различных научно - исследовательских лабораторий и фармацевтических компаний.

5.1.2. Потенциальные потребители результатов исследования

Потенциальными потребителями результатов исследования являются научно-исследовательские лаборатории, ведущие разработки в области органического синтеза, фармацевтической промышленности, частные коммерческие компании, занимающиеся продажей готовых продуктов по запатентованным технологиям и разработкам. Лаборатории, занимающиеся исследованиями в данных отраслях, интересуются ресурсосберегающими эффективными методами синтеза веществ. Полученные вещества должны быть высокого качества, но ключевым фактором является стоимость разработки. Низкие цены являются привлекательными для лабораторий и предприятий, однако, в погоне за экономией средств в процессе реализации проекта не стоит забывать о качестве конечного продукта, который интересует потребителя.

Основные предполагаемые потенциальные конкуренты, производящие бензгидриламины это: «Sigma - Aldrich» США [53] и «Merck» Германия [54]. На основании этих данных строится карта сегментирования рынка (рис.21).

	Качество реактива						
		A.C.S. (Реактивы максимальной чистоты)	Reagent (Препарат реактивной чистоты)	U.S.P. (Реактивы, удовлетво- ряющие требованиям	Lab (Лаборатор- ные реактивы)	Purified (Очищен- ные реактивы)	Technical (Технические реактивы)

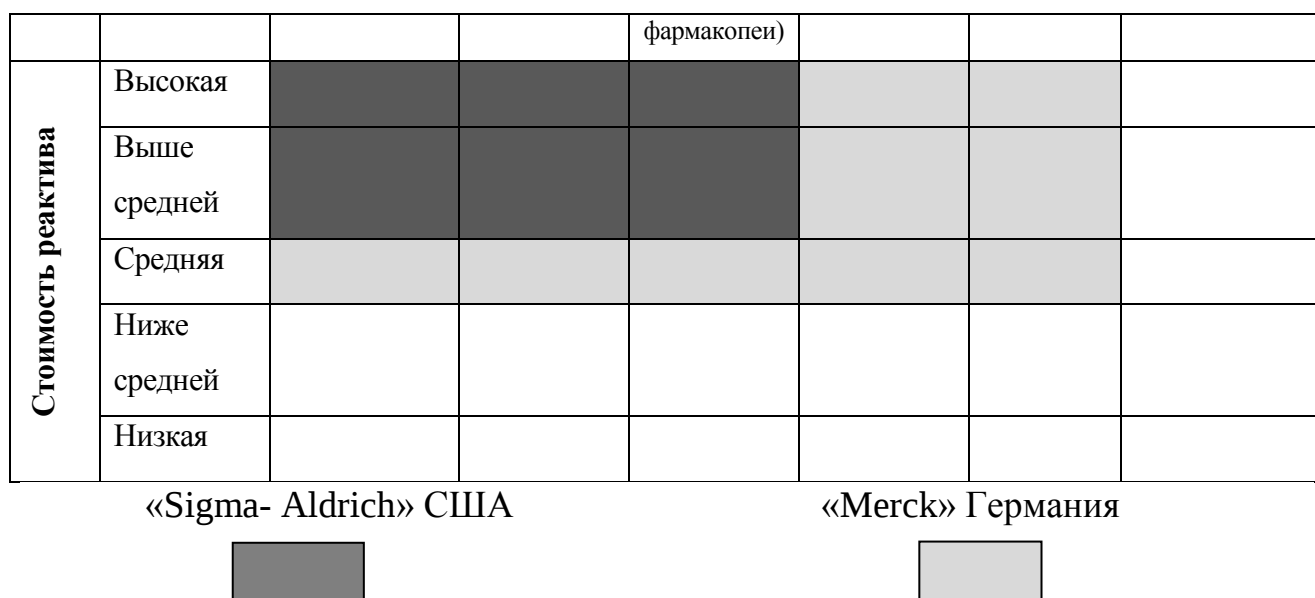


Рисунок 21 - Карта сегментирования рынка по производству бензгидриламинов

На основе карты сегментирования можно сделать следующие выводы: рынок занятый зарубежными производителями занимает значительную долю производства реактивов высокой чистоты и соответственно высокой стоимости. В связи с этим разработка новых методов получения бензгидриламинов более дешевых с точки зрения стоимости и сходных по качеству с конкурентами является перспективной и актуальной задачей.

5.1.3. Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Проведем анализ двух конкурирующих компаний по производству бензгидриламинов: «Sigma-Aldrich» США и «Merck» Германия

Таблица 4 - Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений.

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентно-способность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Чистота реактива	0,30	5	5	5	1,5	1,5	1,5
2. Однородность	0,15	5	5	4	0,75	0,75	0,6

3. Внешний вид и цвет	0,1	5	4	5	0,5	0,4	0,5
4. Срок хранения	0,08	4	5	5	0,32	0,4	0,4
5. Растворимость в воде	0,02	5	5	5	0,1	0,1	0,1
6. Запах	0,02	5	5	5	0,1	0,1	0,1
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,02	5	5	5	0,1	0,1	0,1
2. Уровень проникновения на рынок	0,01	5	4	4	0,05	0,04	0,04
3. Цена	0,20	5	4	4	1,0	0,8	0,8
4. Предполагаемый срок эксплуатации	0,01	5	5	5	0,05	0,05	0,05
5. Финансирование научной разработки	0,02	4	5	5	0,08	0,1	0,1
6. Срок выхода на рынок	0,02	4	5	5	0,08	0,1	0,1
7. Наличие сертификации разработки	0,05	5	5	5	0,25	0,25	0,25
Итого	1				4,80	4,69	4,64

где B_{ϕ} – проектируемое производство,

B_{K1} – «Sigma- Aldrich» США

B_{K2} – «Merck» Германия

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i,$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

Бензгидриламины на всех предприятиях производятся по техническим условиям, значит конкурентоспособность продукта можно оценить по коммерческим критериям эффективности. Суммарный балл конкурентоспособности для проектируемого производства максимален. Уязвимость нашей компании заключается в том, что наш продукт неизвестен и его трудно продвигать на рынок, также для проведения научных разработок

необходимо привлекать дополнительные финансы, однако более высокая цена продукции других компаний позволяет нам успешно конкурировать с ними.

5.1.4. SWOT-анализ

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

Таблица 5 - Матрица SWOT

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Заявленная экономичность и ресурсоэффективность технологии. С2. Экологичность процесса. С3. Простота технологии С4. Минимальное количество отходов производства С5. Наличие бюджетного финансирования	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки Сл2. Отсутствие необходимых условий и реактивов для проведения испытания опытного образца Сл3. Большой срок поставок реактивов и оборудования, используемых при проведении научного исследования Сл4. Сильная конкуренция со стороны зарубежных компаний
Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Использование инфраструктуры ОЭЗ ТВТ Томск В3. Появление дополнительного спроса на новый продукт В4. Использование разработки в промышленных масштабах В5. Повышенная стоимость конкурентных разработок	В1С5 В2С1С3С4С5 В3С1С3 В4С1С2С3С4С5	В1Сл1Сл2 В2Сл1Сл3 В3Сл1Сл2Сл3 В4Сл1Сл2Сл3 В5Сл4
Угрозы: У1. Конкуренция имеющихся технологий производства У2. Ограничение возможности вхождения на российский и зарубежный рынок У3. Введения дополнительных	У1С2С3С4С5 У2С1С2С3С4С5 У3С4 У4С1С2С3 У5С4С5	У1Сл2Сл3Сл4 У2Сл1Сл2Сл3Сл4 У3Сл1Сл2Сл4 У4Сл2Сл3 У5Сл1Сл2Сл3Сл4

требований к сертификации продукции У4. Несвоевременное финансовое обеспечение исследования со стороны государства У5. Срыв сроков выполнения проекта		
---	--	--

Таблица 6 - Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта						
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	0	0	0	+	+
	B2	+	0	+	+	+
	B3	+	+	+	0	0
	B4	+	+	+	+	-
	B5	+	+	+	+	+

Сильные стороны проекта						
Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	У1	-	-	-	+	+
	У2	+	+	+	+	+
	У3	-	-	-	+	0
	У4	+	+	+	-	-
	У5	+	-	+	+	+

Слабые стороны проекта						
Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	
	B1	+	-	-	+	
	B2	+	+	-	+	
	B3	+	+	+	-	
	B4	+	+	-	0	
	B5	0	-	+	+	

Слабые стороны проекта						
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	
	У1	-	0	-	0	
	У2	+	+	-	+	
	У3	+	+	+	0	
	У4	-	-	-	-	
	У5	+	+	+	+	

К сильным сторонам и возможностям проекта более всего относится B5C1C2C3C4C5. Из чего следует, что для успешного развития и реализации разработки достаточно появления дополнительного спроса на новый метод получения бензгидриламинов. К слабым сторонам и возможностям проекта

относятся В1Сл1Сл2Сл3 и В5Сл1Сл2Сл3Сл4, что связано с трудностями проведения эксперимента и высокой конкуренцией.

Таблица 7 - SWOT-анализ

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Заявленная экономичность и ресурсоэффективность технологии. С2. Экологичность процесса. С3. Простота технологии С4. Минимальное количество отходов производства С5. Наличие бюджетного финансирования.	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки Сл2. Отсутствие необходимых условий и реактивов для проведения испытания опытного образца Сл3. Большой срок поставок реактивов и оборудования, используемых при проведении научного исследования Сл4. Сильная конкуренция со стороны зарубежных компаний
Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Использование инфраструктуры ОЭЗ ТВТ Томск В3. Появление дополнительного спроса на новый продукт В4. Использование разработки в промышленных масштабах В5. Повышенная стоимость конкурентных разработок	<i>В связи с уникальными свойствами разработки (энергосбережение, ресурсосбережение, простота использования, экономичность и т.д.) у нее есть шансы выйти на российский и зарубежный рынок. Есть необходимость заинтересовать инвесторов, чтобы данная разработка нашла практическое применение в промышленности.</i>	<i>Несмотря на достоинства разработки и на наличие возможностей ее реализации, она не развита на рынке из-за наличия спроса на альтернативные разработки. Соответственно, из-за незаинтересованности потенциальных потребителей отсутствует сбыт продукции и проект может не окупить себя.</i>
Угрозы: У1. Конкуренция имеющихся технологий производства У2. Ограничение возможности вхождения на российский и зарубежный рынок У3. Введения дополнительных требований к сертификации продукции У4. Несвоевременное финансовое обеспечение исследования со стороны государства	<i>Реактивы подобного типа уже выпускаются на зарубежном рынке. При выходе на зарубежный рынок могут возникнуть значительные трудности. Следует усиленно продвигать разработку с целью создания спроса.</i>	<i>Следует выработать маркетинговую стратегию в области продвижения разработки на рынок. Ограничение и несвоевременное финансирование могут привести к задержке поставок реактивов, что может привести к срывам сроков выполнения проекта.</i>

У5. Срыв сроков выполнения проекта		
------------------------------------	--	--

В разделе была проведена работа по инициации проекта, проведен анализ конкурентных технических решений и оценка потенциальных потребителей, SWOT-анализ. При этом было выявлено, что действующий проект является конкурентоспособным наряду с зарубежными аналогами, его конкурентным преимуществом является более низкая цена и финансирование.

5.2. Планирование научно-исследовательских работ

5.2.1. Структура работ в рамках научного исследования

Для выполнения научных исследований формируется рабочая группа, в состав которой вошли научный руководитель – Штрыкова В.В. и студент – дипломник Ахманова О.Е.. По каждому виду запланированных работ устанавливается соответствующая должность исполнителей.

Составляется перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования, проводится распределение исполнителей по видам работ. Примерный порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в табл.5.

Таблица 8 - Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
Выбор направления исследований	2	Выбор направления исследований	Руководитель, Дипломник
	3	Определение целей и задач исследования	Руководитель, Дипломник
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, Дипломник

Теоретические и экспериментальные исследования	5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Дипломник
	6	Составление плана и методик эксперимента	Руководитель, Дипломник
	7	Закупка реактивов для проведения экспериментов	Руководитель
	8	Проведение экспериментов	Дипломник
Обобщение и оценка результатов	9	Анализ полученных экспериментальных данных	Руководитель, Дипломник
	10	Завершение исследований, составление выводов	Руководитель, Дипломник
Завершение проекта	11	Передача результатов проекта заказчику.	Руководитель

5.2.2. Определение трудоемкости выполнения работ

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, так как зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{ожі}$ используется следующая формула:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}, \quad (1)$$

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

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

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

Определение продолжительности работ в рабочих днях производится по формуле:

$$T_{pi} = \frac{t_{oji}}{Ч_i}, \quad (2)$$

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

t_{oji} – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.

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

Таблица 9 - Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо- затраты, час.
1	Штрыкова В.В.	Руководитель	Организация проекта, координация деятельности участников	84,6
2	Ахманова О.Е.	Исполнитель	Выполнение работ по проекту	600
ИТОГО:				684,6

5.2.3. План проекта

В рамках планирования научного проекта был построен календарный график проекта (табл. 9). Линейный график представляется в виде таблицы 10.

Таблица 10 - Календарный план проекта

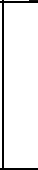
Название	Длительно- сть, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Составление и утверждение технического задания	3	1.02.2016	3.02.2016	Руководитель

Выбор направления исследований	5	4.02.2016	8.02.2016	Руководитель, Дипломник
Определение целей и задач исследования	3	9.02.2016	11.02.2016	Руководитель, Дипломник
Календарное планирование работ по теме	2	12.02.2016	13.02.2016	Руководитель, Дипломник
Проведение теоретических расчетов и обоснований	10	14.02.2016	24.02.2016	Дипломник
Составление плана и методик эксперимента	10	25.02.2016	6.03.2016	Руководитель, Дипломник
Закупка реактивов для проведения экспериментов	4	7.03.2016	10.03.2016	Руководитель
Проведение экспериментов	59	11.03.2016	9.05.2016	Дипломник
Анализ полученных экспериментальных данных	15	10.05.2016	24.05.2016	Руководитель, Дипломник
Завершение исследований, составление выводов	6	25.05.2016	30.05.2016	Руководитель, Дипломник
Передача результатов проекта заказчику	1	31.05.2016	31.05.2016	Руководитель
Итого	118			

На основе табл. 10 строится календарный план-график. График строится для максимального по длительности исполнения работ в рамках научно-исследовательского проекта на основе табл. 11 с разбивкой по месяцам и декадам (10 дней) за период времени дипломирования. При этом работы на графике следует выделить различной штриховкой в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу.

Таблица 11 - Календарный план-график проведения НИОКР по теме

№ ра бо т	Вид работ	Исполнители	Т _{кп} кале нд. дн.	Продолжительность выполнения работ											
				Февр.			Март			Апрель			Май		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3

1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель	3												
2	Выбор направления исследований	Руководитель, Дипломник	5												
3	Определение целей и задач исследования	Руководитель, Дипломник	3												
4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, Дипломник	2												
5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Дипломник	10												
6	Составление плана и методик эксперимента	Руководитель, Дипломник	10												
7	Закупка реактивов для проведения экспериментов	Руководитель	4												
8	Проведение экспериментов	Дипломник	59												
9	Анализ полученных экспериментальных данных	Руководитель, Дипломник	15												
10	Завершение исследований, составление выводов	Руководитель, Дипломник	6												

11	Передача результатов проекта заказчику	Руководитель	1														
----	--	--------------	---	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--	--



- Руководитель



- Дипломник

В разделе планирование научно-исследовательских работ была сформирована рабочая группа, в состав которой вошли ответственное лицо - научный руководитель и исполнитель – дипломник. Составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования, произведено распределение исполнителей по видам работ. Определена трудоемкость выполнения работ равная 684,6 часов. Составлен план проекта, и в соответствии с ним построен календарный график проекта.

5.3. Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. Оборудование и лабораторная посуда используемая в проекте находятся на базе ТПУ, поэтому затраты на посуду не были включены в бюджет исследования, а расходы на оборудование учтены в виде амортизационных отчислений.

5.3.1. Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты

Таблица 12 - Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Сумма, руб.
Ацетон	Литр (л)	0,5	50	25
Ацетонитрил	Литр (л)	2	410	820

Бензиловый спирт	Литр (л)	0,02	192	3,84
Бензойная кислота	Килограмм (кг)	0,1	202	20,2
Бензол	Литр (л)	2	350	700
Бензофенон	Килограмм (кг)	0,1	532	53,2
Борогидрид натрия	Килограмм (кг)	0,02	11550	231
Бромид алюминия	Килограмм (кг)	0,1	4200	420
Гексан	Литр (л)	1	284	284
Гидроксид натрия	Килограмм (кг)	0,1	103	10,3
Диметилформамид	Литр (л)	0,01	178	1,78
Изопропиловый спирт	Литр (л)	1	110	110
Натрий сернокислый	Килограмм (кг)	0,05	39,2	1,96
Триметилкарбинол	Литр (л)	0,02	354	7,08
Трифенилметанол	Килограмм (кг)	0,02	7936	158,72
Серная кислота	Литр (л)	0,1	70	7
Соляная кислота	Литр (л)	0,2	120	24
Тионил хлористый	Литр (л)	0,1	1294	129,4
Четыреххлористый углерод	Литр (л)	0,2	227	45,4
Этанол	Литр (л)	1	180	180
Этилацетат	Литр (л)	1	152	152
Всего за материалы				3384,88
Транспортно-заготовительные расходы (5%)				169,244
Итого по статье С_м				3554,124

Закупка необходимых реактивов для осуществления научного исследования осуществлялась на предприятиях ООО «Химреактив», АО «Химзаказ», ЗАО «Вектон», АО «Химреактив» [55-57].

5.3.2. Специальное оборудование для научных работ

Учетом стоимость оборудования, используемого при выполнении НТИ и имеющегося в лаборатории ТПУ в виде амортизационных отчислений. Расчет проводим по методу равномерного прямолинейного списания - стоимость списывается равномерными долями в течение периода эксплуатации.

$$AO_i = \frac{C_{\text{пер}} - C_{\text{ликв}}}{t}, \quad (3)$$

где АО - годовые амортизационные отчисления, руб;

t - срок службы оборудования, год.

C_{пер} - первоначальная стоимость оборудования, руб;

C_{ликв} - ликвидационная стоимость оборудования, руб;

Примем C_{ликв} = 0,03 • C_{пер}.

$$З_{AO} = \frac{AO \cdot T_{\text{кт}}}{T_{\text{кдл}}}, \quad (4)$$

Таблица 13 - Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудова ния	Цена единицы оборудова ния, тыс. руб.	Срок службы, лет	АО за период проведения НИР, тыс. руб.	Затраты на специальное оборудование, тыс. руб.
1.	Высокоэффективный жидкостный хроматограф Agilent 1200 Compact LC	1	2 200	15	143,56	2343,56
2.	Ротационный испаритель Buchi Rotavapor-100	1	221,646	15	14,333	235,979
3.	Нагревательная плита с магнитной мешалкой Daihan WiseStir® MSH-20A	1	33,76	20	1,637	35,397

4.	Сушилка для посуды электрическая, ПЭ - 2000	1	18,75	10	1,82	20,57
Затраты по доставке и монтажу (15 %)						374,123
Итого:						3009,629

5.3.3. Основная заработная плата

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НТИ, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату:

$$З_{зп} = З_{осн} + З_{доп}, \quad (5)$$

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

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

Основная заработная плата рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot T_p, \quad (6)$$

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

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{дн} = \frac{З_m \cdot M}{F_d}, \quad (7)$$

где $З_m$ – 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. (табл. 14).

Таблица 14 - Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Дипломник
Календарное число дней	365	365

Количество нерабочих дней		
- выходные дни	104	104
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	40
- невыходы по болезни	0	2
Действительный годовой фонд рабочего времени	199	205

Месячный должностной оклад работника:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \quad (8)$$

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

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент;

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок;

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

Таблица 15 - Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$З_{\text{тс}}$, руб.	$k_{\text{пр}}$	$k_{\text{д}}$	$k_{\text{р}}$	$З_{\text{м}}$, руб	$З_{\text{дн}}$, руб.	$T_{\text{р}}$, раб. дн.	$З_{\text{осн}}$, руб.
Руководитель	23264,86	0,3	0,3	1,3	48390,9	2528,97	13,3	33635,301
Дипломник	3000,00	0	0,5	1,3	5400,00	210,73	86,3	18185,999

5.3.4. Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}} \quad (9)$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (примем равным 0,13).

Таблица 16 - Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Дипломник
Основная зарплата	33635,301	18185,999
Дополнительная зарплата	4372,589	0
Зарплата исполнителя	38007,89	18185,999

Итого по статье $C_{\text{зп}}$	56193,889
---------------------------------	-----------

5.3.5. Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (10)$$

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

На 2016 г. в соответствии с Федеральным закона от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1 ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2016 году водится пониженная ставка – 27,1%[58].

$k_{\text{внеб}}$ принимаем равным 0,271.

$$C_{\text{внеб}} = 0,271 \cdot (50687,7) = 13736,367$$

5.3.6. Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др. В расчетах эти расходы принимаются в размере 70 - 90 % от суммы основной заработной платы научно-производственного персонала данной научно-технической организации.

Накладные расходы составляют 80-100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнение темы.

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = k_{\text{накл}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (11)$$

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов. Принимаем равным 0,8.

$$C_{\text{накл}} = 0,8 \cdot (50687,7) = 40550,16$$

На основании полученных данных по отдельным статьям затрат составляется калькуляция плановой себестоимости НТИ, приведенной в табл. 17.

Таблица 17 - Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.
1. Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	3554,124
2. Специальное оборудование для научных работ	3009629,000
3. Основная заработная плата	51821,3
4. Дополнительная заработная плата	4372,589
5. Отчисления на социальные нужды	13736,367
6. Накладные расходы	40550,160
7. Итого плановая себестоимость	3123663,5

В разделе были произведены расчеты входящие в бюджет научного исследования: затраты на сырье и материалы, на оборудование, основная и дополнительная заработная плата исполнителей научного исследования, учтены отчисления на социальные нужды и накладные расходы. Общая сумма затрат составила 3 123,664 тысяч рублей.

5.4. Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

5.4.1. Оценка сравнительной 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:

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}}, \quad (12)$$

где I_{ϕ}^p - интегральный финансовый показатель разработки;

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

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

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{3123663,5}{5000000} = 0,625$$

$$I_{\phi}^{a1} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{5000000}{5000000} = 1$$

$$I_{\phi}^{a2} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{4285637,4}{5000000} = 0,86$$

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в размах.

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить следующим образом:

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a, \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p, \quad (13)$$

где I_m – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов; a_i – весовой коэффициент i-го параметра;

b_i^a , b_i^p – бальная оценка i-го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Таблица 18 - Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии \ ПО	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	«Sigma-Aldrich»	«Merck»
1.Стоимость продукции	0,2	5	4	4
2. Отсутствие побочных продуктов	0,1	5	5	5
3. Удобство в эксплуатации	0,15	5	5	4
4. Энергосбережение	0,1	4	4	4
5. Время синтеза	0,15	4	3	3
6. Чистота полученных продуктов	0,15	4	5	5
7. Ресурсосбережение	0,15	5	4	4
ИТОГО	1	4,6	4,25	4,1

$$I_{\text{ТП}} = 5*0,2+5*0,1+5*0,15+4*0,1+4*0,15+4*0,15+ 5*0,15=4,6$$

$$\text{«Sigma-Aldrich»} = 4*0,2+5*0,1+5*0,15+4*0,1+3*0,15+ 5*0,15+4*0,15 = 4,25$$

$$\text{«Merck»} = 4*0,2+5*0,1+4*0,15+4*0,1+3*0,15+ 5*0,15+4*0,15 = 4,1$$

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{\text{финр}}^p$) и аналога ($I_{\text{финр}}^a$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p}, \quad I_{\text{финр}}^a = \frac{I_m^a}{I_{\phi}^a} \quad (14)$$

$$I_{\text{финр}}^p = \frac{4,6}{0,625} = 7,36$$

$$I_{\text{финр}}^{a1} = \frac{4,25}{1} = 4,25$$

$$I_{\text{финр}}^{a2} = \frac{4,1}{0,86} = 4,77$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта. Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^a} \quad (15)$$

$$\mathcal{E}_{cp1} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a1}} = \frac{7,36}{4,25} = 1,73$$

$$\mathcal{E}_{cp1} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^{a2}} = \frac{7,36}{4,77} = 1,54$$

где $\mathcal{E}_{cp}$ – сравнительная эффективность проекта; $I_{мэ}^p$ – интегральный показатель разработки; $I_{мэ}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 19 - Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Разработка	«Sigma - Aldrich»	«Merck»
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,625	1	0,86
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,6	4,25	4,1
3	Интегральный показатель эффективности	7,36	4,25	4,77
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения		1,73	1,54

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволило определить, что представленное в магистерской диссертации исследование и решение технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является наиболее эффективным [59].

В разделе были рассчитаны интегральный финансовый показатель разработки, интегральный показатель ресурсоэффективности разработки,

интегральный показатель эффективности, сравнительная эффективность вариантов исполнения. Оценка сравнительной эффективности исследования позволила определить, что оно наиболее эффективным по сравнению с аналогами.

Таким образом, в разделе «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» был:

1) Проведен анализ потребителей рынка, анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения, SWOT-анализ.

2) Произведено планирование научно-исследовательских работ, в результате которого была сформирована рабочая группа. Составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования, произведено распределение исполнителей по видам работ. Определена трудоемкость выполнения работ равная 684,6 часов. Составлен план проекта, и в соответствии с ним построен календарный график проекта.

3) Произведен расчет бюджета исследования, который составил 3 123 663,5 рублей, так как исследование проводилось на базе лаборатории НИ ТПУ, в которой имеется все необходимое оборудование, лабораторная посуда себестоимость проекта составляет 649 507, 5 рублей.

4) Проведена оценка сравнительной эффективности проекта. Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволило определить, что представленное в магистерской диссертации исследование и решение технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является наиболее эффективным.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СТУДЕНТА

1. О.Е. Ахманова. Использование реакции Риттера в синтезе аминов//
Материалы XVII Международной научно-практической конференции
студентов и молодых ученых, Томск, 17-20 мая 2016 - С.155.