

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

---

Институт природных ресурсов

Направление подготовки: 18.04.01 – Химическая технология

Кафедра: Технологии органических веществ и полимерных материалов

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

Тема работы
<b>Синтез иодониевых солей – производных 4-иодбензолсульфокислоты</b>

УДК 547.227 – 38.05

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5А	Сухорукова Екатерина Георгиевна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Кукурина О.С.	К.Х.Н.		

**КОНСУЛЬТАНТЫ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Креницына З.В.	К.Т.Н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ассистент	Раденков Т.А.			

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ТОВПМ	Юсубов М.С.	Д.Х.Н., профессор		

Томск – 2017 г.

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И  
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
2ДМ5А	Сухоруковой Екатерины Георгиевны

<b>Институт</b>	<b>ИПР</b>	<b>Кафедра</b>	<b>ТОВПМ</b>
<b>Уровень образования</b>	<i>Магистратура</i>	<b>Направление/специальность</b>	<i>18.04.01 Химическая технология</i>

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Вычислены материально-технические, энергетические, финансовые, информационные и человеческие затраты.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Нормы и нормативы по заработной плате исполнителей тему: коэффициент дополнительной заработной платы 12% от основной заработной платы, премиальный коэффициент к месячному окладу работника – 30% от заработной платы по тарифной ставке, коэффициент доплат и надбавок – 0,2, районный коэффициент для г. Томска – 1,3.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Ставка отчислений по уплате во внебюджетные фонды для учреждений, осуществляющих образовательную и научную деятельность 27,1%.

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

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	Перспективность данной разработки выше среднего. Проект нуждается в более детальной проработке, необходима более полная оценка возможных рисков и детализация затрат.
2. Разработка устава научно-технического проекта	Представлен детальный календарный план проекта с указанием исполнителей и их ролей.
3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Представлены структура и календарный план-график проведения НТИ, рассчитан его бюджет и проведена оценка рисков.
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Данный проект является перспективным и инвестиционно-привлекательным по сравнению с уже существующими аналогами.

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

1. Сегментирование рынка;
2. Диаграмма FAST;
3. Календарный план-график проведения НТИ.

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Доцент	Криницына З.В.	к.т.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
2ДМ5А	Сухорукова Екатерина Георгиевна		

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ5А	Сухоруковой Екатерины Георгиевны

Институт	ИПР	Кафедра	ТОВПМ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

### Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения)</li> <li>– опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы)</li> <li>– негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу)</li> <li>– чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера)</li> </ul>	<p>Работа выполнялась в лаборатории ИПР на кафедре ТОВПМ. Рабочей зоной являлось помещение учебной лаборатории. На производительность труда студента, находящегося на рабочем месте, могут влиять следующие вредные производственные факторы: отклонение температуры и влажности воздуха от нормы, недостаточная освещенность рабочего места. Кроме того, студент может подвергаться действию опасных факторов: отравлению химическими парами, возникновение химических ожогов. Наиболее вероятно возникновение чрезвычайных ситуаций техногенного характера в результате производственных аварий и пожаров.</p>
<p>2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</p>	<p>Федеральный закон № 426-ФЗ от 28 декабря 2013 года «О специальной оценке условий труда». Федеральный закон №184-ФЗ «о техническом регулировании от 27 декабря 2002 года. Федеральный закон № 123-ФЗ от 22.07.2008 г (ред от 10.07.2012г) «Технический регламент о требованиях к пожарной безопасности»</p>

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

<p>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой;</li> <li>– действие фактора на организм человека;</li> <li>– приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ);</li> <li>– предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства)</li> </ul>	<p>Отклонения температуры и влажности воздуха от нормы могут возникнуть при неблагоприятных метеоусловиях. Оптимальные и допустимые метеорологические условия температуры и влажности устанавливаются согласно ГОСТ 12.1.005-88. Недостаточная освещенность способствует возрастанию нагрузки на органы зрения и приводит к утомляемости организма. В соответствии с характером выполняемых работ освещенность рабочего места по СНиП II-4-79 должна быть 200 Лк – общая освещенность и 300 лк — комбинированное освещение.</p>
<p>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– механические опасности (источники, средства защиты);</li> <li>– термические опасности (источники, средства защиты);</li> </ul>	<p>Для того, что избежать получения ожога мягких тканей, ожога слизистой, отравления необходимо соблюдать следующие меры индивидуальной защиты согласно ПНД Ф 12.13.1-03:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. При работе в хим. лаборатории необходимо надевать халат из хлопчатобумажной ткани.</li> <li>2. При выполнении работ, связанных с выделением</li> </ol>

<ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты);</i></li> <li>– <i>пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения)</i></li> </ul>	<p><i>ядовитых газов и пыли, для защиты органов дыхания следует применять респираторы.</i></p> <p><i>3. При работе с едкими и ядовитыми веществами дополнительно применяют фартуки, средства индивидуальной защиты глаз и рук.</i></p> <p><i>4. Для защиты рук от действия кислот, щелочей, солей, растворителей применяют резиновые перчатки.</i></p> <p><i>5. Для защиты глаз применяют очки различных типов, щитки, маски.</i></p>
<p><i>3. Охрана окружающей среды:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы);</i></li> <li>– <i>анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы);</i></li> <li>– <i>анализ воздействия объекта на литосферу (отходы);</i></li> <li>– <i>разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.</i></li> </ul>	<p><i>В лабораториях кафедры ТОВПМ используются вредные вещества, по этой причине применяются следующие меры по охране окружающей среды:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>в канализацию сливаются только нейтральные вещества;</i></li> <li>– <i>жидкости, которые в обычных условиях нельзя нейтрализовать собираются в специальных емкостях – «слив»;</i></li> <li>– <i>твердые вещества собираются в специальные емкости и затем отправляются на утилизацию;</i></li> <li>– <i>очистка воздуха в помещениях осуществляется с помощью вентиляции.</i></li> </ul>
<p><i>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>перечень возможных ЧС на объекте;</i></li> <li>– <i>выбор наиболее типичной ЧС;</i></li> <li>– <i>разработка превентивных мер по предупреждению ЧС;</i></li> <li>– <i>разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС;</i></li> <li>– <i>разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий</i></li> </ul>	<p><i>Наиболее типичной ЧС являются производственные аварии и пожары. В целях предотвращения возгорания необходимо соблюдать правила техники безопасности при работе с электрооборудованием, а легковоспламеняемые материалы хранить по возможности в подземных складах. Предусмотренные средства пожаротушения (согласно требованиям противопожарной безопасности СНиП 2.01.02-85): огнетушитель ручной углекислотный ОУ-5, пожарный кран с рукавом и ящик с песком (в коридоре). Кроме того, каждое помещение оборудовано системой противопожарной сигнализации.</i></p>
<p><i>5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</i></li> <li>– <i>организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны</i></li> </ul>	<p><i>В системе обеспечения безопасности жизни и здоровья работников в процессе их трудовой деятельности основная роль принадлежит нормативным правовым актам по охране труда.</i></p>
<b>Перечень графического материала:</b>	
<p><i>При необходимости представить эскизные графические материалы к расчётному заданию (обязательно для специалистов и магистров)</i></p>	

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Раденков Т.А.			

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5А	Сухорукова Екатерина Георгиевна		

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
<b>P1</b>	Иметь <i>глубокие</i> естественно-научные, математические, инженерные <i>знания и умения</i> для создания <i>новых</i> материалов
<b>P2</b>	Применять <i>глубокие знания</i> в области современных технологий химического производства для решения <i>междисциплинарных</i> инженерных задач
<b>P3</b>	Ставить и решать <i>инновационные задачи инженерного анализа</i> , связанные с созданием материалов и изделий, с использованием системного анализа и моделирования объектов и процессов химической технологии
<b>P4</b>	Разрабатывать химико-технологические процессы, <i>проектировать</i> и использовать <i>новое</i> оборудование для создания материалов, конкурентоспособных на <i>мировом</i> рынке
<b>P5</b>	Проводить теоретические и экспериментальные <i>исследования</i> в области создания <i>новых</i> материалов, современных химических технологий
<b>P6</b>	Внедрять, <i>эксплуатировать</i> современные высокотехнологичные линии автоматизированного производства, обеспечивать их <i>высокую эффективность</i> , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды
<i>Универсальные компетенции</i>	
<b>P7</b>	Использовать <i>глубокие знания проектного менеджмента</i> для ведения <i>инновационной</i> инженерной деятельности с учетом юридических аспектов защиты интеллектуальной собственности
<b>P8</b>	<i>Активно</i> владеть <i>иностранным языком</i> на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной инженерной деятельности
<b>P9</b>	Эффективно работать индивидуально, в качестве <i>члена и руководителя группы</i> , состоящей из специалистов различных направлений и квалификаций, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность <i>следовать корпоративной культуре</i> организации
<b>P10</b>	Демонстрировать <i>глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов</i> инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах <i>устойчивого развития</i>
<b>P11</b>	<i>Самостоятельно учиться</i> и непрерывно <i>повышать квалификацию</i> в течение всего периода профессиональной деятельности

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

Институт природных ресурсов

Направление подготовки: 18.04.01 – Химическая технология

Кафедра: Технологии органических веществ и полимерных материалов

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. кафедрой

Юсубов М.С.

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_

(Подпись) (Дата) (ФИО)

**ЗАДАНИЕ**

**на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ5А	Сухоруковой Екатерины Георгиевны

Тема работы:

**Синтез иодониевых солей – производных 4-иодбензолсульфокислоты**

Утверждена приказом директора (дата, номер)	от 03.03.2017, №1454/с
--	------------------------

Срок сдачи студентами выполненной работы:

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

<p><b>Исходные данные к работе</b>  <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энерго-затратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объект исследования – сульфосодержащие диарилиодониевые соли.                      Сырье – иодбензол, серная кислота, гексан, хлороформ, Охоне<sup>®</sup>, бензол, бромбензол, хлорбензол, дихлорбензол, толуол, нитробензол, пиридин, хинолин, ксилол, дихлорметан, 2,2,2-трифторэтанол, тетрафторэтилен, ацетонитрил, <i>мета</i>-хлоропероксибензойной кислоты</p>
<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b>  <i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Аналитический обзор литературы                      Объекты и методы исследования                      Результаты и обсуждение                      Финансовый менеджмент,                      ресурсоэффективность и ресурсосбережение                      Социальная ответственность                      Выводы по работе</p>

<b>Перечень графического материала</b> <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	Презентация
<b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b> <i>(с указанием разделов)</i>	
<b>Раздел</b>	<b>Консультант</b>
Литературный обзор, экспериментальная часть, обсуждение результатов	д.х.н., профессор Юсубов М.С.
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	к.т.н., Криницына З.В.
Социальная ответственность	ассистент, Раденков Т.А.
Literature review	ст. преподаватель Рыманова И.Е.
<b>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и на иностранном языках:</b>	
На русском: Литературный обзор	
На английском: Literature review	

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
зав. кафедрой	Юсубов М.С.	д.х.н., профессор		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5А	Сухорукова Екатерина Георгиевна		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 110 с., 7 рис., 23 схемы, 24 табл., 96 источника, 2 приложения.

Ключевые слова: диарилиодониевые соли, сульфосодержащие соли, Oxone<sup>®</sup>, электрофильное ароматическое замещение, мезитилен.

Объектами исследования являются сульфосодержащие диарилиодониевые соли.

Цель работы – разработать способ синтеза внутренних диарилиодониевых солей, содержащих в своей структуре противоион, с использованием окислительной системы на основе Oxone<sup>®</sup> и серной кислоты.

В ходе проведенного исследования были получены сульфосодержащие соли диарилиодония с различными арильными реагентами.

Область применения: полученные сульфосодержащие диарилиодониевые соли, являющиеся новым классом соединений, могут быть использованы как удобные промежуточные продукты для дальнейшего органического синтеза.

Экономическая эффективность/значимость работы определяется следующими факторами:

1. разработанные методики обладают меньшей токсичностью по сравнению с методиками для получения аналогичных соединений;
2. отсутствие данных реагентов на отечественном рынке.

## Нормативные ссылки

В настоящей работе использованы ссылки на следующие стандарты:

1. ГН 2.1.6.1338-03. Предельно допустимые концентрации (ПДК) загрязняющих веществ в атмосферном воздухе населенных мест.
2. Правила противопожарного режима в Российской Федерации. Утверждены постановлением Правительства Российской Федерации от 25 апреля 2012 г. № 390.
3. Генеральное соглашение между общероссийскими объединениями профсоюзов, общероссийскими объединениями работодателей и Правительством Российской Федерации на 2014 – 2016 гг.
4. Изменение № 1 ГОСТ Р 22.0.02-94 "Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Термины и определения основных понятий" (принято постановлением Госстандарта РФ от 31 мая 2000 г. № 148).
5. Трудовой кодекс Российской Федерации (Собрание законодательства Российской Федерации, 2002, № 1 (ч. I), ст. 3; 2004, № 35, ст. 3607; 2006, № 27, ст. 2878; 2008, № 30 (ч. II), ст. 3616), Приказ от 12 апреля 2011 г. №302н.
6. Федеральный закон от 28.12.2013 № 426 "О специальной оценке условий труда".
7. Технический регламент «О требованиях пожарной безопасности» №123 от 22 июля 2008 г.
8. Приказ Минздравсоцразвития от 16 февраля 2009 г. № 45н «Об утверждении норм и условий бесплатной выдачи работникам, занятым на работах с вредными условиями труда, молока или других равноценных пищевых продуктов, Порядка осуществления компенсационной выплаты в размере, эквивалентном стоимости молока или других равноценных пищевых продуктов, и Перечня вредных производственных факторов, при воздействии которых в профилактических целях рекомендуется употребление молока или других равноценных пищевых продуктов».

9. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.

10. ГОСТ 12.0.230-2007. Система стандартов безопасности труда. Системы управления охраной труда. Общие требования.

11. Приказ Минздравсоцразвития от 12 апреля 2011 г. N 302н «Об утверждении перечней вредных и (или) опасных производственных факторов работ при выполнении которых проводятся обязательные предварительные периодические медицинские осмотры (обследования), и порядка проведения обязательных предварительных и периодических медицинских осмотров (обследований) работников, занятых на тяжелых работах с вредными и (или) опасными условиями труда».

12. ГОСТ Р 53434-2009. Принципы надлежащей лабораторной практики.

13. Межотраслевые правила по охране труда при использовании химических веществ ПОТ Р М-004097.

14. «Санитарно-эпидемиологические требования к содержанию и условиям работы в лабораториях, выполняющих химические, токсикологические, радиологические исследования» Приказ № 3610 от 3 мая 2005 года.

15. ГОСТ 12.2.091-2012. Безопасность электрического оборудования для измерения, управления и лабораторного применения. Часть 1. Общие требования.

16. ГОСТ ИЕС 61010-2-051-2014. Безопасность электрических контрольно-измерительных приборов и лабораторного оборудования. Часть 2-051. Частные требования к лабораторному оборудованию для перемешивания и взбалтывания.

17. ГОСТ 23932-90 Посуда и оборудование лабораторные стеклянные. Общие технические условия.

## Обозначения и сокращения

ИБСК – *para*-иодбензолсульфокислота;

TFE – тетрафторэтилен;

*m*-CPBA – *meta*-хлоропероксибензойная кислота;

ДМСО – диметилсульфоксид.

## Оглавление

ВВЕДЕНИЕ .....	14
ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР .....	15
1 Структура и реакционная способность диарииодониевых солей .....	15
2 Способы синтеза диарииодониевых солей .....	17
2.1 Синтез на основе органических соединений поливалентного иода .....	18
2.2 Синтез на основе неорганических соединений поливалентного иода .....	20
2.3 «One-pot» синтезы .....	20
3 Применение диарииодониевых солей в органическом синтезе .....	23
3.1 Реакции арилирования .....	23
3.1.1 $\alpha$ -Арилирование карбонильных соединений .....	23
3.1.2 Арилирование аренов .....	25
3.1.3 Арилирование алкинов .....	29
3.1.4 Арилирование алкенов .....	31
3.2 Деароматизация фенолов .....	32
3.4 Фотохимия и полимеризация .....	33
4 Заключение .....	33
2 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ .....	35
2.1 Материалы, оборудования и методы исследования .....	35
2.2 Методика синтеза диарииодониевых солей с использованием различных реагентов .....	35
2.3 Методика синтеза диарииодониевых солей с использованием <i>мета</i> -хлорпероксибензойной кислоты .....	37
2.4 Методика синтеза диарииодониевых солей с различными активаторами .....	38
3 РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ .....	41
4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ .....	44
4.1 Предпроектный анализ .....	44
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования .....	44
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения .....	45
4.1.3 Диаграмма Исикавы .....	46
4.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации .....	49
4.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования .....	50
4.2 Инициация проекта .....	50
4.2.1 Цели и результат проекта .....	50
4.2.2 Организационная структура проекта .....	51

4.2.3 Ограничения и допущения проекта .....	52
4.3 Планирование управления научно-техническим проектом .....	52
4.3.1 Контрольные события проекта .....	52
4.3.2 План проекта.....	53
4.4 Бюджет научного исследования .....	56
4.4.1 Материальные затраты .....	56
4.3.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ ...	57
4.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы .....	57
4.3.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы .....	59
4.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды .....	60
4.3.6 Расчет затрат на электроэнергию .....	61
4.3.7 Контрагентные расходы .....	61
4.3.8 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта .....	61
4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования .....	62
4.4.1 Оценка сравнительной эффективности исследования .....	62
5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ .....	64
5.1 Анализ вредных и опасных факторов производственной среды .....	64
5.1.1 Микроклимат .....	64
5.1.2 Освещение .....	65
5.1.3 Вредные вещества .....	66
5.1.4 Шум и вибрация на рабочем месте .....	68
5.2 Анализ выявленных опасных факторов .....	69
5.2.1 Электробезопасность .....	69
5.2.2 Пожарная и взрывная безопасность .....	70
5.3 Экологическая безопасность.....	71
5.4 Чрезвычайные ситуации .....	72
5.4.1 Производственная аварии .....	72
5.5 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .....	73
5.5.1 Особенности законодательного регулирования проектных решений .....	73
5.5.2 Организационные мероприятия обеспечения безопасности .....	74
ВЫВОДЫ .....	76
СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ .....	77
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....	78
Приложение А .....	86
Приложение Б .....	105

## ВВЕДЕНИЕ

Соединения поливалентного иода (СПИ) нашли широкое применение в качестве нетоксичных и селективных реагентов в органическом синтезе [1]. СПИ являются альтернативой токсичным окислителям на основе тяжелых металлов и дорогостоящим органо-металлическим катализаторам. В качестве мягких окислителей спиртовых фрагментов в полном синтезе биологически активных веществ часто используются реагенты на основе иода (V), такие как реагент Десс-Мартина и IBX (2-йодбензойная кислота). IBX также может влиять на окислительные превращения ряда других функциональных групп [2]. Соединения иода (III) с двумя гетероатомными лигандами, например, диацетоксиидбензол (PIDA) и иодозилбензол, используются для окисления спиртов и алкенов, а также для  $\alpha$ -функциональных соединений [1].

Также соединения иода (III) с двумя углеродными лигандами обладают свойствами, сходными со свойствами комплексов Hg, Pb и Pd, и могут использоваться в реакциях, аналогичных реакциям катализируемым металлами [3]. Поскольку использование переходных металлов в органическом синтезе имеет ряд недостатков, таких как стоимость, токсичность и ограниченность в фармацевтических продуктах, интерес к реакциям с иодом (III) в последнее время значительно вырос [3]. Диарилиодониевые соли являются наиболее известными соединениями этого класса. Из-за их высокой степени дефицита электронов и отличительной способности к отщеплению они служат в качестве универсальных арилирующих агентов с различными нуклеофилами.

Было опубликовано несколько всесторонних обзоров [4-6] и книг [7] по теме поливалентного иода. Это дает краткий исторический обзор на последние синтетические разработки и применение диарилиодониевых солей в органическом синтезе.

## ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

### 1 Структура и реакционная способность диарилиодониевых солей

Диарилиодониевые соли – это вещества, устойчивые к воздуху и влаге, известные с 1894 года. Структура данных соединений состоит из двух арильных компонентов, положительно заряженного атома иода и аниона  $X^-$  (рисунок 1.1).

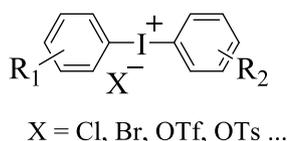


Рисунок 1.1 – Общая структурная формула диарилиодониевых солей

Диарилиодониевые соли с галогенидными анионами, как правило, плохо растворимы во многих органических растворителях, тогда как трифлатные и тетрафторборатные соли обладают лучшей растворимостью. Другими отличительными свойством последних анионов является их слабая или несущественная нуклеофильность, что делает их легко применимыми в органическом синтезе.

Термин «соль» вводит в заблуждение, так как рентгеновские структуры соединений иода (III) показывают T-образную молекулу, где иод и два апикальных лиганда (L) имеют гипервалентную связь (рисунок 1.2) [8].

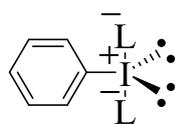


Рисунок 1.2 – T-образная форма, определяемая рентгеноструктурным анализом

Считается, что соединения иода (III) с двумя гетероатомными лигандами сохраняют эту T-форму также в растворе, тогда как структура диарилиодониевой соли в растворе зависит как от аниона  $X^-$ , так и от растворителя [8]. Номенклатура ИЮПАК для этого класса соединений – «диарил-13-иоданы», хотя старый термин «диарилиодониевая соль» все еще используется.

Соединения иода (III) являются электрофильными при иоде из-за узла в несвязывающей орбите поливалентной связи (рисунок 1.2). Таким образом, они реагируют с различными нуклеофилами путем образования первоначальной связи Nu-I и высвобождением из лигандов (схема 1.1).

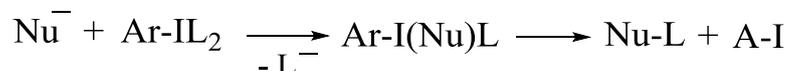


Схема 1.1 – Общая реакционная способность солей диарииодония в реакциях с нуклеофилами

Последующее нуклеофильное замещение анионом свободного лиганда или редуцированное элиминирование дает продукт Nu-I и высвобождает Ar-I. Механизм второй стадии зависит от нуклеофила, природы лиганда и условий реакций [7].

Как правило, диарииодониевые соли реагируют через восстановительный путь элиминирования, доставляя один из арильных фрагментов в нуклеофил. Также были предложены радикальные механизмы, однако, исследования распределения ингибиторов радикалов в ряде случаев свидетельствует об участии радикалов [7]. В катализируемых металлом реакциях соли диарииодония ведут себя как более реакционноспособные варианты арилоидов, доставляя арильный фрагмент или лиганд в металлический центр в окислительном присоединении (схема 1.2).

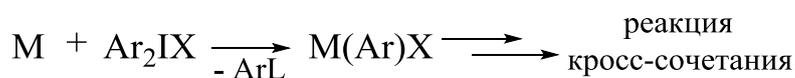


Схема 1.2 – Общая реакционная способность солей диарииодония в реакциях, катализируемых металлом

Арильный комплекс металла реагирует дальше с образованием продуктов кросс – сочетания [7].

Симметричные соли диарииодония (рисунок 1.1,  $R_1=R_2$ ), обычно предпочтительней несимметричных солей, так как их использование позволяет избежать проблем с селективностью в реакциях арильного переноса. Однако,

несимметричные соли ( $R_1 \neq R_2$ ) желательны, когда исходные материалы дороги, поскольку один арильный фрагмент может избирательно переноситься, а другой арильный фрагмент ведет себя как «фиктивный лиганд». Арильные группы часто могут быть дифференцированы электронными или стерическими способами [9], и этот тип селективности будет упоминаться как хемоселективная реакция. Общей тенденцией является то, что более энантиомерный арильный фрагмент переносится в арилирование енолата и гетероатомным, тогда как более обогащенная электронами арильная группа переносится в реакциях кросс-сочетания. Кроме того, свойства несимметричных солей могут быть легко изменены, что полезно в некоторых случаях.

## 2 Способы синтеза диарилиодониевых солей

Способы синтеза диарилиодониевых солей обычно включают две или три стадии с начальным окислением арилиода до иода (III), а затем лиганд с ареном или металлоорганическим реагентом для получения диарилиодониевой соли (схема 2.1 а).

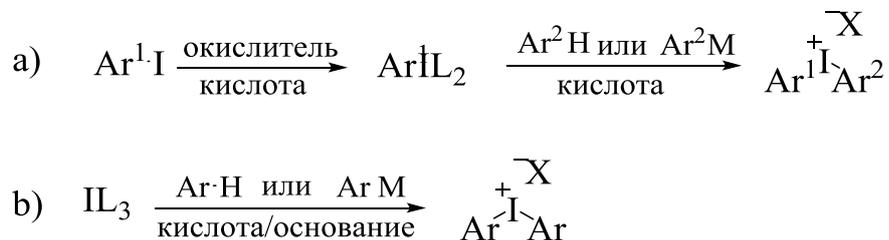


Схема 2.1 – Синтетические стратегии получения солей диарилиодония

Во многих случаях необходим последующий анионообменный этап. Чтобы сократить путь синтеза до симметричных солей иода, могут быть использованы предварительно полученные реагенты неорганического иода (III) (схема 2.1 б).

Недавний прогресс включает в себя «one-pot» реакции окисления и реакции лигандного обмена для получения солей диарилиодония непосредственно из аренов и иодаренов или молекулярного иода. Подавляющее большинство реакций протекает в кислых условиях, хотя существуют некоторые нейтральные или основные методы.

Общей чертой большинства синтетических путей является электрофильное ароматическое замещение (EAS) аренами (Ar-H) на промежуточное соединение иода (III), которое ограничивает количество солей, которые могут быть получены этими способами. Высокая пара-селективность обычно достигается с *o/p* – заместителями, тогда как *m* – направляющие заместители часто приводят к неудовлетворительным выходам и образованию побочных продуктов. Синтетически полезные выходы симметричных солей с *орто*- и *мета*-заместителями могут быть получены ограниченным числом путей с применением литированных аренов, арилбороновых кислот, станов или силонов (схема 2.2).



Схема 2.2 – Региоспецифические стратегии получения солей диарилиодония

## 2.1 Синтез на основе органических соединений поливалентного иода

Наиболее распространенным способом синтеза диарилиодониевой соли является поэтапный подход, при котором арилиодид превращается в арил-иодин (III) соединение путем обработки неорганическим окислителем в кислотных условиях. Этот арилиодониевый (III) интермедиат выделяют и последующий лигандный обмен с аренами, арилстанном или арилсиланом образует диарилиодониевую соль в кислых или нейтральных условиях. Источником аниона обычно является используемая кислота, а анионный обмен часто выполняется, чтобы получить более легко изолированную и/или применимую соль. Структурно разнообразные соли диарилиодония могут быть получены с использованием различных реагентов в зависимости от

электронных свойств арильных фрагментов, хотя выбор правильного метода может быть затруднен для неспециалистов в данной области. Стратегия является довольно длительной, но ее можно сократить за счет использования коммерчески доступных соединений арилиода (III).

Первый синтез диарилиодониевых солей был опубликован в 1894 году Хартманом и Майером. Ранний синтез включал конденсацию предварительно сформированных поливалентных соединений иода, таких как иодосиларены ( $\text{ArI}=\text{O}$ ) и иодоксиларены ( $\text{ArIO}_2$ ) [10]. Эти реакции были трудоемкими и неэффективными и часто с низкими выходами, что привело к тому, что соли диарилиодония считались мало изученными реагентами в течение нескольких десятилетий [11].

Значительный вклад в эту область внес Беринг и его коллеги, опубликовавшие большое количество синтетических методик в 1950-х годах. Их метод фокусировался на обработки аренов рядом поливалентных соединения иода, в присутствии симметричных и несимметричных солей диарилиодония (схема 2.3) [12, 13].

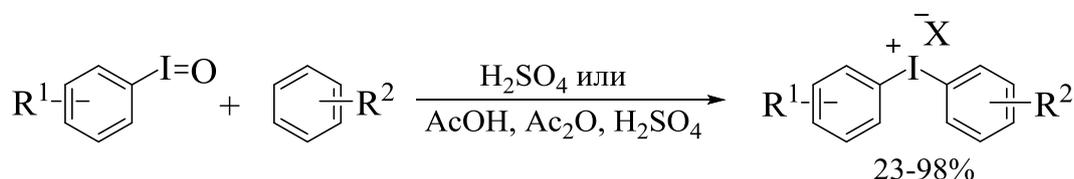


Схема 2.3 – Реактивы органического йода (III), используемые при синтезе солей диарилиодония

Электронные свойства арена влияют на реакционную способность и значительно влияют, как и ожидалось в реакциях EAS. Было установлено, что комбинация реагент-уксусный ангидрид/трифторуксусная кислота эффективна для богатых электронами аренов и гетероаренов, таких как тиофен [14, 15], тогда как серная кислота необходима для субстратов с дефицитом электронов [13]. Сополимеры диарилиодония на полимерной подложке были недавно получены из соответствующих диацетоксиод-аренов таким образом [16, 17].

## 2.2 Синтез на основе неорганических соединений поливалентного иода

Синтез солей иода можно сократить с помощью неорганических поливалентных иодных реагентов. Эта стратегия обычно эффективна при синтезе симметричных солей диарилиодония, недостатком этого процесса является то, что неорганические иодные реагенты и некоторые из них недостаточно стабильны.

Ранняя работа в этой области была проведена Массоном и его коллегами, которые обнаружили, что арены можно обрабатывать иодистой кислотой или иодсульфатом для образования диарилиодониевых солей [18]. Эта тема была развита Берингером, который также выполнил анионные обмены для генерации соответствующих диарилиодоний-галогенидов (схема 2.4 а) [12, 13].

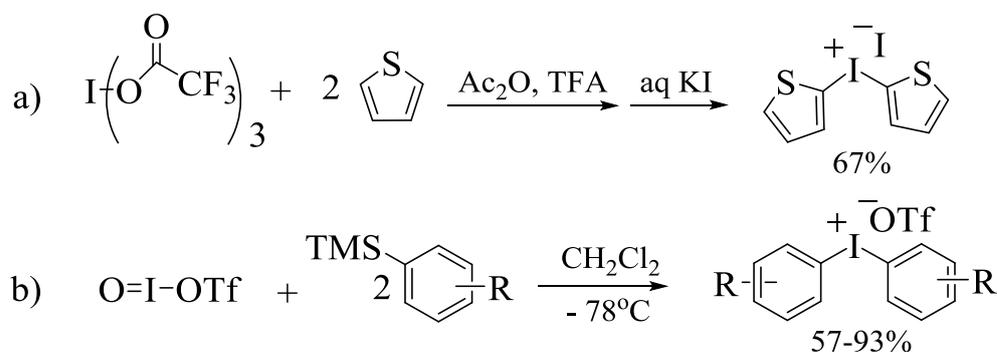


Схема 2.4 – Неорганические гипервалентные иодные (III) реагенты, используемые при синтезе солей диарилиодония

Недавно была опубликована измененная процедура [18]. Затем было исследовано использование богатых электронами аренов и гетероаренов и соли бис(2-тиенил)иодония могут быть получены с хорошими выходами из трифторацетата и иод(III)трифторацетата (схема 2.4 b) [16, 19].

В последнее время Стаг, Жданкин и сотрудники сообщают о нескольких реагентах, которые могут быть использованы с активированными аренами для получения солей диарилиодония в региоспецифической форме.

## 2.3 «One-pot» синтезы

Разработка путей синтеза диарилиодониевых солей непосредственно из иодоаренов без выделения иода (III) промежуточный, является

привлекательным по многим причинам. Преимущества включают в себя уменьшение времени реакции и повышенный объем субстрата, так как многие промежуточные неустойчивы к изоляции. Более того, применимость улучшается, когда разнообразно замещенные соли диарилиодония могут быть получены таким же способом.

Для успешности реакции с одним реагентом часто необходимо тщательно выбирать условия реакции и электронные свойства арилиодида и арена. Арен не может быть слишком недостаточным электроном, чтобы избежать образования побочных продуктов, вызванных взаимодействием арилиодида в качестве арена в EAS. Температура и время реакции часто изменяются, чтобы соответствовать быстрому или медленному окислению и ступеням EAS.

В 1953 г. Берингер и коллегами сообщил, что некоторые соли диарилиодония могут быть получены непосредственно из алкилзамещенных арены с коммерческим окислителем иодатом калия (схема 2.5 а). [12, 13, 20]

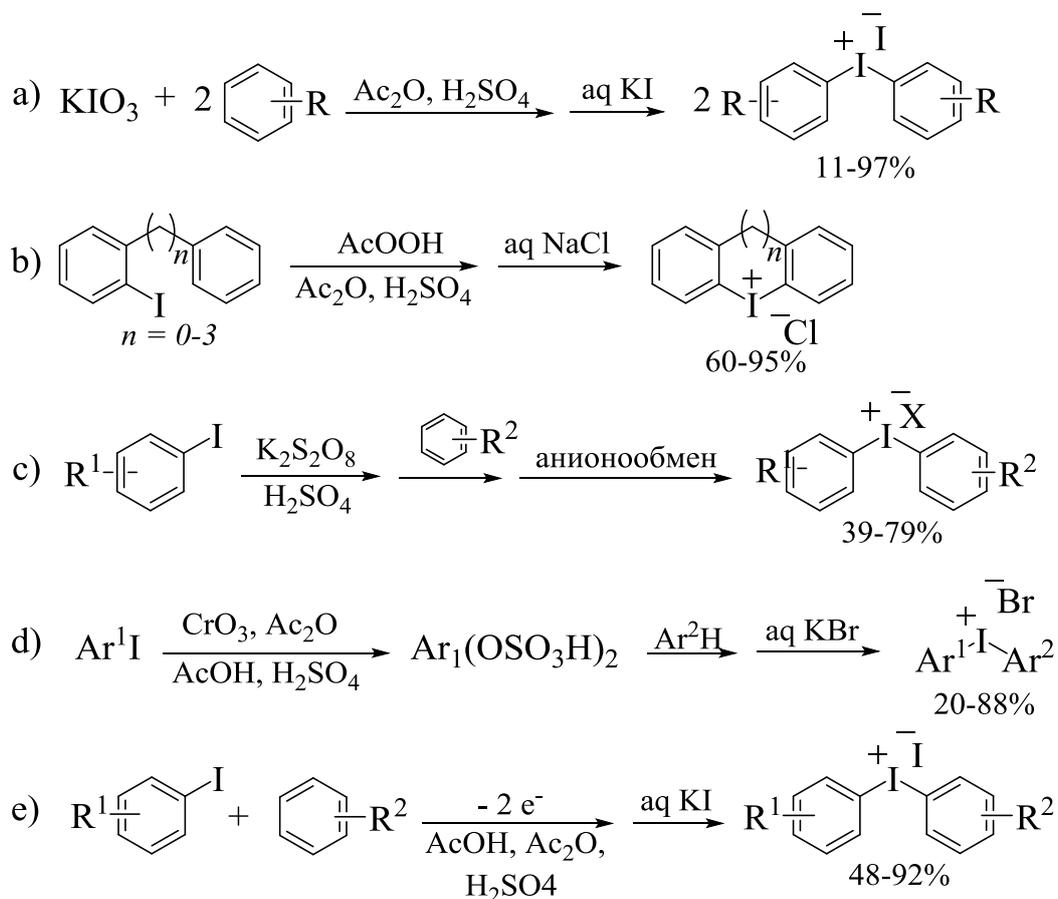


Схема 2.5 – One-pot синтез одноатомных солей диарилиодония из арилиодилов

Циклические соли диарилиодоний, как правило, легче сформировать, чем соответствующие ациклические структуры [21]. Таким образом, не удивительно, что одна из первых процедур в «one-pot» синтезов включала циклические структуры. В 1956 году Сандин и его коллеги сообщили, что добавление 2-иоддифенила и аналогичные соединения с надуксусной кислотой с последующим добавлением серной кислоты приводили к замыканию кольца (схема 2.5 b) [22].

Кроме того, циклизация диазониевой соли, полученной из 2-амино-2'-иодобифенила была проведена с высоким выходом [23]. Пероксид водорода в уксусном ангидриде / серной кислоте может быть использован в синтезе определенных гетероциклических солей диарилиодония, например, из 2-иодфенил (фенил) эфира [24].

Следующий синтез ациклических солей диарилиодония был опубликован в 1959 г., когда арилиодиды были окислены *in situ* с помощью персульфата калия или перекиси бария, с последующим конденсацией с ареном (схема 2.5 c) [13, 25]. Диарилиодониевые соли с внутренними карбоксилатными анионами также были получены таким образом [26].

Kaz'mierczak и Skulski сообщили о последовательной одностадийной реакции из дефицитных по электрону арилиодидов, в которых используется триоксид хрома с комбинацией реагента уксусный ангидрид, уксусная кислота и серная кислота в безводных условиях. Последующий нагрев богатым электроном арена с последующим анионным обменом приводит к получению диарилиодониевых бромидов (схема 2.5 d) [27].

Реакция проходит быстро, но требует токсичных реагентов и утомительных стадий очистки. Был также разработан окислительный анион-обменный процесс, в котором перекись водорода использовалась для замещения иона бромида различными другими анионами [27]. Позднее было описано, что перборат натрия может быть использован с той же комбинации реагентов в синтезе иодониевых солей из электронно-богатых арилиодидов, однако более длительное время реакции и реагенты в избытке требуются [28].

Элегантный электросинтез диарилиодоний солей сообщает Peacock и Pletcher в 2000 году [29]. Анодное окисление арилиодидов в кислой среде в присутствии аренов приводит к диарилиодониевым иодидам с хорошими выходами (схема 2.5 e).

Сфера применения ограничивалась алкилзамещенными диарилиодониевыми солями, поскольку богатые электронами субстраты давали побочные продукты и электронодефицитные были слишком инертными [29, 30].

### **3 Применение диарилиодониевых солей в органическом синтезе**

В последнее десятилетие соли диарилиодония нашли широкое применение в органическом синтезе, и в настоящее время охватывают такие разнообразные реакции, как катализируемые металлами реакции кросс-сочетания посредством активации связи C–H,  $\alpha$ -арилирование карбонильных соединений, арилирование широкого спектра гетероатомных нуклеофилов, генерирование бензиловых фрагментов и деароматизация фенолов. В асимметричном синтезе также имеются успехи, хотя эта область остается в зачаточном состоянии и представляет собой сложную задачу для будущих исследований. Кроме того, эти универсальные соединения промышленно применяются в качестве катионных фотоинициаторов в процессах полимеризации.

#### **3.1 Реакции арилирования**

##### **3.1.1 $\alpha$ -Арилирование карбонильных соединений**

Введение арильных фрагментов в  $\alpha$ -положение карбонильных соединений, особенно асимметрично, является постоянной проблемой в органическом синтезе. Соли диарилиодония являются средством, с помощью которого эта цель может быть достигнута без использования тяжелых металлов, таких как палладий.

$\alpha$ -Арилирование карбонильных соединений с использованием диарилиодониевых солей известно уже много десятилетий. Первый доклад принадлежит Берингеру и его коллегам в 1960 г [31]. Фенилирование 5,5-

диметилциклогексан-1,3-диона было достигнуто с выходом 22%, вместе с 23% бисфенилированного продукта (схема 3.1). Такую же реакцию проводили с использованием (2-нитрофенил) фенилиодонийбромида и наблюдали только перенос замещенной фенильной группы.

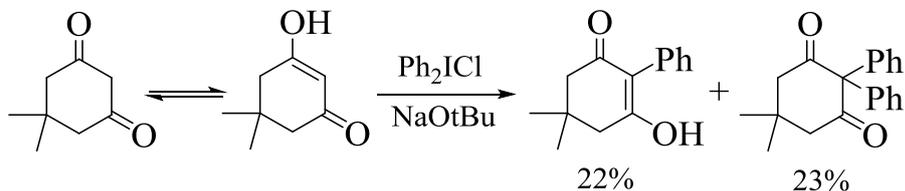


Схема 3.1 –  $\alpha$ -арилирование дикетона с использованием хлорида дифенилиодония

Берингер с коллегами сообщили об успешном арилировании 1,3-индандионов [32], малонатов [33], сложных эфиров и  $\beta$ -кетоефиры [34] и 1-инданонов [35]. Трет-бутанол использовался в качестве растворителя, трет-бутоксид натрия или калия в качестве основания. Был предложен радикальный механизм для арилирования [32, 36], хотя более поздние исследования оспаривали это [37]. Альтернативный способ для арилирования дионов был опубликован Хэмптоном и сотрудниками, в котором фенил-2,4-пентандион был получен с использованием амида натрия в жидком аммиаке [38]. Это дало возможность проводить данную реакцию в миллиграммовом масштабе с выходом до 64% [39].

Райан и Станг исследовали арилирование кетонов, используя диизопропиламид лития (LDA) для получения енолята лития циклогексанона. Было обнаружено [40], что обработка енолята дифенилиодониумным трифлатом приводит к получению менее 5% целевого продукта, но выход можно увеличить до 50% при добавлении одного эквивалента цианида меди (I). Получали смесь, содержащую продукт, циклогексанон и иодбензол в соотношении 1:1:2 (схема 3.2). Было также отмечено, что пятичленные циклические кетоны содержат диариллированные продукты, тогда как более крупные размеры колец были только моноариллированы.

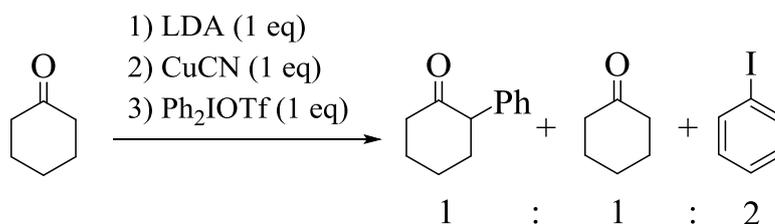


Схема 3.2 – Медь-катализируемое арирование циклогексанона

В 1991 году Чен и Козер впервые продемонстрировали арирование простых эфиров силиленола с использованием фторида дифенилиодония.  $\alpha$ -фенил или  $\alpha$ -дифенилкетоны, были получены с выходом 20-88%. Циклические субстраты были в целом более подходящими, чем ациклические субстраты [41]. Равал с сотрудниками изучили арирование ТМС-енольные простых эфиров с использованием (2-нитрофенил)фенилиодонийного фторида (схема 3.3) [42]. В соответствии с выводами Берингера, была перенесена только электронная дефицитная 2-нитрофенильная группа. [31]

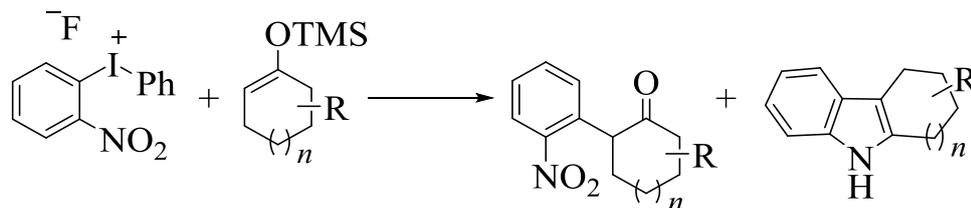


Схема 3.3 – Арирование эфиров ТМС-енола и синтез индолов

### 3.1.2 Арирование аренов

Синтез биарилов с использованием солей диарилиодония в качестве одного из партнеров по связыванию становится все более широко распространенным в течение последнего десятилетия, в последнее время в реакциях кросс-сочетания с активацией С–Н. Перспективная мета-селективная медьсодержащая арилизация СН-связи, опубликованная Фиппсом и Гонтом в 2009 году, представляет собой яркий пример полезности солей диарилиодония в современной органической химии [43]. Используя 10 мол.% Cu(TfO)<sub>2</sub> в дихлорэтане (DCE), можно получать широкий диапазон метазамещенных биарилов. Предлагаемый механизм этой необычной селективности

проиллюстрирован на схеме 3.4. Интересно, что катализ палладия (II) приводит к обычному *орто*-замещенному продукту [44].

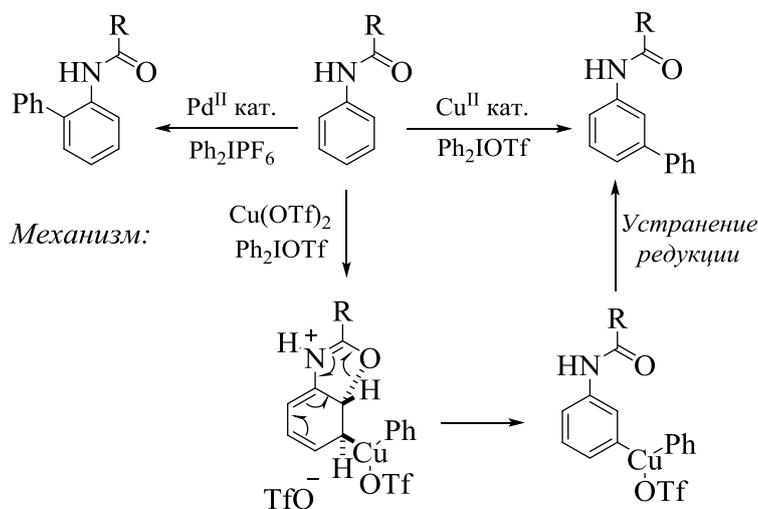


Схема 3.4 – *мета*-Селективная С–Н активация/арилирование

До открытия этой *мета*-селективной реакции арилирования, Гаунт опубликовал доклад о медь-катализируемом индол-арилировании, в котором региоселективность могла изменяться путем изменения природы заместителя на индольном азоте. Свободные *N*-H и *N*-алкильные индолы доставляли 3-арилированный продукт, тогда как *N*-ацетилинды давали 2-арилированный продукт [45]. Предлагаемый механизм реакции вовлекает  $\text{Cu}^{\text{III}}$ , промежуточное соединение, которое позволяет  $\text{C3} \rightarrow \text{C2}$  миграцию связи  $\text{C}-\text{Cu}$ , когда *N*-ацетил присутствует.

Также была исследована активация С–Н в присутствии палладия. В 2005 году Сэнфорд опубликовал метод активации/арилирования С–Н ряда функционализированных аренов и гетероциклов (схема 3.5 а) [46].

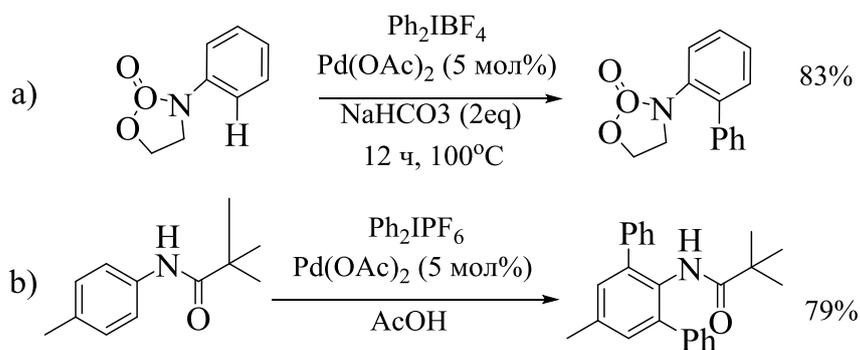


Схема 3.5 – Синтез биарила с помощью активации / арилирования СН

a) Sanford и b) Даугулисом

$Pd^{II}/Pd^{IV}$  каталитический цикл был предложен для этой реакции. В том же году Даугулис и Зайцев сообщили об *орто*-арилровании анилидов с использованием арилиодидов или гексафторфосфата дифенилиодония (схема 3.5 b) [44]. Реакции с использованием соли иодония требовали только ацетат палладия в качестве катализатора, тогда как арилиодиды требовали добавления стехиометрических количеств ацетата серебра. С–Н активация / метод арилирования с использованием диарилиодониевой соли также был применен к арилированию бензодиазепина [47] и в синтезе 3-(1-арилметил)оксиндолов [48].

Сэнфорд и его коллеги разработали катализируемое палладием 2-арилрование индолов с использованием диарилиодониевых солей (схема 3.6) [49]. Эта мягкая процедура оказалась совместимой со свободными индолами N–H, не конкурирующей с реакцией N-арилрования.

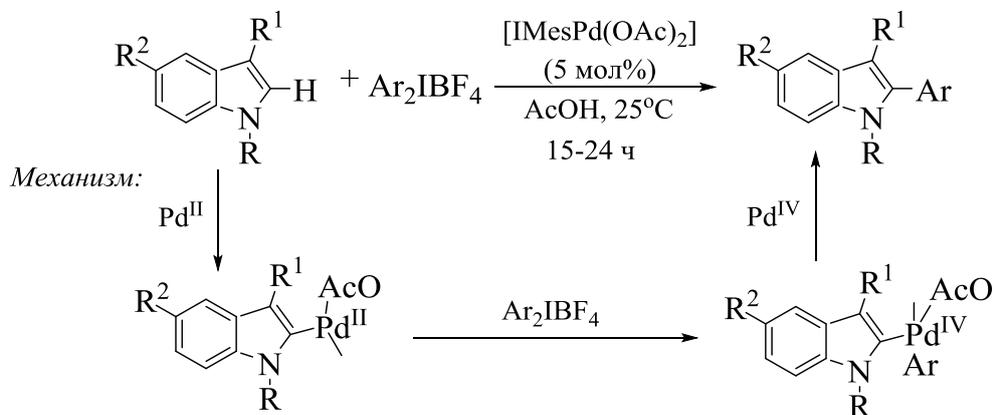


Схема 3.6 – Предложенный каталитический цикл  $Pd^{II}/Pd^{IV}$  для 2-арилрования индолов.

IMes = 1,3-диметилстилидазол-2-илиден

Ванг и Чен сообщили о катализируемой металлом реакции арилмагнийбромидов с тетрафторборатами диариодиодония [50]. Смесь катализаторов палладия и цинка, использовалась для получения целого спектра диариллов с превосходными выходами; в отсутствие хлористого цинка были получены низкие выходы. Кроме того, было установлено, что направленное *орто*-металлирование пиридин-*N*-оксидов реактивом Гриньяра с последующей обработкой трифлатом дифенилиодония в присутствии  $[Pd(PPh_3)_4]$  и  $ZnCl_2$  дало в результате 2-фенилированный продукт [51]. Ямадзаки с сотрудниками сообщили о восстановительном сочетании диарилиодониевых солей путем обработки порошком цинка в присутствии палладиевого катализатора [52].

Методы арилирования, катализируемые медью, были разработаны Кангом и его коллегами и включали арилирование арилстаннанов и арилборанов [53]. Также было сообщено о никель-катализируемом арилировании алкилстаннанов [54].

Реакции кросс-сочетания типа Сузуки с использованием арилбороновой кислоты могут протекать при загрузке катализатора 0,2 моль%  $[Pd(PPh_3)_4]$  при комнатной температуре за 5 минут с выходами 87-99% [55]. Тетраарилбораты также подходящие субстраты для этой реакции; из них были получены биарильные продукты всего за 20 секунд при микроволновом облучении [56]. Карболинированное арилирование также оказалось успешным; кетоны были получены с хорошими выходами по реакции арилстаннанов и иодониевых солей [57]. Более экзотические металлоорганические реагенты, такие как висмут [58] и теллур [59], также были исследованы.

Альтернативной стратегией для обоих металлоорганических связывающих партнеров и активации C–H является декарбоксилирующее взаимодействие, как продемонстрировано Бехтом и Ле Дрианом. Используя этот метод, можно было бы легко получать широкий диапазон высокозамещенных, несимметричных биариллов (схема 3.7) [60].

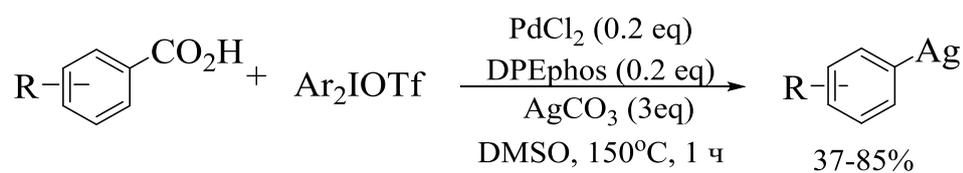


Схема 3.7 – Декарбоксилирующая стратегия сочетания

### 3.1.3 Арилирование алкинов

Арилирование как алифатических, так и ароматических алкинов солями диарилиодония было успешно достигнуто с использованием ряда переходных металлов. Недавним примером такой реакции является катализируемый палладием и серебром метод, разработанный Чжу с сотрудниками. Эта мягкая процедура применима для широкого круга алифатических и ароматических алкинов (схема 3.8) [61]. В случае несимметричных солей диарилиодония был селективно переведен наиболее электронно-богатый арильный фрагмент.

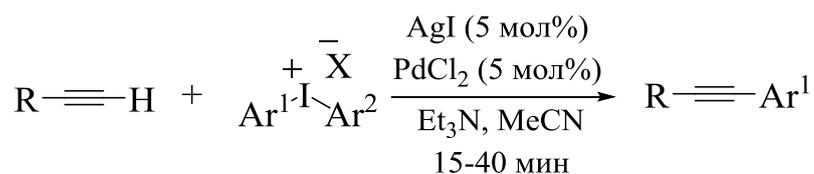


Схема 3.8 – Реакция Соногашира, катализируемая Pd/Ag

За несколько лет до этого Канг с коллегами опубликовали вариант катализируемый медью. Используя 10 мол.% иодида меди (I), желаемые продукты были получены всего за 30 мин при комнатной температуре [62]. Этот метод применим к широкому спектру функционализированных терминальных ацетиленов, в том числе ацетиленовых спиртов и сложных эфиров. Ранее той же группой сообщалось о медь-катализируемой реакции карбонилирования – арилирования алкинилстаннанов солями диаридиония [53, 57].

Алкины, несущие электроноакцепторные группы, обычно являются нереакционноспособными в металл-катализируемых реакциях с арилиодидами; соли диарилиодония являются средством для решения этой проблемы. Смесь палладиевых и медных катализаторов была использована Радхакришнаном и

Стангом совместно с тозилатом дифенилиодония или трифлатом при фенировании эфиров, пропаргиловых кетонов и пропаргиловых эфиров [63]. Было отмечено, что наиболее электронно-избыточный арильный фрагмент был переведен в продукт, когда были использованы несимметричные соли диарилиодония. Предлагаемый механизм проиллюстрирован на схеме 3.9. Та же самая каталитическая смесь была использована Белецкой с сотрудниками для арилатных терминальных ацетиленов [64].

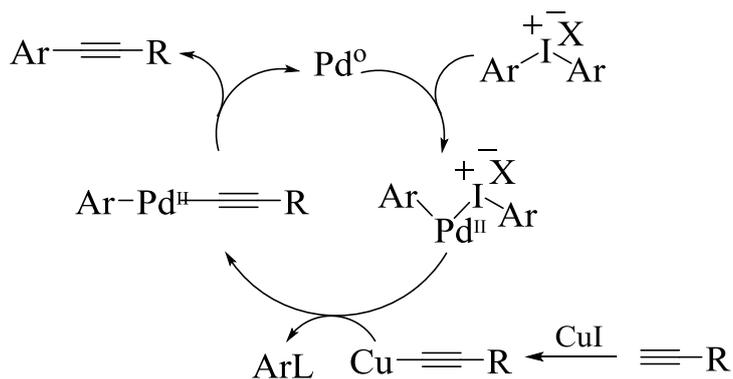


Схема 3.9 – Предлагаемый механизм Станга для перекрестного сочетания алкинов и эинов  
[Pd (PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>] /CuI

В дополнение к приведенным выше примерам реакций кросс-сочетания типа Соногаширы были разработаны реакции карбоксилирования кросс-сочетания концевых алкинов, катализируемых ацетатом палладия (схема 3.10) [65]. При использовании алифатических алкинов необходимо добавить 10 мол% меди (I). Наиболее богатый электронами арильный фрагмент был перенесен в несимметричные соли.

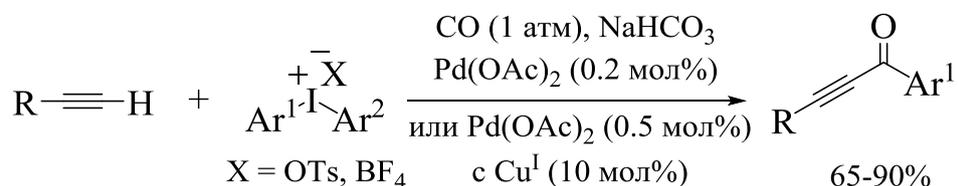


Схема 3.10 – Карбонилирующая реакция кросс-сочетания концевых алкинов с солями диарилиодония

Восстановительное арилирование концевых алкинов с использованием трихлорида индия и боргидрида натрия сообщалось Сюэ с сотрудниками в 2006

году (Схема 3.11) [66]. Реакция оказалась успешной для широкого круга ароматических алкинов, (*E*)-алкена в качестве основного продукта с небольшими количествами (*Z*) - и 1,1-замещенных алкенов в качестве побочных продуктов.

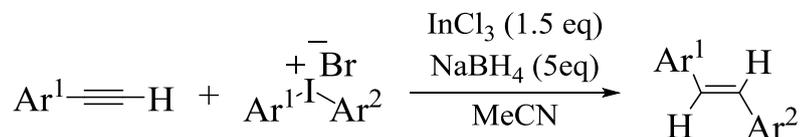


Схема 3.11 – Восстановительное фенилирование ароматических алкинов

### 3.1.4 Арилирование алкенов

Уже более десятилетия известно арилирование алкенов с использованием солей диарилиодония. Чжу и коллеги сообщили о реакции типа Хек, требующей менее одной минуты в водных условиях. Данную процедуру использовали для получения ряда *транс*-коричных кислот и *транс*-коричных спиртов с превосходными выходами (схема 3.12) [67].

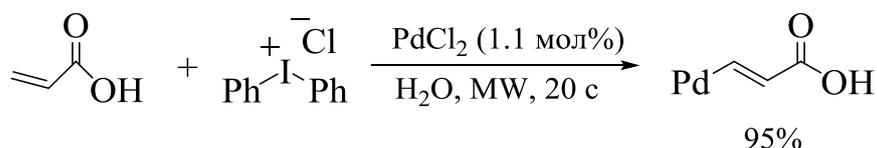


Схема 3.12 – Синтез *транс*-коричной кислоты

Они также отметили, что при использовании несимметричных солей иода, наиболее обогащенный электронами арен был переведен в алкен. Аналогичное арирование по методу Хек было выполнено для метилвинилкетона [68].

Реакция карбонилирования винилстаннанов с трифлатом дифенил-иодония с использованием хлорида палладия (II) в качестве катализатора привела к образованию виниларилкетонов с высоким выходом за 20 мин при комнатной температуре (схема 3.13) [57]. Также известен катализируемый медью вариант этой реакции [53], как и некарбонильная связь Стилле [69].

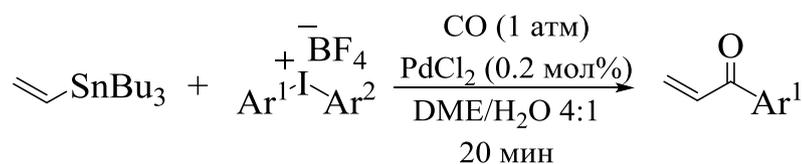


Схема 3.13 – Реакция карбонилирования Стилле типа

В 1996 году Кан и соавторы опубликовали статью о реакции кросс-сочетания по Сузуки с использованием винилборанов и только 0,2 мол %  $[\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4]$  в качестве катализатора с получением желаемого продукта в течение 10 мин при комнатной температуре (схема 3.14) [55]. Этот метод также был успешным для арил-арил соединений.

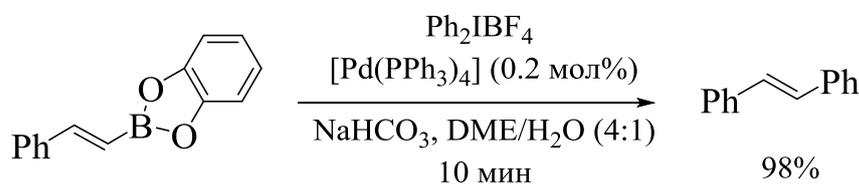


Схема 3.14 – Реакция Сузуки с использованием тетрафторбората дифенилиодония

### 3.2 Деароматизация фенолов

Озан-Боденон и Квидо обнаружили новое применение соли диарилиодония в качестве реагентов для деароматизации фенолов [70]. В их изящной процедуре можно было бы деароматизировать широкий спектр замещенных фенолов (схема 3.24). Было обнаружено, что присутствие небольшого электронодонорного заместителя в *орто*- или *пара*-положении фенола определяет региоселективность реакции. Было проведено детальное исследование механизма реакции, и было установлено, что радикальный механизм не работает. О-фенилирование наблюдалось для некоторых субстратов, и это было предложено быть результатом внутримолекулярного связывания лиганда.

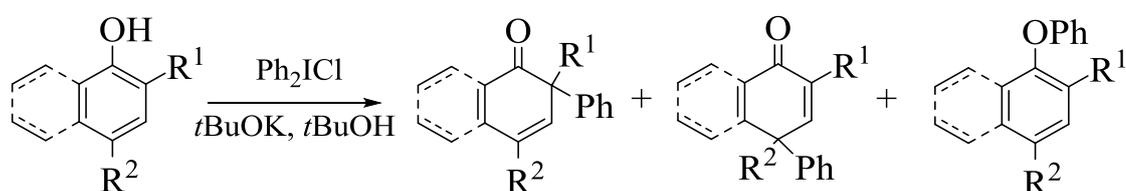


Схема 3.24 – Деароматизация фенолов

### 3.4 Фотохимия и полимеризация

Фотохимические свойства солей диарилиодония известны на протяжении длительного времени [71], что привело к их широкому применению в качестве катионных фотоинициаторов [72], например, при полимеризации эпоксидов [73] и оксетанов [74]. Соли диарилиодони особенно желательны в промышленных применениях, поскольку они не содержат тяжелых металлов, не расщепляются на токсичные побочные продукты и могут быть получены с помощью ряда заместителей, способствующих растворимости.

Детальное исследование фотохимических свойств солей диарилиодония было проведено Дектаром и Хаккером в 1990 году, которые выделили продукты, полученные при фотолизе дифенилиодоний трифлата в различных растворителях [75]. Предполагалось, что прямой фотолиз соли способствует гетеролитическому расщеплению, приводя к образованию фенильного катиона и иодбензола. Сенсibilизированная фотодеформация привела к гомолитическому отщеплению фенильного радикала и катиона радикала иодбензола (схема 3.26).

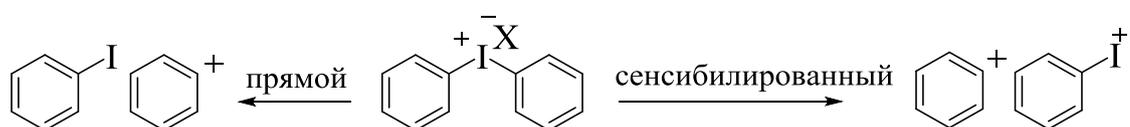


Схема 3.26 – Сравнение прямого и сенсibilизированного фотолиза диарилиодониевых солей

## 4 Заключение

Легкие и эффективные пути синтеза солей диарилиодония, которые были недавно разработаны, устраняют необходимость в токсичных реагентах и потенциально взрывоопасных промежуточных продуктах при синтезе этих соединений. Огромное разнообразие структур теперь может быть получено оперативно простым и эффективным способом. Следует надеяться, что эти достижения позволят увеличить количество этих соединений в коммерческих целях, что необходимо для применения в промышленности.

Будущие задачи включают в себя разработку более эффективных методов, поскольку в качестве побочного продукта образуется стехиометрическое количество иодоарена. Каталитический процесс, при котором соли диарилиодиония образуются *in situ*, еще более уменьшит воздействие этих реакций на окружающую среду. Другим интригующим направлением исследований является использование солей диарилиодиония в асимметричных реакциях арилирования.

## 4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

### 4.1 Предпроектный анализ

#### 4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Продукт: сульфосодержащие диарилиодониевые соли с электроноакцепторными и электронодонорными группами в кольце.

Целевой рынок: фармацевтическая промышленность, научно-исследовательские лаборатории.

Размер компании	Вид продукта		
	Сульфосодержащие диарилиодониевые соли с электроноакцепторными группами в кольце	Сульфосодержащие диарилиодониевые соли с электронодонорными группами в кольце	4-иодбензолсульфокислота (ИБСК)
Малые			
Средние			
Крупные			



Фармацевтическая промышленность



Научно-исследовательские лаборатории

Рисунок 4.1 – Сегментирование рынка

При анализе рынка было обнаружено, что основными потенциальными потребителями продукции могут являться небольшие научно-исследовательские лаборатории, специализирующиеся на исследованиях в области полимерных материалов, а также фармацевтическая промышленность,

где проводится эксперимент по замене комплексов Hg, Pb и Pd в фармацевтических продуктах.

#### 4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения. Такой анализ необходим для внесения коррективов в научное исследование.

Целесообразно проводить данный анализ с помощью оценочной карты представленной в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерий оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б <sub>ф</sub>	Б <sub>к1</sub>	Б <sub>к2</sub>	К <sub>ф</sub>	К <sub>к1</sub>	К <sub>к2</sub>
1	2	3	4	5	6	7	8
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>							
1. Выход продукта	0,2	4	4	5	0,8	0,8	1
2. Время реакции	0,2	4	3	3	0,8	0,6	0,6
3. Качество продукта	0,1	4	5	5	0,4	0,5	0,5
4. Простота производства	0,1	5	3	4	0,5	0,3	0,4
5. Безопасность технологии	0,1	5	3	3	0,5	0,3	0,3
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>							
1. Конкурентоспособность продукта	0,1	5	5	5	0,5	0,5	0,5
2. Цена	0,2	5	4	4	1	0,8	0,8
<b>Итого</b>	<b>1</b>	<b>32</b>	<b>27</b>	<b>29</b>	<b>4,5</b>	<b>3,8</b>	<b>4,1</b>

Б<sub>ф</sub> – ИБСК;

Б<sub>к1,2</sub> – сульфосодержащие диарилиодониевые соли с электроноакцепторными группами в кольце и сульфосодержащие диарилиодониевые соли с электронодонорными группами в кольце соответственно.

Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю экспертным путем по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путем, в сумме должны составлять 1.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \times B_i$$

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

Конкурентоспособность ( $K_1$ ) заявленной технологии по отношению к первой:

$$K = \frac{K_{\phi}}{K_{k1}} = \frac{4,5}{3,8} = 1,18$$

Конкурентоспособность ( $K_2$ ) заявленной технологии по отношению ко второй:

$$K = \frac{K_{\phi}}{K_{k2}} = \frac{4,5}{4,1} = 1,10$$

Основными конкурентными преимуществами заявленной технологии является конкурентоспособность, простота производства и безопасность.

### 4.1.3 Диаграмма Исикавы

Диаграмма причины-следствия Исикавы (Cause-and-Effect-Diagram) – это графический метод анализа и формирования причинно-следственных связей, инструментальное средство для систематического определения причин проблемы и последующего графического представления.

Область применения диаграммы:

- выявление причин возникновения проблемы;
- анализ и структурирование процессов на предприятии;
- оценка причинно-следственных связей.

Построение диаграммы начинают с формулировки проблемной области/темы, которая является объектом анализа и наносится на центральную горизонтальную стрелку диаграммы.

Затем выявляются факторы/группы факторов, влияющие на объект анализа.

Часто, для выявления таких факторов используется прием 6М:

- персонал (Manpower);
- оборудование (Machine);
- сырье, материалы, комплектующие (Material);
- технология проведения работ (Method);
- средства измерения и методы контроля (Measurement);
- производственная среда (Media).

Выявленные факторы подводят к стрелкам диаграммы первого уровня. Далее к каждой стрелке подводят стрелки второго уровня, к которым, в свою очередь, подводят стрелки третьего уровня и т. д. до тех пор, пока на диаграмму не будут нанесены все стрелки, обозначающие факторы, оказывающие заметное влияние на объект анализа. Каждый фактор более низкого уровня будет являться следствием по отношению к причине более высокого уровня. Диаграмма Исикавы для заявленного процесса показана на рисунке 4.3.



Рисунок 4.2 – Диаграмма Исикавы для заявленной технологии

#### 4.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На какой бы стадии жизненного цикла не находилась научная разработка полезно оценить степень ее готовности к коммерциализации и выяснить уровень собственных знаний для ее проведения (или завершения). Для этого необходимо заполнить специальную форму (таблица 4.2), содержащую показатели о степени проработанности проекта с позиции коммерциализации и компетенциям разработчика научного проекта.

Таблица 4.2 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1	Определен имеющийся научно-технический задел	5	5
2	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	5	4
3	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	4	4
4	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	3
5	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	5	4
6	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	5	4
7	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	5	4
8	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	3	3
9	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	4
10	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	5	4
11	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	4	4
12	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	4	4
13	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	4
14	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	4
15	Проработан механизм реализации научного проекта	4	4
	<b>ИТОГО БАЛЛОВ</b>	65	59

Оценка готовности научного проекта к коммерциализации (или уровень имеющихся знаний у разработчика) определяется по формуле:

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i$$

где  $B_{\text{сум}}$  – суммарное количество баллов по каждому направлению;  $B_i$  – балл по  $i$ -му показателю.

Значение  $B_{\text{сум}}$  позволяет говорить о мере готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации. Исходя из полученных данных, можно сделать вывод, что заявленная технология является перспективной, а уровень знаний у разработчика достаточен для коммерциализации проекта.

#### **4.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования**

Одним из методов коммерциализации данного проекта является торговля патентными лицензиями, позволяющая передать право на производство диарилиодониевых солей на лицензионной основе.

#### **4.2 Инициация проекта**

Суть процесса инициации проекта заключается в принятии решений о запуске и дальнейшем переходе из одной фазы в другую. Инициация проекта ставит своей целью провести анализ осуществимости проекта и, в случае утвердительного ответа, авторизовать проект для исполнения. В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание, а также фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, взаимодействие которых будет влиять на общий результат научного проекта.

##### **4.2.1 Цели и результат проекта**

Под целями и результатами проекта подразумевается информация о заинтересованных сторонах проекта, иерархии целей проекта и критериях достижения целей, представленных в таблицах 4.3 и 4.4 соответственно.

Таблица 4.3 – Заинтересованные стороны проекта

<b>Заинтересованные стороны проекта</b>	<b>Ожидание заинтересованных сторон</b>
Руководитель и исполнитель проекта	Создание патента на основе разработки
Научно-исследовательская лаборатория	Использование запатентованного метода получения диарилиодониевых солей

Таблица 4.4 – Цели и результат проекта

<b>Цели проекта:</b>	Разработка нового, экологического метода получения диарилиодониевых солей
<b>Ожидаемые результаты проекта:</b>	Создание патента на основе разработки
<b>Критерии приемки результата проекта:</b>	Наличие патента на метод диарилиодониевых солей
<b>Требования к результату проекта:</b>	Безопасность технологии
	Экономичное использование исходных соединений
	Простота оформления процесса

#### 4.2.2 Организационная структура проекта

На данном этапе работы решаются следующие вопросы: кто будет входить в рабочую группу данного проекта, определяется роль каждого участника в данном проекте, а также прописываются функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте. Эта информация представлена в таблице 4.5.

Таблица 4.5 – Рабочая группа проекта

<b>№</b>	<b>ФИО, основное место работы, должность</b>	<b>Роль в проекте</b>	<b>Функции</b>	<b>Трудозатраты, час</b>
1	Юсубов М.С., НИ ТПУ, Профессор	Руководитель проекта	Контроль исполнения этапов проекта, консультации по вопросам проекта	3540
2	Кукурина О.С., НИ ТПУ, к. х. н., доцент	Эксперт проекта	Контроль исполнения этапов проекта, консультации по вопросам проекта	3770
3	Сухорукова Е.Г., НИ ТПУ Магистр	Исполнитель проекта	Выполнение проектных работ	3458
4	Постников П.С., НИ ТПУ, доцент	Субподрядчик	Снятие спектров ЯМР	2750
<b>ИТОГО:</b>				<b>13518</b>

### 4.2.3 Ограничения и допущения проекта

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а так же «границы проекта» - параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованных в рамках данного проекта.

Таблица 4.6 – Ограничения проекта

<b>Фактор</b>	<b>Ограничения/ допущения</b>
3.1. Бюджет проекта	
3.1.1. Источник финансирования	НИ ТПУ
3.2. Сроки проекта:	
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	01.09.2015
3.2.2. Дата завершения проекта	30.05.2017
3.3. Прочие ограничения и допущения*	Ограничения по времени использования научного оборудования, времени работы участников проекта

### 4.3 Планирование управления научно-техническим проектом

Группа процессов планирования состоит из процессов, осуществляемых для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательности действий, требуемых для достижения данных целей.

#### 4.3.1 Контрольные события проекта

Календарный план-график – это графическое изображение взаимосвязи событий и работ, имеющих место в процессе проведения исследований (Таблица 4.7).

Календарный план-график составляется с целью правильной организации и контроля выполнения работы, а также для рационального использования времени, отводимого на выполнение магистерской диссертации работы.

Таблица 4.7 – Контрольные события проекта

№	Контрольные события	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	Разработка технического задания	01.09.2014	Техническое задание
2	Выбор направления исследований	01.12.2014	Литературный обзор
3	Теоретические и экспериментальные исследования	01.02.2016	Результаты исследования
4	Обобщение и оценка результатов	01.04.2016	Написание исследовательской части магистерской диссертации
5	Разработка технической документации и проектирование	01.05.2016	Магистерская диссертация
6	Оформление магистерской диссертации	13.06.2016	Диплом магистра

### 4.3.2 План проекта

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный и сетевой графики проекта.

Таблица 4.8 – Календарный план проекта

Код работы (из ИСР)	Название	Количество дней	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Разработка технического задания	30	01.09.2014	01.10.2014	Юсубов М.С.
2	Выбор направления исследований	20	10.09.2014	30.09.2014	Юсубов М.С., Сухорукова Е.Г.
3	Теоретические и экспериментальные исследования	526	01.10.2014	30.03.2016	Юсубов М.С., Кукурина О.С., Сухорукова Е.Г., Постников П.С.
4	Обобщение и оценка результатов	40	01.03.2016	10.04.2016	Юсубов М.С., Сухорукова Е.Г.
5	Разработка технической документации и проектирование	50	01.04.2015	20.05.2015	Юсубов М.С., Сухорукова Е.Г.
6	Оформление магистерской диссертации	40	01.05.2015	10.06.2015	Юсубов М.С., Сухорукова Е.Г.
Итого		706	01.09.2013	19.06.2015	

Диаграмма Ганта – это тип столбчатых диаграмм (гистограмм), который используется для иллюстрации календарного плана проекта (рисунок 4.3), на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

Код работы	Вид работы	Исполнители	T <sub>к</sub>	Продолжительность выполнения работ																							
				Сен. 15			Окт. 15			...			Фев. 17			Мар 17			Апр. 17			Май 17			Июн 17		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3			
1	Разработка технического задания	Руководитель1	15	[Cross-hatch]																							
2	Выбор направления исследований	Руководитель1, исполнитель	15		[Diagonal]																						
3	Теоретические и экспериментальные исследования	Руководитель1, Руководитель2, исполнитель	516				[Cross-hatch]																				
							[Grid]																				
							[Diagonal]																				
4	Обобщение и оценка результатов	Руководитель1, исполнитель	31										[Cross-hatch]														
5	Разработка технической документации и проектирование	Руководитель1, исполнитель	30													[Cross-hatch]											
6	Оформление магистерской диссертации	Руководитель1, исполнитель	50																[Cross-hatch]								

 Руководитель1 (Юсубов М.С.)

 Исполнитель (Сухорукова Е.Г.)

 Руководитель2 (Кукурина О.С.)

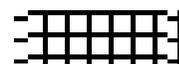
 Субподрядчик (Плотников П.С.)

Рисунок 4.3 - Календарный план-график проведения НИОКР по теме

#### 4.4 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения.

##### 4.4.1 Материальные затраты

В таблице 4.9 представлены расходы на приобретение реагентов с учетом транспортных расходов.

Таблица 4.9 – Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Марка, размер	Количество	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
1	2	3	4	5
Иодбензол	х.ч.	1	1780	1780
Серная кислота	х.ч.	2	157	314
Охоне <sup>®</sup>	х.ч.	1	2448	2448
Бензол	х.ч.	1	505	505
Хлорбензол	ч.	1	73	73
Бромбензол	х.ч.	1	1380	1380
Толуол	х.ч.	1	53	53
m-CPBA	ч.	1	2902	2902
Хлористый метилен	х.ч.	1	60	60
Трифторэтанол	ч.	1	2058,2	2058,2
Мезителен	х.ч.	1	8319,6	8319,6
Тетрафторэтилен	х.ч.	1	8201,3	8201,3
Ацетонитрил	ч.	1	5817,5	5817,5
Хлороформ	х.ч.	2	6908,03	13816,06
Гексан	х.ч.	5	78	390
Стакан	шт	4	49,5	198
Шпатель	шт	1	84	84
Пластинка для тонкослойной хроматографии	шт	5	2565	12825
Штатив	шт	2	2205	4410
Колба круглодонная	шт	10	111	1110
Халат	шт	1	550	550
Перчатки	шт	20	9,8	196
Пробки	шт	10	62,5	620,5
Всего за материалы			68111,16	
Затраты с учетом транспортно-заготовительных расходов (3-5%)			<b>71516,72</b>	

### 4.3.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ

В данную статью включаются все затраты, связанные с приобретением специального оборудования. Определение стоимости спецоборудования производится по действующим прейскурантам. Стоимость оборудования, имеющегося в научно-технической организации, учитывается в калькуляции в виде амортизационных отчислений. Все расчеты по оборудованию, имеющегося в организации, но используемого для каждого исполнения конкретной темы представлены в таблице 4.10

Сумма амортизационных отчислений определяются по формуле:

$$E_{ам} = \frac{\sum K_{обі} \times H_{амі} \times T_{обі}}{365 \times 100}$$

где  $K_{обі}$  – стоимость единицы прибора или оборудования, руб.;  $H_{амі}$  – норма амортизации прибора или оборудования, %;  $T_{обі}$  – время использования оборудования, дни.

Таблица 4.10 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

№	Наименование оборудования	$K_{обі}$ , руб.	$H_{амі}$ , %	$T_{обі}$ , дни	$E_{ам}$ , руб.
1	УФ лампа EN-280L	43248	15	30	533,19
2	Испаритель ротационный RV-06ML1-ВІКА	259415	15	220	23453,96
3	Электроплитка с магнитной мешалкой HP-20D-Unit	36458	15	247	3700,74
	<b>Итого</b>				<b>27687,89</b>

### 4.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Величина расходов по заработной плате определяется, исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок.

Таблица 4.11 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель 1	Исполнитель	Руководитель 2	Субподрядчик
Календарное число дней	365	365	365	365
Количество нерабочих дней				
- выходные дни	58	58	58	58
- праздничные дни	14	14	14	14
Потери рабочего времени				
- отпуск	48	48	48	48
- невыходы по болезни	0	0	0	0
<b>Действительный годовой фонд рабочего времени</b>	<b>245</b>	<b>245</b>	<b>245</b>	<b>245</b>

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

$$C_{ан} = Z_{осн} + Z_{доп},$$

где  $Z_{осн}$  – основная заработная плата;  $Z_{доп}$  – дополнительная заработная плата.

Основная заработная плата ( $Z_{осн}$ ) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \times T_{раб},$$

где  $Z_{осн}$  – основная заработная плата одного работника;  $T_{раб}$  – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;  $Z_{дн}$  – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \times M}{F_d},$$

где  $Z_m$  – месячный должностной оклад работника, руб.;  $M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

- при отпуске в 24 раб. дня  $M = 11,2$  месяца, 5-дневная неделя;
- при отпуске в 48 раб. дней  $M = 10,4$  месяца, 6-дневная неделя;

$F_d$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (табл. 4.12).

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_b \times (1 + k_{np} + k_d) \times k_p,$$

где  $Z_b$  – базовый оклад, руб.;  $k_{np}$  – премиальный коэффициент, (определяется Положением об оплате труда);  $k_d$  – коэффициент доплат и надбавок (в НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: определяется Положением об оплате труда);  $k_p$  – районный коэффициент, равный 1,3 (для г. Томска).

Таблица 4.12 – Заработная плата исполнителей НТИ

Исполнитель	Категория	$Z_b$ , руб.	$k_{np}$	$k_d$	$k_p$	$Z_m$ , руб	$Z_{дн}$ , руб	$T_{р, раб. дн.}$	$Z_{осн}$ , руб.
Руководитель 1 (Юсубов М.С)	Профессор	33162,87	0,3	0,2	1,3	64667,6	2745,07	30	82352,1
Руководитель 2 (Кукурина О.С.)	Доцент	23264,86	0,3	0,2	1,3	45366,48	1925,76	30	57772,8
Субподрядчик (Постников П.С.)	Доцент	20099,86	0,3	0,2	1,3	39194,73	1663,78	30	49913,4
<b>Итого</b>									<b>190038,3</b>

#### 4.3.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы учитывают величину предусмотренных Трудовым кодексом РФ доплат за отклонение от нормальных условий труда, а также выплат, связанных с обеспечением гарантий и компенсаций.

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$Z_{доп} = k_{доп} \times Z_{осн}$$

где  $k_{доп}$  – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0,12).

Таблица 4.13 – Дополнительная заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель 1 (Юсубов М.С)	Руководитель 2 (Кукурина О.С.)	Субподрядчик (Постников П.С.)
Основная зарплата	82352,1	57772,8	49913,4
Дополнительная зарплата	9882,25	6932,74	5989,61
По статье С <sub>ап</sub>	92234,35	64705,54	55903,01
<b>Итого</b>	<b>212842,9</b>		

#### 4.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды

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

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{внеб} = k_{внеб} \times (Z_{осн} + Z_{доп}),$$

где  $k_{внеб}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.;  $k_{внеб} = 0,3$ ).

Таблица 4.14 – Отчисления во внебюджетные фонды

Налогоплательщик	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб	Отчисления во внебюджетные фонды, руб.
Руководитель 1 (Юсубов М.С.)	82352,1	9882,25	27670,31
Руководитель 2 (Кукурина О.С.)	57772,8	6932,74	19411,66
Субподрядчик (Постников П.С.)	49913,4	5989,61	16770,90
<b>ИТОГО</b>	<b>63852,87</b>		

### 4.3.6 Расчет затрат на электроэнергию

Расчет затрат на электроэнергию ведет по формуле:

$$W = N \times \tau \times 3,43$$

где  $W$  – затраты на электроэнергию, руб;  $N$  – потребляемая мощность электроприборов, кВт;  $\tau$  – время работы, ч; 3,43 – тариф на электроэнергию, руб.

Таблица 4.15 – Затраты на электроэнергию общие за 2 года

Название прибора	Потребляемая мощность, кВт	Время работы, ч	Стоимость электроэнергии, руб.
УФ лампа EN-280L (8 Вт)	0,008	220	12,32
Электроплитка с магнитной мешалкой HP-20D-Unit	0,6	400	823,2
Электронные весы E-200	0,01	200	6,86
Аквадистилятор ДЭ-4-2М	3	180	1852,2
Испаритель ротационный типа RV-06ML1-ВІКА	1,05	220	792,33
<b>Итого</b>			<b>4241,51</b>

### 4.3.7 Контрагентные расходы

Контрагентные расходы включают затраты, связанные с выполнением каких-либо работ по теме сторонними организациями (контрагентами, субподрядчиками). В данной работе отсутствуют контрагентные расходы.

### 4.3.8 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

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 4.16 – Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание
1. Материальные затраты НТИ	71516,72	Таблица 4.9
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	50868,15	Таблица 4.10
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	190038,3	Таблица 4.12
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	212842,9	Таблица 4.13
5. Отчисления во внебюджетные фонды	63852,87	Таблица 4.14
6. Затраты на электроэнергию общие за 2 года	4241,51	Таблица 4.15
7. Контрагентские расходы	0	
8. Накладные расходы	94937,67	16 % от суммы ст. 1-7
9. Бюджет затрат НТИ	688298,1	Сумма ст. 1-8

#### **4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования**

Эффективность научного ресурсосберегающего проекта включает в себя социальную эффективность, экономическую и бюджетную эффективность. Показатели общественной эффективности учитывают социально-экономические последствия осуществления инвестиционного проекта как для общества в целом, в том числе непосредственные результаты и затраты проекта, так и затраты и результаты в смежных секторах экономики, экологические, социальные и иные внеэкономические эффекты.

##### **4.4.1 Оценка сравнительной эффективности исследования**

Для оценки эффективности представленного проекта воспользуемся сравнительной оценкой характеристик текущего проекта с его аналогами (таблица 4.18).

Таблица 4.17 – Сравнительная оценка характеристик проектов

Критерии \ ПО	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Способствует росту производительности пользователя	0,1	5	4	4
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	5	5	4
3. Помехоустойчивость	0,15	5	3	4
4. Энергосбережение	0,20	5	5	4
5. Надежность	0,25	4	5	5
6. Материалоемкость	0,15	5	5	4
<b>ИТОГО</b>	<b>1</b>	<b>4,75</b>	<b>4,6</b>	<b>4,25</b>

- **Аналог 1** – сульфосодержащие диарилиодониевые соли с электроноакцепторными группами в кольце;
- **Аналог 2** – сульфосодержащие диарилиодониевые соли с электронодонорными группами в кольце.

Вывод: был проведен предпроектный анализ, описана инициализация проекта, спланировано управление НТП, разработка является конкурентоспособной, обладает средней перспективностью, а также определен бюджет НТИ, который составил 69 тыс. руб.

## СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ

1. Сухорукова Е.Г., Щербакова Н.А. Синтез новых диарилиодониевых солей – производных 4-иодбензолсульфокислоты. // Химия и химическая технология в XXI веке: Материалы XVII Международной научно-практической конференции имени профессора Л.П. Кулева студентов и молодых ученых. - Томск: Изд-во ТПУ. – 2017. – с. 169-170.
2. Щербакова Н.А., Сухорукова Е.Г. Иммобилизация иодбензолсульфокислот на полимерную матрицу. // Химия и химическая технология в XXI веке: Материалы XVII Международной научно-практической конференции имени профессора Л.П. Кулева студентов и молодых ученых. - Томск: Изд-во ТПУ. – 2017. – с. 179.