

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

---

Институт природных ресурсов

Направление подготовки: химическая технология

Кафедра технологии органических веществ и полимерных материалов

**МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ**

Тема работы
<b>Синтез иодониевых солей – производных фенола</b>

УДК: 547.539.4.05

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5В	Ухин Антон Олегович		

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., доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Чулков Н.А.	к.т.н., доцент		

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

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

Томск – 2017 г.

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Иметь <i>глубокие</i> естественно-научные, математические, инженерные <i>знания и умения</i> для создания <i>новых</i> материалов
P2	Применять <i>глубокие знания</i> в области современных технологий химического производства для решения <i>междисциплинарных</i> инженерных задач
P3	Ставить и решать <i>инновационные</i> задачи <i>инженерного анализа</i> , связанные с созданием материалов и изделий, с использованием системного анализа и моделирования объектов и процессов химической технологии
P4	Разрабатывать химико-технологические процессы, <i>проектировать</i> и использовать <i>новое</i> оборудование для создания материалов, конкурентоспособных на <i>мировом</i> рынке
P5	Проводить теоретические и экспериментальные <i>исследования</i> в области создания <i>новых</i> материалов, современных химических технологий
P6	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>	
P7	Использовать <i>глубокие знания проектного менеджмента</i> для ведения <i>инновационной</i> инженерной деятельности с учетом юридических аспектов защиты интеллектуальной собственности
P8	<i>Активно</i> владеть <i>иностранным языком</i> на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной инженерной деятельности
P9	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
P10	Демонстрировать <i>глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов</i> инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах <i>устойчивого развития</i>
P11	<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 образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
 ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Институт природных ресурсов

Направление подготовки: химическая технология

Кафедра технологии органических веществ и полимерных материалов

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. кафедрой

\_\_\_\_\_ Юсубов М.С.

(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
2ДМ5В	Ухину Антону Олеговичу

Тема работы:

**Синтез диарилиодониевых солей в соответствии с принципами «зеленой химии»**

Утверждена приказом директора (дата, номер)	От
---	----

Срок сдачи студентом 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, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объект исследования – иодированные фенолы и диарилиодониевые тозилаты на их основе.                  Сырье – метоксифенол, N-иодсукцимидин, N-бромсукцимидин, серная кислота, иод, триэтиламин, дихлорметан, четыреххлористый углерод, этанол, тозилхлорид..</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,</i></p>	<p>Аналитический обзор литературы                  Объекты и методы исследования                  Результаты и обсуждение                  Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение                  Социальная ответственность                  Выводы по работе</p>

подлежащих разработке; заключение по работе).	
<b>Перечень графического материала</b> (с точным указанием обязательных чертежей)	Презентация
<b>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</b> (с указанием разделов)	
<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 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
доцент	Кукурина О.С.	к.х.н.		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5В	Ухин Антон Олегович		

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА

### «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
2ДМ5В	Ухину Антону Олеговичу

<b>Институт</b>	<b>ИПР</b>	<b>Кафедра</b>	<b>ТОВ и ПМ</b>
Уровень образования	Магистрант	Направление/ специальность	Химическая технология

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

<i>1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материальных, технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	- Цена реализации; - Капитальные вложения.
<i>2. Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	- Эксплуатационные затраты.
<i>3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	Налоговый кодекс РФ ФЗ-213 от 24.07.2009 в редакции от 09.03.2016г. №55-ФЗ

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

<i>1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	Использование системы показателей, отражающих деятельность предприятия применительно к условиям рыночной экономики, с включением в экономические расчеты платежей и налогов.
<i>2. Разработка устава научно-технического проекта</i>	Методическая рекомендация по оценке эффективности инвестиционных проектов.
<i>3. Планирование процесса управления НИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	- План проекта - Бюджет научного исследования - Организационная структура проекта
<i>4. Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	- Динамические методы экономической оценки инвестиций - Чистая текущая стоимость - Дисконтированный срок окупаемости - Внутренняя ставка доходности - Индекс доходности (рентабельности) инвестиций - Оценка сравнительной эффективности исследования

**Дата выдачи задания для раздела по линейному графику**

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент кафедры менеджмента	Креницына З.В..	к.т.н., доцент		

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5В	Ухин Антон Олегович		

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
2ДМ5В	Ухину Антону Олеговичу.

<b>Институт</b>	<b>ИПР</b>	<b>Кафедра</b>	<b>ХТТ и ХК</b>
<b>Уровень образования</b>	Магистратура	<b>Направление/специальность</b>	Химическая технология основных продуктов органического и нефтехимического синтеза.

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

<p>1. <i>Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения)</i></li> <li>– <i>опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы)</i></li> <li>– <i>негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу)</i></li> <li>– <i>чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера)</i></li> </ul>	<p>Рабочая зона - химическая лаборатория органического синтеза, аудитория оборудованная компьютерами. В рабочей зоне, т.е. в химической лаборатории могут наблюдаться следующие вредные факторы: опасные химические реактивы, повышенный уровень шума, недостаточная освещенность лаборатории и ее отдельных участков.</p> <p>Опасные факторы: возникновение взрывов и пожаров в результате работы с легковоспламеняющимися жидкостями, повышенная температура рабочей поверхности оборудования, поражение электрическим током.</p> <p>Выбросы вредных веществ в атмосферу: серосодержащие соединения, предельные и непредельные углеводороды и т.д.</p>
<p>2. <i>Перечень законодательных и нормативных документов по теме</i></p>	<p>Федеральный закон № 426-ФЗ от 28 декабря 2013 года «О специальной оценке условий труда».</p> <p>Федеральный закон №184-ФЗ «О техническом регулировании» от 27 декабря 2002 года.</p> <p>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. <i>Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– <i>физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой;</i></li> <li>– <i>действие фактора на организм человека;</i></li> <li>– <i>приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ);</i></li> <li>– <i>предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства)</i></li> </ul>	<p>Вредные вещества, необходимые для работы хранятся в шкафах оборудованных вентиляцией. При работе со всеми перечисленными веществами используются следующие средства индивидуальной защиты: защитные очки, резиновые перчатки и лабораторный халат. Необходимо использовать звукоизолирующие ограждения, акустические экраны, звукопоглощающую облицовку поверхностей оборудования резиной, войлоком и т.д. Применение средств индивидуальной защиты: противошумные наушники, шлемы, вкладыши типа «беруши». Для решения проблемы с микроклиматом необходимо утепление оконных проемов, обеспечить лабораторию масляными обогревателями.</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> <li>– электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты);</li> <li>– пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения)</li> </ul>	<p>К опасным факторам относят оборудование с повышенной или пониженной температурой поверхности, токоведущие части электрооборудования, повышенное значение напряжения в электрической цепи, молниезащита (необходимо заземление), возникновение пожара.</p> <p>Используемые средства защиты: перчатки, ухватыв, спецодежда.</p>
<p>3. Охрана окружающей среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– защита селитебной зоны</li> <li>– анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы);</li> <li>– анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы);</li> <li>– анализ воздействия объекта на литосферу (отходы);</li> <li>– разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.</li> </ul>	<p>Селитебная зона должна располагаться с наветренной стороны выше по течению реки. На окружающую среду воздействуют вредные вещества: ароматические соединения, галогены.</p> <p>Химическое загрязнение водотоков в результате отмывания химических отходов в канализационную сеть.</p> <p>Необходимо осуществлять раздельный сбор и хранение отходов, подвергать их переработке, утилизации или захоронению.</p>
<p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– перечень возможных ЧС на объекте;</li> <li>– выбор наиболее типичной ЧС;</li> <li>– разработка превентивных мер по предупреждению ЧС;</li> <li>– разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС;</li> <li>– разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий</li> </ul>	<p>Возможные ЧС: пожар, взрыв, разрушение зданий в результате разрядов атмосферного электричества, ураган, землетрясение.</p> <p>Наиболее актуальная ЧС – возникновение пожара. Для его ликвидации необходимо использовать огнетушитель, песок, асбестовое одеяло.</p>
<p>5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны</li> </ul>	<p>Каждому работающему с химическими веществами выдаются средства индивидуальной защиты. Проводятся инструктажи, обучения.</p> <p>Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны: технический перерыв, полная изоляция от производственных источников шума и вибрации.</p>

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

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Раденков Тимофей Александрович			

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5В	Ухин Антон Олегович		



## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 110 с., 8 рис., 19 схемы, 28 табл., 44 источника, 2 прил.

Ключевые слова: диарилиодониевые соли, фенол и его производные, тироксин, «зеленая химия», электрофильное ароматическое замещение.

Объектами исследования являются иодированные фенолы и диарилиодониевые тозилаты.

Цель работы – разработка нового метода получения соединений поливалентного иода – диарилиодониевых солей на основе фенола и его производных, являющимися высокоактивными и легкоокисляемыми соединениями.

В ходе проведенного исследования были получены тозилаты галогензамещенных диарилиодониевых солей.

Область применения: органический синтез и фармацевтическая промышленность.

Экономическая эффективность/значимость работы определяется следующими факторами:

- 1) в разработанной методике используются коммерчески доступные и сравнительно дешевые субстраты;
- 2) отсутствие данного продукта 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 и работ при выполнении которых проводятся обязательные предварительные и 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 и.о. МЗ РК Рег № 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

Nu – нуклеофил;

ТФЭ – 2,2,2-трифторэтанол;

ДХМ – дихлорметан, хлористый метилен;

TsO – п-толуолсульфонат ион, тозилат;

TMS – триметилсилильная группа;

Et<sub>3</sub>N – триэтиламин;

NIS – N-иодсукцимидин;

NBS – N-бромсукцимидин;

TsCl – пара-Толуолсульфонилхлорид;

Et<sub>2</sub>O – диметиловый эфир;

ТСХ – тонкослойная хроматография;

ГХМС – газовый хроматограф с масс спектрометром;

ПЭТ – позитронная эмиссионная томография;



<b>4.8 Бюджет научного исследования .....</b>	<b>54</b>
<b>4.9 Организационная структура проекта.....</b>	<b>58</b>
<b>4.10 Матрица ответственности.....</b>	<b>59</b>
<b>4.11 План управлениями коммуникациями проекта .....</b>	<b>60</b>
<b>4.12 Реестр рисков проекта .....</b>	<b>61</b>
<b>4.13 Оценка сравнительной эффективности исследования.....</b>	<b>62</b>

## **ВВЕДЕНИЕ**

### **Актуальность проблемы**

Соединения поливалентного иода (СПИ) широко используются в органическом синтезе в качестве эффективных реагентов, химические свойства которых аналогичны свойствам переходных металлов, таких как ртуть (II), свинец (IV), таллий (III), осмий (VIII) и хром (VI), но без токсичных и экологических последствий. СПИ привлекают внимание все большего числа исследователей; доказательством этого может служить тот факт, что на период 2000-2016 гг. Опубликовано не менее 79 тысяч статей, 22 тысячи патентов, 6 тысяч обзоров, комбинированные темы СПИ [1].

Соли диарилиодиона, являющиеся популярным и хорошо изученным классом СПИ, могут быть использованы в качестве эффективных фотоинициаторов радикальной полимеризации для виниловых, эпоксидных, 1,3,5-триоксанных, фурановых и других полимеров. Кроме того, соли диарилиодиона используются в качестве реагентов для создания радиофармацевтических препаратов, содержащих фтор и иод (РФП), с ароматическими и гетероциклическими фрагментами. Кроме того, уникальность СПИ заключается в том, что они участвуют в процессах окисления с образованием связей C-C и C-X, где X = O, N, F, Cl, Br, I, S, Se и т. Д. Поэтому они могут справедливо считаться почти универсальными «инструментами» для получения широкого спектра веществ, важных для практического использования[1].

### **Цель работы**

Цель работы – Исследование иодирования высокоактивных легко окисляемых производных фенола и разработка методики синтеза диарилиодониевых солей на их основе.

На основании поставленной цели следует решить следующие задачи:

1) Разработать высокоэффективную методику иодирования фенола и его производных, путем подбора иодирующего реагента и условий проведения реакций.

- 2) Подобрать методику получения диарилиодониевых солей на их основе.
- 3) Получить диарилиодониевые соли с различными противоионами.

### **Научная новизна**

Впервые был разработан способ получения замещенных диарилиодониевых солей с использованием производных фенола, являющимися высокоактивными субстратами. Определены способы иодирования фенола и его производных.

### **Практическая значимость работы**

Соли диарилиодиона могут быть использованы в качестве эффективных фотоинициаторов радикальной полимеризации для виниловых, эпоксидных, 1,3,5-триоксановых, фурановых и других полимеров. В большинстве традиционных систем фотоинициации используется освещение в ультрафиолетовом диапазоне. Когда используются соли диарилиодиона, инициирование возможно под видимым светом и в водной среде, что делает технологию более экологически чистой для использования в синтезе биологических материалов. Полученные соединения также являются превосходными арилирующими реагентами для ряда нуклеофильных реагентов; Несимметричные соли обеспечивают селективность в переносе одного из арильных компонентов во время реакции с нуклеофилами.

Кроме того, исследования по синтезу солей диарилдиония важны для позитронно-эмиссионной томографии (ПЭТ), радионуклидного томографического метода для исследования внутренних органов. На сегодняшний день ПЭТ преимущественно использует позитрон-излучающие изотопы [ $^{18}\text{F}$ ]. В современных исследованиях основное внимание уделяется разработке методов введения [ $^{18}\text{F}$ ] -ионов в арилзамещенную группу солей диарилдиония.



# 1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

## 1.1 Соединения поливалентного иода

Иод является самым тяжелым нерадиоактивным элементом в периодической таблице, он классифицируется как неметалл и имеет самую высокую поляризуемость среди галогенов. Поливалентные иодные органические соединения относятся к двум общим структурным типам: (1) соединения иода (III) 1.1.1 и 1.1.2, также называемые  $I_3$ -иоданами в соответствии с рекомендациями IUPAC, и соединения иода (V) 3 или  $I_5$ -иоданы (Рис. 1.1). Атом иода в 3-иоданах 1.1.1 имеет всего 10 электронов и общую геометрию искаженной тригональной бипирамиды с двумя гетероатомными лигандами L, занимающими осевые положения, обладающие электроотрицательной арильной группой и имеющие две электронные пары, находящиеся в экваториальных положениях. Соли иодония 1.1.2 с учетом близкородственной анионной части молекулы имеют сходную псевдогипогональную бипирамидальную геометрию и обычно классифицируются как поливалентные  $I_3$ -иоданы с двумя углеродными лигандами ( $R_2IX$ , 2). В поливалентной модели связывания  $RIX_2$  используется негибридизованная 5p-орбиталь иода в линейной связи X-I-X. Такая линейная трехцентровая четырехэлектронная (3с-4е) связь сильно поляризована и обладает более длинной и слабой по сравнению с регулярной ковалентной связью. Эта связь называется «поливалентной», и наличие этой связи в  $I_3$ -иоданах обуславливает их высокую электрофильную реакционную способность. [1].



Рис. 1.1. Общие классы соединений поливалентного иода.

Данные рентгеноструктурного анализа подавляющего большинства солей иодония  $R_2IX$  1.1.2 показывают, что они имеют структуру, подобную  $I_3$ -иоданам 1.1.1. Их структура имеет тригональную бипирамидальную геометрию, и экспериментально определенный угол связывания R-I-R близкий к  $90^\circ$ . Рентгеноструктурные данные также показывают наличие существенного вторичного связывания между атомом иода и анионом X со средними расстояниями между связями в диапазоне от 2,3 до 2,7 Å.

Соли диарилиодония были обнаружены более ста лет назад и являются одними из самых изученных среди солей иодония. С 80-х годов основная исследовательская деятельность была сосредоточена на производных арилиодония,  $Ar(R) IX$ , содержащих алкинил-, алкенил- или фторалкильные группы в качестве лиганда R. Эти производные нашли свое применение в качестве превосходных реагентов для электрофильного переноса лиганда R в богатые электронами органические соединения. Высокая реакционная способность солей арилиодония,  $Ar(R) IX$ , в этих реакциях объясняется «способностью поликлеточной группы» группы  $ArI$ . Например, способность уходящей группы  $PhI$  примерно в 106 раз больше, чем трифлата.

Стабильные соли иода нашли свое многочисленное практическое применение, например в катионной фотоиницирующей химии полимеров и в качестве биологически активных соединений. Изучение активности нескольких солей иодония в отношении оральных и стоматологических анаэробных бактерий показало, что их активность сравнима с активностью хлоргексидина и эти соединения могут быть пригодны для введения в пероральную жидкость для полоскания рта.

СПИ (III) часто подразделяются на типы в зависимости от лиганда у атома иода.

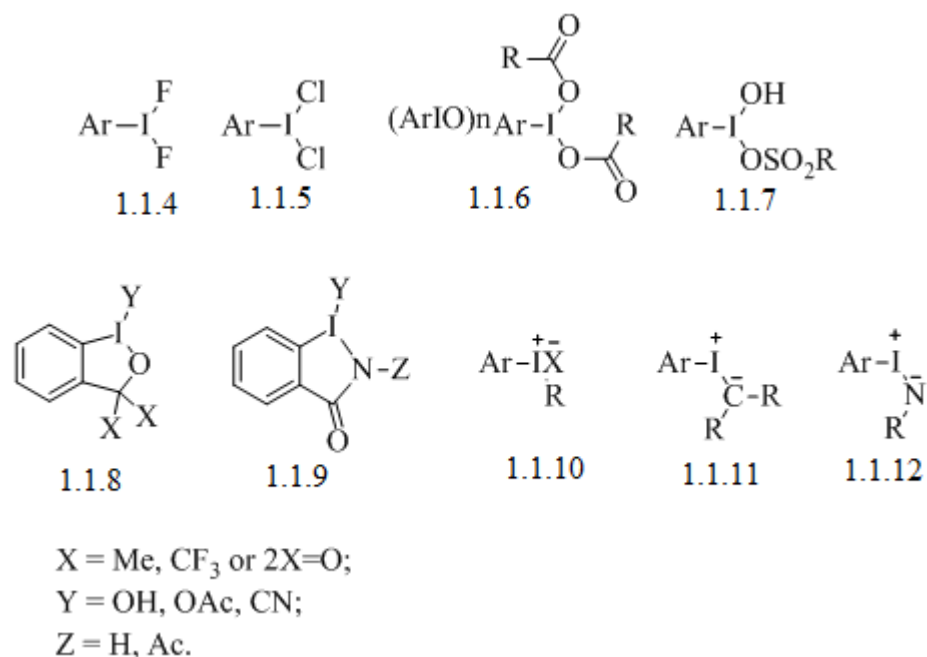


Рисунок 1.2 – Основные классы органических соединений иода (III)

В органическом синтезе использовались следующие реагенты поливалентного иода (III): (дифториодо) арена 1.1.4, (дихлориодо) арен, 1.1.5, иодосиларены 1.1.6, [бис (ацилокси) иод] арены 1.1.7, арилидидан (III). Органосульфонаты 1.1.8, пятичленные гетероциклы иода (бендиооксолоки 1.1.9 и бензодиазолы 1.1.10), соли иодония 1.1.11, производные иодонов 1.1.12 и иод-имиды 1.1.12 (рисунок 1.2) [2].

СПИ (V) широко используется в качестве эффективного окислительного реагента. Особенно важными в органическом синтезе являются нециклические иодиларены 1.1.13, различные производные пятичленных гетероциклических бензодиоксолов 1.1.14-1.1.15, псевдоциклические иодоларены 1.1.16-1.1.18 и циклические или псевдоциклические производные 2-иодбензолсульфокислоты 1.1.19 - 1.1.21 (рис. 1.3) [2].

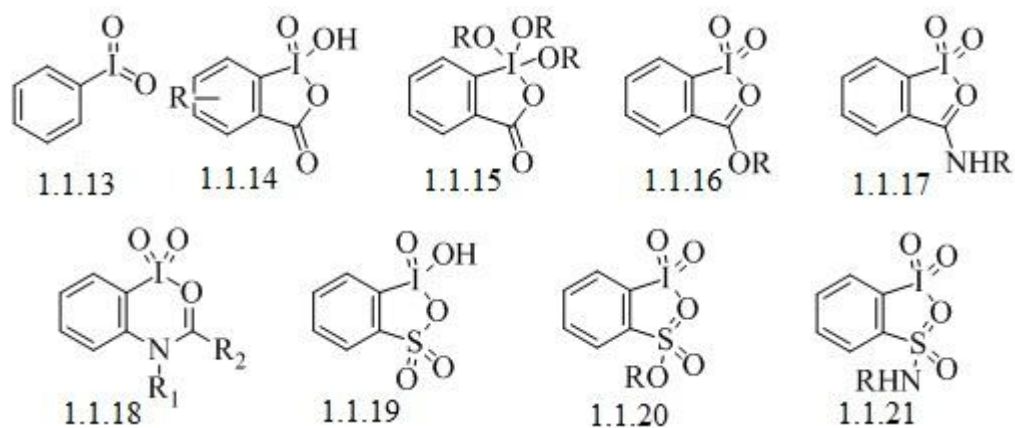


Рисунок 1.3 – Основные классы органических соединений иода (V)

На сегодняшний день SPI нашли широкое применение в органическом синтезе для [3]:

- мягкое избирательное окисление спиртов, фенолов;
- селективное фторирование органических соединений;
- энантиоселективного азиридирования;
- синтез  $\alpha$ ,  $\beta$  - ненасыщенных соединений;
- радикальная циклизация;
- реакции комбинации енолятов с образованием 1,4-дикарбонильных соединений.

## 1.2 Диарилиодониевые соли

### 1.2.1 Структура и реакционная способность

Соли диарилдиония представляют собой стабильные соединения, известные с 1894 года, когда Хартманн и Майер синтезировали первые соли диарилиодония при воздействии сильных минеральных кислот на арилиодокарбоксилаты (Схема 1.1) [4]:



В целом, структура диарилиодоневых солей может быть представлена двумя арильными кольцами, связанными электронно-положительным иодным атомом с противоионом (рис. 1.4):

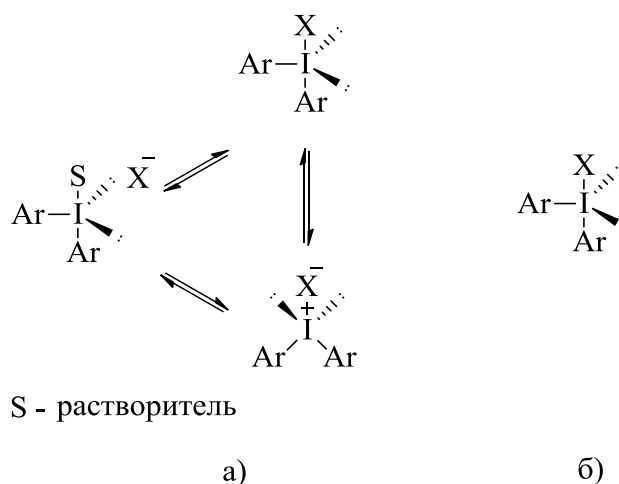


Рисунок 1.4 – Структура диарилиодониевых солей в растворе (а) и твёрдом состоянии (б)

Изучение структуры этого класса СПИ показало, что для твердого состояния угол между связями  $Ar^1-I-Ar^2$  составляет приблизительно  $90^\circ$ , а между атомом иода и анионом существует двойная связь [5]. Однако отсутствие понимания о поливалентной структуре в растворах делает описание структуры несимметричных солей диарилдиония ( $Ar^1 \neq Ar^2$ ) проблематичной T-образной тригональной бипирамидой. Главная трудность состоит в том, чтобы выяснить, какая из арильных групп расположена в экваториальном положении, а какая - в апикальной области.

Анион в составе солей влияет на их растворимость и реакционную способность. Было обнаружено, что соли диарилдиония с атомами галогена чаще всего имеют умеренную растворимость, тогда как трифлаты, тозилаты и тетрафторбораты имеют лучшую растворимость. Соли, чьи анионы обладают более сильной координирующей способностью, менее растворимы в органических растворителях, тогда как соли с анионами обладающими меньшей координирующей способностью имеют тенденцию к увеличению растворимости. Поэтому при синтезе желательно использовать слабо

координирующие анионы, такие как трифлаты, тозилаты, тетрафторбораты или гексафторфосфаты вместо галогенов. Галоген-анионы также проблематичны из-за их сильной нуклеофильной природы [5].

Атом иода в соединениях иода (III) является электрофильным из-за наличия узла на несвязывающихся орбиталях поливалентной связи (схема 1.1). Таким образом, они реагируют с различными нуклеофилами для образования внутренних связей Nu-I и высвобождения лиганда (схема 1.2):

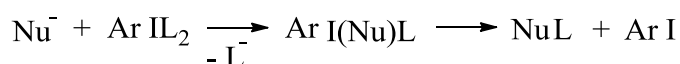


Схема 1.2

Механизм второй стадии процесса зависит от природы нуклеофила, лиганда и условий реакции [4].

Предполагается, что соли диарилиодония подвергаются реакции путем восстановительной элиминации, перенося один из арильных фрагментов на нуклеофил. В реакциях, катализируемых металлами, соли диарилиодония ведут себя как субстраты, которые более эффективны, чем арилиодиды, перенося арильный фрагмент и лиганд в центр металла при окислительном присоединении (схема 1.3). В будущем арилметановый комплекс реагирует с образованием продуктов перекрестной связи:

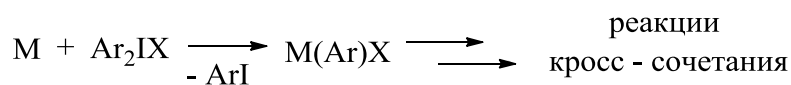


Схема 1.3

### 1.2.2 Методы получения диарилиодониевых солей

Наиболее старые способы получения солей диарилиодония основаны на взаимодействии аренов с иодом и иодатом калия в присутствии концентрированной серной кислоты. Тетрафторбораты диарилиодония легко получают реакцией обмена бор-иод (III) ( диацетоксиодо) арены с тетраарилборатами или арилбороновой кислотами, с последующей

обработкой насыщенным раствором тетрафторбората натрия (Схема 1.4). Недавняя модификация этой процедуры включает использование арилтрифторборатов,  $\text{ArBF}_3^-\text{K}^+$ , вместо тетраарилборатов в мягких условиях. Аналогичным образом фторорганоиодония тетрафторбораты  $(\text{C}_6\text{F}_5)_2\text{I}^+\text{BF}_4^-$ ,  $(4\text{-C}_5\text{F}_4\text{N})_2\text{I}^+\text{BF}_4^-$  и  $[\text{C}_6\text{F}_5(4\text{-C}_5\text{F}_4\text{N})\text{I}^+\text{BF}_4^-]$  могут быть получены путем взаимодействия подходящих (дифториодо)аренов с фторированными органоидифторборанами,  $\text{ArfBF}_2$ , в дихлорметане при 0-20 °С. [9]

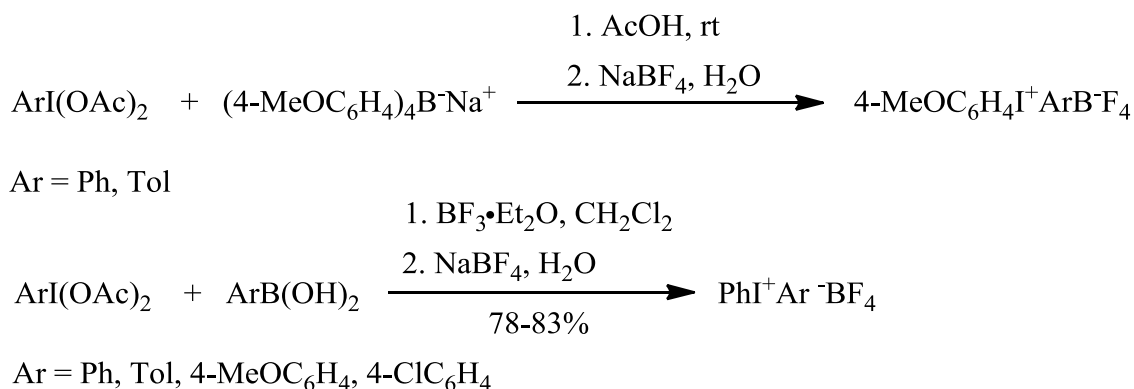


Схема 1.4

В другом процессе используется аналогичная обменная реакция олово-иод (III) и кремний-иод (III) (диацетоксиидо)аренов или иодозилбензол с тетрафенилстаннаном или триметилсилилбензолом в присутствии эфира трифторида бора.

Фрон и сотрудники сообщили о получении перфторарилдидиодониевой соли  $(\text{C}_6\text{F}_5)_2\text{I}^+\text{AsF}_6^-$  путем электрофильного арилирования  $\text{C}_6\text{F}_5\text{I}$  со стабильным гексафтороарсенатом пентафторфенилксенония,  $\text{C}_6\text{F}_5\text{Xe}^+\text{AsF}_6^-$  [7].

Ранее сообщалось о многочисленных методах получения симметричных и несимметричных диарил- и гетероариллиодониевых сульфатов и органосульфонов. Обычно несимметричные торилаты диарил- и гетроарил (арил) -иодониума получают реакциями [гидрокси(тозилокси)-иодо] аренов с аренами, арил- или гетарилтриметилсиланами, с

арилтрибутилстаннанами, или арилбороновыми кислотами. Реакция [гидрокси(тозилокси)иод] бензол с арилстаннанами протекает в более мягких условиях по сравнению с арилсиланами и применима в широком диапазоне аренов с электроноакцепторными заместителями. Арилбороновые кислоты в общем случае обладают некоторым преимуществом по сравнению с арилстаннанами в случае богатых электронами гетероциклических предшественников[8].

На схеме 1.5 показана обычная процедура получения несимметрично функционализированных триафлатов диарилиодония из иодзилбензола или (диацетоксиiodo)аренов при взаимодействии с аренами в трифторметансульфоновой кислоте. Эта процедура является простой и обеспечивает диатрилиодониевые трифлаты с относительно высокими выходами, но она ограничена ароматическими субстратами, которые не чувствительны к сильным кислотам. Более того, при взаимодействии (диацетоксийодо) бензола с трифторметансульфоновой кислотой в качестве побочных продуктов может образовываться олигомерные иодниевые соли п-фениленового типа. Эта методика была усовершенствована для проведения реакции более селективных реакций и в более мягких условиях с получением желаемого арила (фенил) иодония трифлатов из (диацетоксиiodo) бензола и арилбороновых кислот в присутствии трифторметансульфо кислоты при -30 °C с выходом 74-97%.

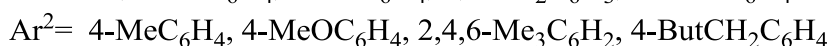
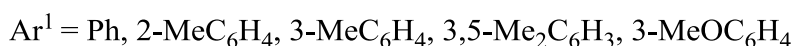
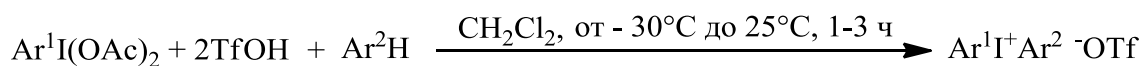


Схема 1.5

Олофссон и его сотрудники разработали несколько эффективных однокомпонентных синтезов солей диарилиодония. Общая и универсальная



процедура обеспечивает как симметричные, так и несимметричные триалаты диарилиодония 1.6в как из электронодонорных и богатых электронами аренов 1.6б, так и арилиодидов 1.6а с использованием mCPBA в качестве окислителя и трифликовой кислоты (Схема 1.6) [9]. Токсилаты диарилодиониума с богатыми электронами получают аналогичным образом с использованием толуолсульфо кислоты вместо трифликовой кислоты в качестве добавки. Симметричные триафалии триадиазония могут быть синтезированы модифицированной одностадийной процедурой из иода, аренов, mCPBA и трифликовой кислоты в аналогичных условиях [9].

Аналогичная процедура, основанная на одностадийной реакции арилбороновых кислот, арилиодидов, mCPBA и  $\text{VF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ , недавно была использована для региоселективного синтеза несимметричных тетрафторборатов диарилиодония. В дальнейшем усовершенствовании этого подхода был разработан ряд симметричных и несимметричных триалатов триадиазония с использованием мочевины- $\text{H}_2\text{O}_2$  в качестве экологически безопасного окислителя. Кита и его коллеги недавно продемонстрировали, что гексафторизопропанол (HFIP) можно использовать в качестве высокоэффективного растворителя для синтеза различных солей диарилиодония.

Скульски и Кразкевич также сообщили о новом прямом способе получения различных симметричных бромидов диаридиодония (в 15-88% сырого выхода) из аренов по реакции  $\text{ArH}$  с  $\text{NaIO}_4$  в серной кислоте с последующим добавлением  $\text{KBr}$ .

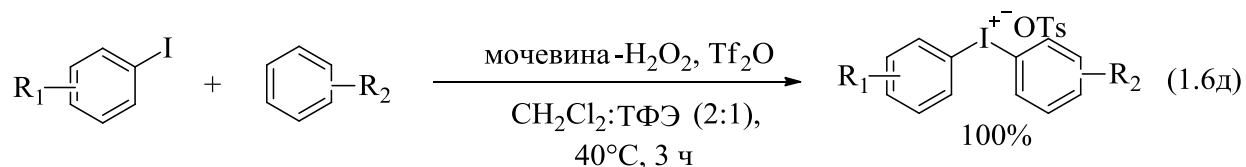
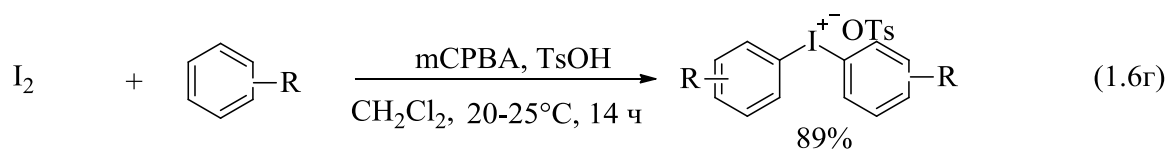
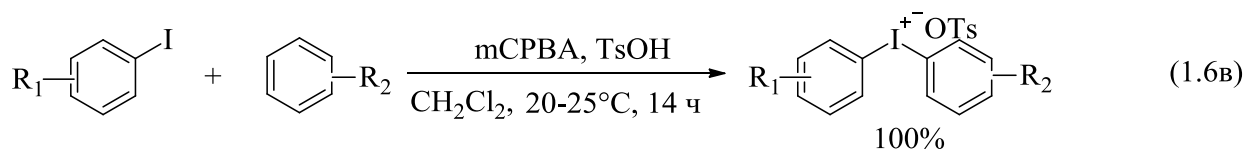
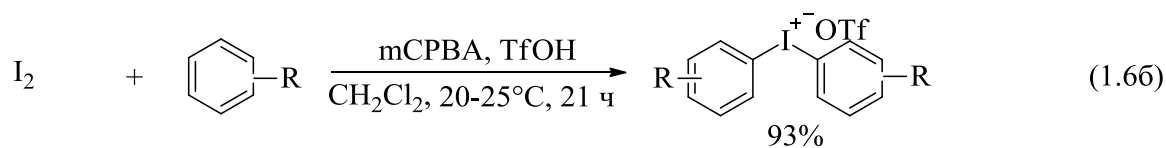
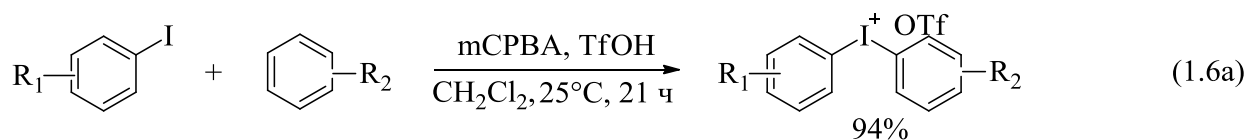


Схема 1.6

Механизм образования солей в данных реакциях основан на реакции электрофильного ароматического замещения между образующимся *in situ* соединением иода (III) и ареном (Схема 1.7):

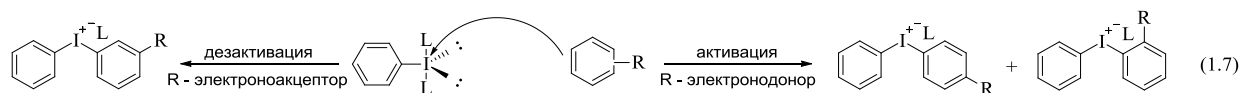
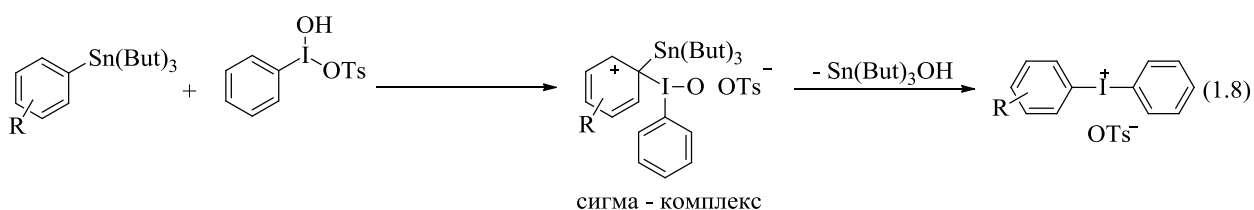


Схема 1.7

Активирующие заместители направляют замещение в орто – и пара – положение. В подавляющем большинстве были обнаружены пара – замещенные продукты, вероятно для образования орто – замещенных продуктов имеются стерические препятствия. При дезактивирующих

заместителях замещение происходит в мета – положении, однако данные субстраты зачастую малоактивны и часто приводят к разложению промежуточного продукта иода (III).

Весьма мягкий и общий метод получения триафланов диарил- и гетероарилиодония основан на реакциях переноса иода с цианидами иода (III) с соответствующими арил- или гетероарилстаннанами. В частности, трифталат (дициано)иодония 14, полученный из иодсоила трифлат и TMSCN, реагирует с производными трибутилов ароматических и гетероароматических соединений, дающие соответствующие симметричные соли иода в очень мягких условиях (схема 1.8) [10].



R = 2-Me, 3-Me, 2-OMe, 3-OMe, 4-F, 4-CF<sub>3</sub>

Схема 1.8

Аналогичная реакция обмена иода включает в себя трифлаты арил (циано) иодония 1.2.1 и станнированные ароматические предшественники, дающие много видов диарильных или арильных (гетероарил) иодониевых солей.

Тыквинский, Хинкл и коллеги сообщили о применении такого иодония реакцией переноса для получения ряда моно- и бисенилен (арил) иодонийтрифлатов 1.2.2 со все более электроноакцепторными заместителями на арильной части (схема 1.9) [1]. .

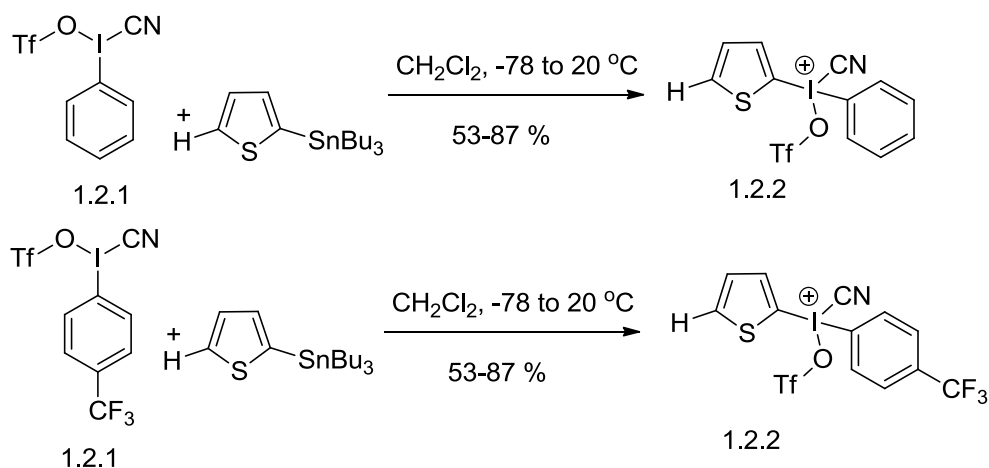


Схема 1.9

Сообщалось о получении нескольких макроциклических трифлатов иодония, таких как ромбоиды 1.2.5, квадрат 1.2.8 и пентагон 1.2.9 (схема 1.10) 1.2.5. Молекулы ромбовидной формы 1.2.5 получали обработкой соединений 1.2.3 и 1.2.4 триметилсилилтрифлатом 1.2.5а. Реакция дикатиона 1.1.6 с соединением 1.2.7 в присутствии  $\text{Me}_3\text{SiOTf}$  дает иод содержащий молекулярный квадрат 1.2.8 с выходом 70%. Кроме того, макроцикл 1.2.9 в форме пятиугольника был приготовлен с 60% выходом из исходных соединений 1.2.6 и 1.2.3. Эти иодсодержащие структуры заряженные макроциклами были установлены с использованием элементного анализа, многоядерного ЯМР и масс-спектрометрии. Эти иодсодержащие макромолекулы могут найти потенциальное применение в нанотехнологиях [1].

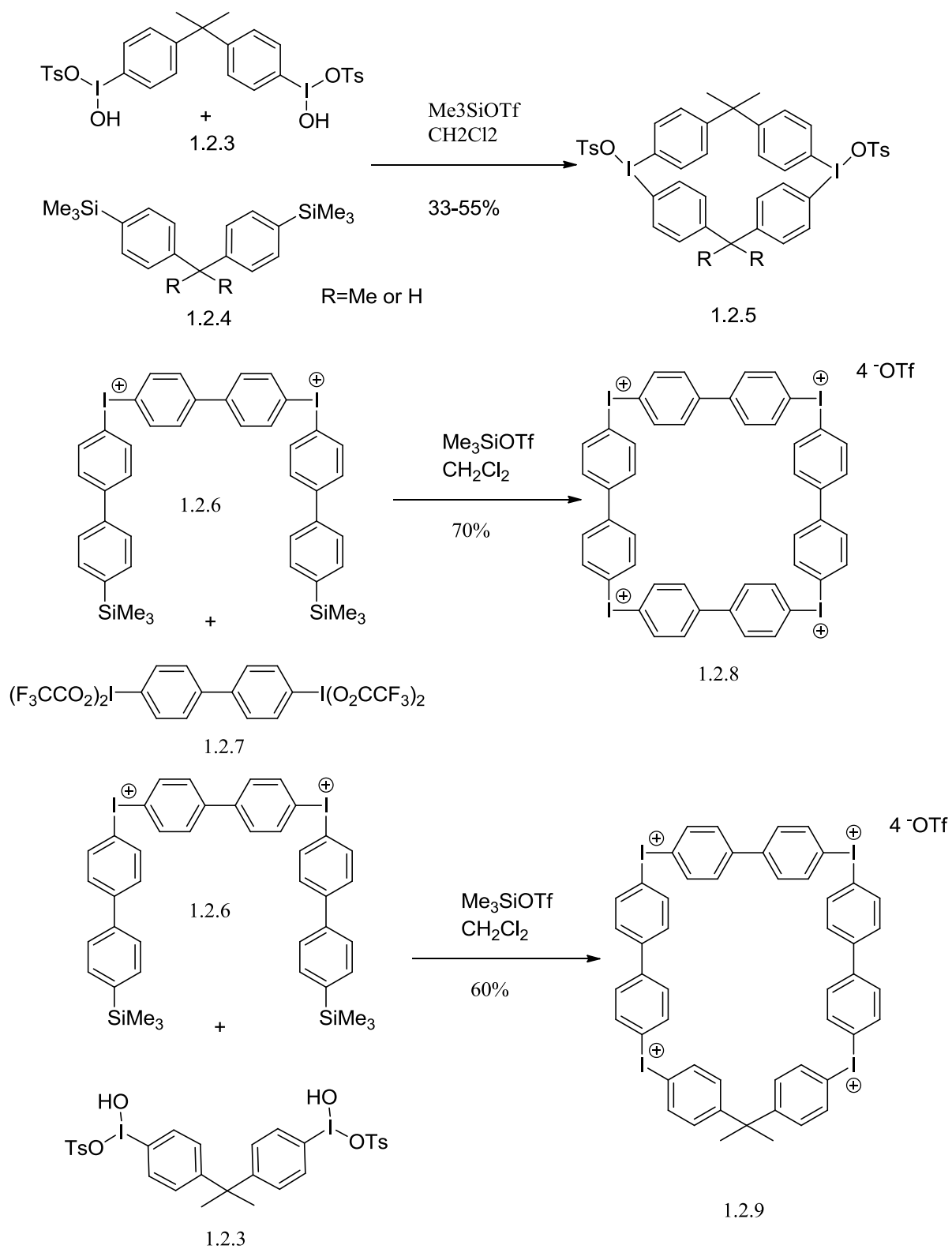


Схема 1.10

Очень мягкий и селективный подход к хлоридам арил- и гетариллиодония 1.1.12 основан на реакции соответствующего ариллития 1.1.10 (полученного из бромаренов и бутиллития) с дихлоридом транс-

(хлорвинил) иодонием 1.1.11 (схема 1.11). Реагент 1.1.11 получают реакцией трихлорида иода с ацетиленом в концентрированной соляной кислоте, это соединение крайне нестабильно и должно обрабатываться и храниться с соблюдением надлежащих мер предосторожности. Процедура переноса иодония с реагентом 1.1.11 особенно полезна для получения бис (гетарил) хлоридов иода 1.1.14 из соответствующих азотных гетероциклов 1.1.13 (схема 1.11) [1].

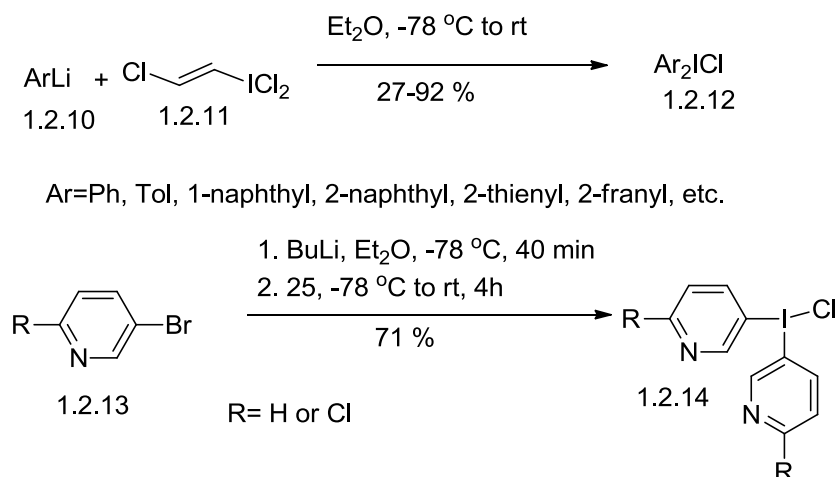


Схема 1.11

Привлекательной областью исследования является разработка методов синтеза солей диарилиодиония непосредственно из иодаренов без выделения промежуточных продуктов (промежуточных продуктов иода (III)). Несомненными преимуществами такого подхода является сокращение времени синтеза, вовлечение большего количества субстрата в реакцию, предотвращение экстракции нестабильных промежуточных продуктов.

Для успешного проведения таких реакций необходим тщательный отбор условий процесса для замещенных арилоидов и аренов с определенными электронными свойствами. Арен не должен быть слишком электронно-дефицитным, чтобы избежать образования побочного продукта из-за реакции электронного ароматического замещения арилоидидом.

В 1953 году Берингер сообщил, что некоторые соли диарилдиония могут быть получены непосредственно из алкил - замещенных аренов путем окисления коммерчески выгодным иодатом калия (схема 1.12а).

Известно, что циклические соли диарилдиония образуются легче, чем соответствующие ациклические структуры [11]. Поэтому первые синтезы солей диарилдиония без выделения промежуточных продуктов включали образование циклических структур. Сообщалось о формировании кольцевых структур при обработке 2-иоддифенила и подобных соединений надуксусной кислотой с последующим добавлением серной кислоты (схема 1.12б). Перекись водорода в смеси ангидрида уксусной кислоты и серной кислоты использовали для синтеза некоторых гетероциклических диарилиодионных солей, в частности из 2-иодфенилового эфира.

В работе [12] сообщалось о синтезе ациклических диарилиодионных солей путем окисления арилиодидов *in situ* надсульфатом калия или перекисью бария с последующей конденсацией с ареном (схема 1.12в).

Статья [13] посвящена подготовке солей диарилиодония методом электросинтеза. Анодное окисление арилиодидов в кислой среде в присутствии аренов обеспечивает высокие выходы иодидов диарилиодония (схема 1.12г). Объем полученных продуктов ограничен алкилзамещенными солями диарилиодония, поскольку обогащенные электронами субстраты приводят к появлению побочных продуктов, в то время как дефицитные электронами соли часто неактивны.

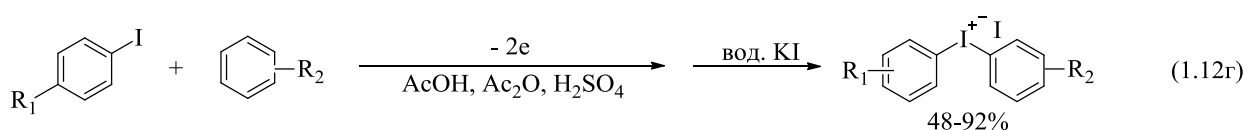
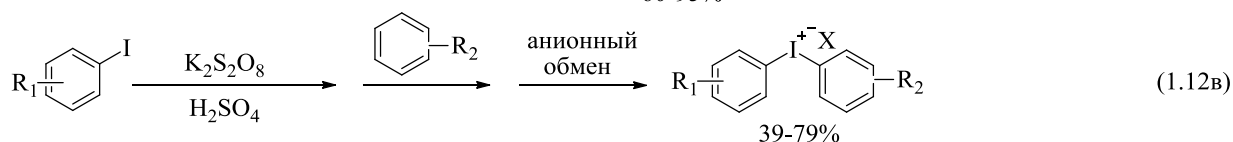
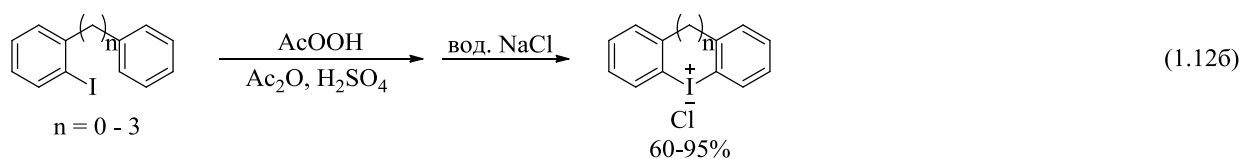
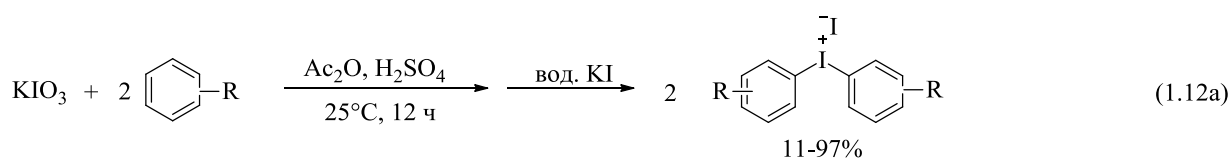


Схема 1.12

За последние несколько лет особые результаты в развитии одноконттактных синтезов диарилиодонневых солей были получены независимо научными группами Олофссона и Китамуры. Окисляли смесь арилиодида и арена с персульфатом калия в трифторуксусной кислоте (ТФУК) с последующим анионообменом (схема 1.13 а) [14].

Такая окислительная система использовалась при синтезе (диацетоксиидо) аренов непосредственно из аренов и иода. Комбинация этих двух процессов привела к непосредственному синтезу трифлатов диарилиодония из иода и аренов (схема 1.13 б). Позднее стадию обмена анионом заменяли добавлением трифлатной кислоты непосредственно к реакции, что привело к более короткому времени процесса. (Схема 1.13 в) [14]. Обработка реакционной смеси смесью п-толуолсульфоновой кислоты и серной кислоты приводила к получению тозилатов диарилиодония.



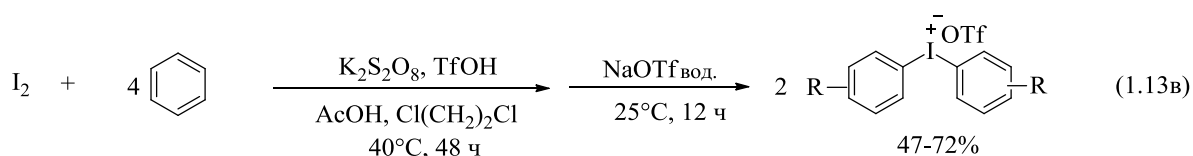
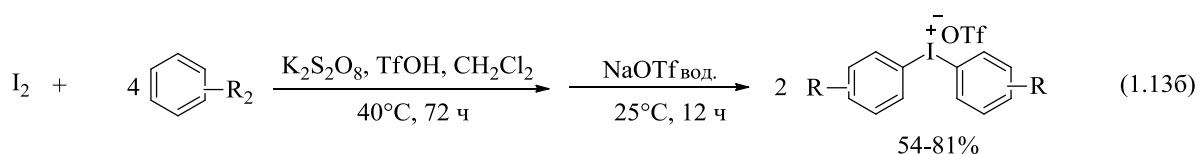
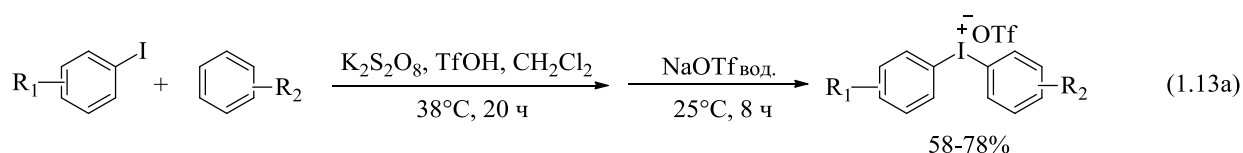


Схема 1.13

Соли диарилиодония на полимерной подложке были получены Ченом и сотрудниками в результате реакции соответствующего полистиролиодозооацетата с различными аренами в присутствии серной кислоты (схема 1.14) [15]:

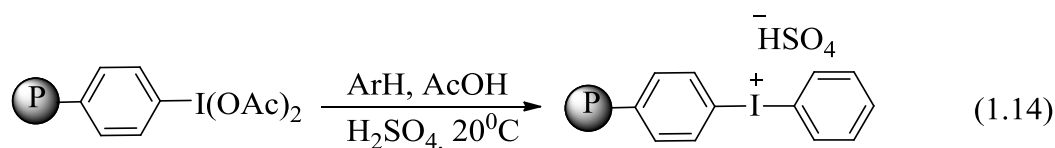


Схема 1.14

### 1.3 Методы иодирования фенола и его производных.

#### 1.3.1. Иодирование водным иодом и иодидом, опосредованным лактопероксидазой.

Прямое иодирование фенола (1) водным раствором  $\text{I}_2$  оказалось весьма неожиданным, оно дало пять различных иодфенолов: 2-иодфенол (2), 4-иодфенол (3), 2,6-дииодфенол (4), 2,4-дииодфенол (5) и 2,4,6-трииодфенола (6). Отдельные соединения были определены сравнением с эталонными соединениями. Распределение продукта соответствовало объединенному электронному эффекту OH-группы (активирующие позиции 2 и 4) и иоду (деактивирующие позиции 2 и 4). Когда фенол иодируют в разбавленных

растворах ( $10^{-4}$  М) водного иода, почти весь иод потребляется в течение нескольких минут, образуя иодфенолы. [16].

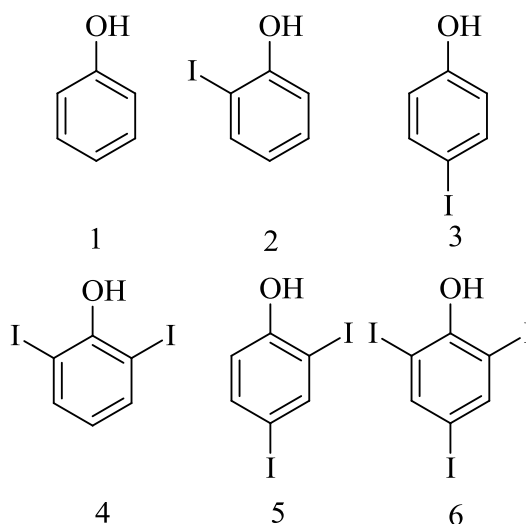


Рис. 1.5

Иодид не реагирует с фенолом в отсутствие окислителя.

Действуя в относительно высоких концентрациях иодида и перекиси водорода, элементный иодид образуется в достаточно высоких концентрациях, для взаимодействия с фенолом, возможно, путем первичного образования гипоиодной кислоты (HOI) как фактически иодирующего агента (см. Ниже). Концентрации  $I^-$  и  $H_2O_2$  ниже  $10^{-4}$  М не могут быть обнаружены в течение первых 10 мин. Следовательно, ферментный катализ может сыграть решающую роль в возможном иодировании фенола в диапазонах с низкой концентрацией, как, например, это происходит в окружающей среде. В этом контексте стоит отметить, что ферментативно катализируемое иодирование априори приведет к 100% -ному конверсии иодида в реакционной смеси, тогда как при отсутствии окислителя максимально к 50% -ной конверсии. Это можно предсказать, используя элементный иод/гипоиодную кислоту в качестве иодирующих агентов, оставив 50% в качестве иодида [16].

Ферментативное иодирование не приводит к образованию других изомеров, в отличие от непосредственного иодирования, т.е. элементарным иодом. Реакция иодирования, очевидно, может быть сформулирована как

серия последовательных стадий от фенола до моно-, ди- и три-иодфенола, контролируемая концентрациями реагентов, а также константами взаимной скорости.

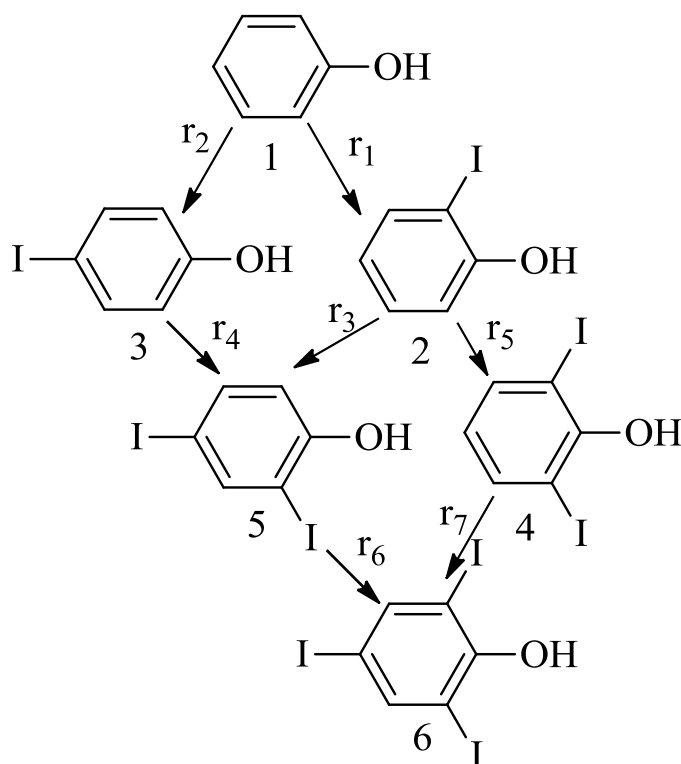


Схема 1.15

Для выяснения относительной скорости «конкурентных» реакций иодирования, фенолы и иодфенолы в различных соотношениях были иодированы ферментативно, причем фенолы применялись в большом избытке. В результате, образуются только первые иодопроизводные из исходных молекул. Принимая во внимание, что иодирование фенола может приводить к 2- и 4-иодфенолу, вероятность того, что 2-иодфенол получится со скоростью примерно в три раза быстрее, чем 4-иодфенол будет выше. Относительные скорости реакции, основанные на распределениях продуктов, приведены в таблице 1 [16].

Таблица 1.

Относительные отношения скорости иодирования, основанные на распределении продукта.

Реактивы	Отношение скорости
Фенол	$r_1 > r_2$
2-иодифенол	$r_3 > r_5$
Фенол, 2-иодифенол	$r_3 \geq r_1 + r_2$ $r_5 \sim r_1 + r_2$
Фенол, 4-иодифенол	$r_4 \sim r_2$
Фенол, 2,4-дииодифенол	$r_7 \gg r_1$
Фенол, 2,6-дииодифенол	$r_6 \ll r_1$

Иодирование 2-иодифенола приводит к 2,6- и 2,4-дииодифенолу в соотношении ок. 1,7:1. Иодирование моноиодифенолов в сочетании с фенолом и вычисление скоростей относительно скорости иодирования фенола приводит к выводу, что 6-положение в 2-иодифеноле было примерно таким же благоприятным, как исходное 2-положение в феноле. С другой стороны, 2- и 6-положение в 4-иодифеноле неожиданно оказалось значительно менее благоприятным для иодирования. Однако, поскольку мы работаем с относительно высокими концентрациями фенолов ( $10^{-4}$ ), нельзя исключать того, что на относительные скорости, определенные в этих условиях, влияет взаимодействие между иодифенолами и ферментом, отражающими ингибирующую тенденцию. Ферментативное иодирование 2,6-дииодифенол и 2,4-дииодифенол привели к образованию 2,4,6-трииодифенола. Однако, когда фенол доступен в качестве субстрата, 2,4-дииодифенол будет только в очень незначительных количествах, если вообще его проиодируют. Скорость образования 2,4,6-трииодифенола из 2,6-дииодифенола оказалась значительно выше, чем скорость образования моноиодифенола из фенола [16].

Из относительных скоростей реакции можно сделать вывод, что в целом активация атомов углерода для дальнейшего иодирования увеличивается со степенью иодирования. Активация фактических С-атомов

выглядит следующим образом: фенол < моно-иодфенол < дииодфенол, за исключением случая, когда 4-положение занято иодом. Это объясняет взаимодействие между ферментом и атомом иода, расположенным в 4-положении, так как 4-положение в 2,6-дииодфеноле очень благоприятно для дальнейшего иодирования. Наблюдаемый эффект также может объяснить ферментативно контролируемый ионный обмен иодом в 4-положении.

Реакция обмена не протекает в отсутствие фермента. Кроме того, было отмечено, что 2,6-дииодфенол не образуется в реакции обмена. При иодировании 4-иодфенола с применением  $^{131}\text{I}$  были обнаружены незначительные количества  $^{131}\text{I}$ , меченного 4-иодфенолом. Следовательно можно заключить, что только иод в 4-положении подвергается ферментативному контролю иодного обмена, и возможно, это происходит путем простого электрофильного замещения иод-иодом [16].

При увеличении исходного соотношения фенол /  $\text{I}$  уменьшается количество образовавшегося трииодфенола, а также соотношение между количествами 2,4- и 2,6-дииодфенола, это объясняется тем, что 2,4,6-трииодфенол образуется из 2,6-дииодфенола, но не из 2,4-дииодфенола, при наличии альтернативного субстрата, например фенола. Поскольку 2,6-дииодфенол дает только 2,4,6-трииодфенол, отношение 2,4-дииодфенола / 2,6-дииодфенола увеличивается, когда содержание трииодфенола увеличивается.

Вызывает значительный интерес то, что ферментативно контролируемое иодирование фенола в избытке перекиси водорода вызывает образование димеров 2-иодфенола, тогда как 4-иодфенол, по-видимому, не подвергается димеризации. 2-иодфенолы, вероятно, связаны через другие ортофторуглероды. Даннер с соавторами показали ферментативно катализированную димеризацию фенола через орто-углерод.

Важно отметить, что производство 2-иодфенола, по-видимому, сильно зависит от 4-иодфенола. Для ферментативно контролируемого иодирования мы обнаружили соотношение 2:3, равное ок. 6:1, что соответствует 86% -му

выходу 2-иодфенола. Прямое иодирование с использованием элементарного иода дало еще более высокое соотношение 2:3, так как было получено 92% 2-иодфенола. Однако бромирование фенола при применении элементарного брома приводит к образованию только 23% 2-бромфенола, что согласуется с недавними результатами, описанными Tee с соавторами, которые нашли предпочтительным пара-замещение при рН 4. В таблице 2 представлены некоторые орто-пара-соотношения для галогенирования фенола в водных растворах.

Таблица 2.

Соотношения компонентов с образующимися продуктами, галогенирующий фенол

Реактивы	рН	орта/пара	
Фенол, Бром	5	0,3	Эта работа [16]
Фенол, Иод	5	13,3	
Фенол, NaOCl	4	0,64	Oгата и соавторы
Фенол, NaOCl	7	1,8	
Фенол, NaOCl	8.8	2,8	
Фенол, NaOCl	10	4,3	

Из табл. 2 видно, что иодирование при рН 5 активное проявляется орто- положение, а в случае бромирования, предпочтительным является пара-положение. При щелочном рН Tee с соавторами предположили, что отношение орто / пара изменяется в сторону увеличения значений при бромировании фенола. Однако они использовали равное количество фенола и брома. Таким образом, были образованы полибромированные фенолы. Это может исказить представление о отношении орто / пара положения путем возможного потребления орто-бромфенола [16].

Беря за основу теоретические представления, Oгата и соавторы предположили, что пара-положение как в феноле, так и в феноксид-ионе, а также в анизоле должно быть предпочтительным для электрофильного замещения относительно орто-положения. Однако при изучении хлорирования фенола они пришли к выводу, что некоторые из расчетов подтверждают механизм, связанный с образованием PhOCl, который впоследствии может перегруппироваться в орто-хлорфенол. Далее механизм

поддерживается увеличением отношения орто / пара положения, которое увеличивается с повышением рН (таблица 2), и что хлорирование анизола приводит к ожидаемому соотношению орто / пара положения, основанному на теоретических расчетах Огато и соавторов. Аналогичный Механизм может участвовать в иодировании фенола.

### **1.3.2. Иодирование иодидом, опосредованным хлорамином-Т**

Хлорамин-Т в опосредованном иодировании фенола в ацетатбуфере (рН 5) приводит к соотношению орто / пара положения между 0,5 и 1. Однако отношение иодид / фенол равно 1, также наблюдалось образование значительного количества дииодфенола. Можно отметить, что наблюдался только 2,4-дииодфенол, а не 2,6-дииодфенол, что наводит на мысль о том, что ди-иодфенол был образован из 4-иодфенола. Кометани и соавторы обнаружили 96% образование 4-иодфенола путем опосредования хлорамином-Т в иодировании фенола в диметилформамиде и диметилсульфоксиде. В этом случае важно отметить, что попытки иодирования фенола с элементарным иодидом в диметилформамиде дало чрезвычайно медленную реакцию, так как менее 10% введенного иода прореагировало в течение 24 часов. Однако образование преобладающего количества 4-иодфенола было однозначным. Эти данные свидетельствуют о том, что иодирование, опосредуемое хлорамином-Т, связано с механизмом, отличным от иодирования элементарным иодом. Следует отметить, что в диметилформамиде иод-иодная связь с элементарным иодом сильно поляризована, однако реакция, приводящая к эффективному иодированию с применением гипоиодной кислоты, как и в водном растворе, очевидно, отсутствует [16].

При воздействии хлорамина-Т на 2-иодфенола и 4-иодфенола в ацетатбуфере (рН 5) 2-иодфенол не обнаруживается при помощи МС после

одного часа, но по всей вероятности, 4-иодфенол не влияет на этот процесс. Это может исказить результаты, поскольку селективное превращение 2-иодфенола в побочные соединения, очевидно, уменьшит отношение орто / пара положение. Стоит также отметить, что опосредованное хлорамином-Т иодирование фенола приводит к образованию неизвестных иодсодержащих соединений. Эти соединения, которые трудно элюировать из колонки ВЭЖХ, возможно могут состоять из иодированных полимерных частиц, включающих хлорамин-Т. С помощью МС не было обнаружено никаких димеров иодфенола, в отличие от ферментативно контролируемого иодирования фенола при избытке водорода в процессе получения димеров 2-иодфенола [16].





Наиболее перспективным сегментом рынка сбыта являются область органического синтеза, так же средние и мелкие компании в области биомедицины и в производстве радиофармпрепаратов для ПЭТ.

#### 4.2 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.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i * Б_i$$

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

Оценочная карта конкурентных товаров и разработок представлена в таблице 4.

Полимер	Страна	Производитель
 <p>1. <math>H_3C-O</math> <math>O-CH_3</math> Бф</p>	Россия	НИ ТПУ, г.Томск
 <p>2. Бк1</p>	Швеция	Stockholm University
 <p>3. Бк2</p>	США	University of Nebraska г. Линкольн

Таблица 2

Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии 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.Реакционная способность	0,20	5	4	4	1	0,8	0,8
2.Время получения	0,07	4	5	5	0,28	0,35	0,35
3. Стойкость к внешним факторам	0,10	5	4	3	0,5	0,4	0,3
4.Стабильность хранения	0,07	5	4	4	0,35	0,28	0,28
5.Чистота	0,10	5	4	4	0,5	0,4	0,4
5. Безопасность производства	0,07	5	4	4	0,35	0,28	0,28
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>							
1. Окупаемость	0,06	5	5	5	0,3	0,3	0,3
2. Цена	0,08	5	4	5	0,4	0,32	0,4
3. Качество продукта	0,15	5	4	3	0,75	0,6	0,45
<b>Итого</b>	1	47	38	37	4,43	3,73	3,56

### 4.3 SWOT-анализ

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

Таблица 3  
Матрица SWOT

	<b>Сильные стороны проекта:</b> С1 Зеленая химия С2. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями С3. Квалифицированный персонал С4 Наличие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца	<b>Слабые стороны проекта:</b> Сл1. Сложность производства. Сл2 Отсутствие запатентованных современных технологий;
<b>Возможности:</b> В1. Использование инновационной инфраструктуры	В связи с уникальными свойствами продукта (высокая реакционная способность, экологичность и схожая структура с природным гормоном щитовидной железы тироксином)	Несмотря на достоинства разработки и на наличие возможностей ее реализации, она не развита на рынке из-за малой заинтересованности потенциальных потребителей.
ТПУ В2 Долгосрочная стратегия развития отрасли на государственном уровне.	У данной научной разработки есть шансы выйти на российский рынок. Есть необходимость заинтересовать инвесторов, чтобы данная разработка нашла практическое применение в отрасли органического производства, биомедицины и радиофармпрепаратов.	Отсутствия промышленных установок на территории России. Соответственно, из-за незаинтересованности потенциальных потребителей отсутствует финансирование и необходимое оборудование для дальнейшего развития.
<b>Угрозы:</b> У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства У2. Ограничение на экспорт технологии У3. Введения	Производство солей поливалентного иода не развито на территории России, высокая конкуренция на мировом рынке препятствует продвижению отечественного продукта.	Отсутствие финансирования и незаинтересованность потенциальных потребителей в научной разработке является проблемой для дальнейшего ее развития.

дополнительных государственных требований к сертификации продукции		Следует выработать маркетинговую стратегию в области продвижения российского продукта на рынок.
--	--	---

#### 4.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

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.

Сводная оценка готовности научной разработки к коммерциализации представлена в таблице 6.

Значение  $B_{\text{сум}}$  позволяет говорить о мере готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации. Значение степени проработанности научного проекта составило 57, что говорит о перспективной разработке, а знания разработчика достаточны для успешной ее коммерциализации. Значение уровня имеющихся знаний у разработчика составило 54 – перспективность выше среднего.

Таблица 4  
Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
	Определен имеющийся научно-технический задел	4	4
	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	5	4
	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на	3	4

	рынке		
	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	4
	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	5	3
	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	3	4
	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	3
	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	2
	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	4	4
	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	3	4
	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	3	3
	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	4	4
	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	3
	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	4
	Проработан механизм реализации научного проекта	4	4
	Итого	57	54

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

Методом коммерциализации научной разработки были выбраны *торговля патентными лицензиями, инжиниринг и передача интеллектуальной собственности* в уставной капитал предприятия.

Данные методы предоставят возможность внедрить разработку на все уровни рынка сбыта. Торговля патентами и передача интеллектуальной собственности предполагает использования объектов исследования на лицензионной основе и распространение разработки, как на предприятие, так

и в научно-исследовательские университеты. Инжиниринг предоставит возможность внедрения разработки непосредственно на производство.

#### 4.6 Инициация проекта

Группа процессов инициации состоит из процессов, которые выполняются для определения нового проекта или новой фазы существующего. В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать и влиять на общий результат научного проекта. Данная информация закрепляется в Уставе проекта.

Организации, которые активно участвуют в проекте или интересы которых могут быть затронуты как положительно, так и отрицательно в ходе исполнения или в результате завершения проекта представлены в таблице 7.

В таблице 8 представлена информация о иерархии целей проекта и их критериях достижения.

В таблице 9 представлена рабочая группа данного проекта.

Факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а так же «границы проекта» представлены в таблице 10.

Таблица 5  
Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Отечественные производители продуктов органического синтеза.	Получение нового реагента и катализатора для органических синтезов
Фармацевтические компании	Получить промежуточное вещество для синтеза лекарственных средств.

Таблица 6  
Цели и результат проекта

<b>Цели проекта:</b>	Получение диарилиодоновых солей из метоксифенола
----------------------	--

<b>Ожидаемые результаты проекта:</b>	Создание отечественного конкурентоспособного продукта, привлекательного для инвесторов.
<b>Критерии приемки результата проекта:</b>	Чистый, готовый продукт с заявленными свойствами.
<b>Требования к результату проекта:</b>	<b>Требование:</b>
	Стандартизация готового продукта

Таблица 7  
Рабочая группа проекта

<b>№ п/п</b>	<b>ФИО, основное место работы, должность</b>	<b>Роль в проекте</b>	<b>Трудозатраты, час.</b>
1	Юсубов Мехман Сулейманович, НИ ТПУ, доцент кафедры ТОВПМ, руководитель проекта	Координирует деятельность участников проекта	584
2	Кукурина Ольга Сергеевна, НИ ТПУ, доцент кафедры ТОВПМ, научный руководитель	Выполняет руководящую функцию	968
3	Ухин Антон Олегович Мгистрант.	Исполнитель проекта	1168
<b>ИТОГО:</b>			2720

Таблица 8  
Ограничения проекта

<b>Фактор</b>	<b>Ограничения/ допущения</b>
Бюджет проекта	<b>Отсутствует</b>
Источник финансирования	<b>Отсутствует</b>
Сроки проекта:	1.09.2015–31.05.2017
Дата утверждения плана управления проектом	1.10.2015
Дата завершения проекта	31.05.2017



## 4.7 Планирование управления научно-техническим проектом

### 4.7.1 Иерархическая структура работ проекта

Для детализации структуры исследования была составлена иерархическая структура работ (рисунок 4.1).

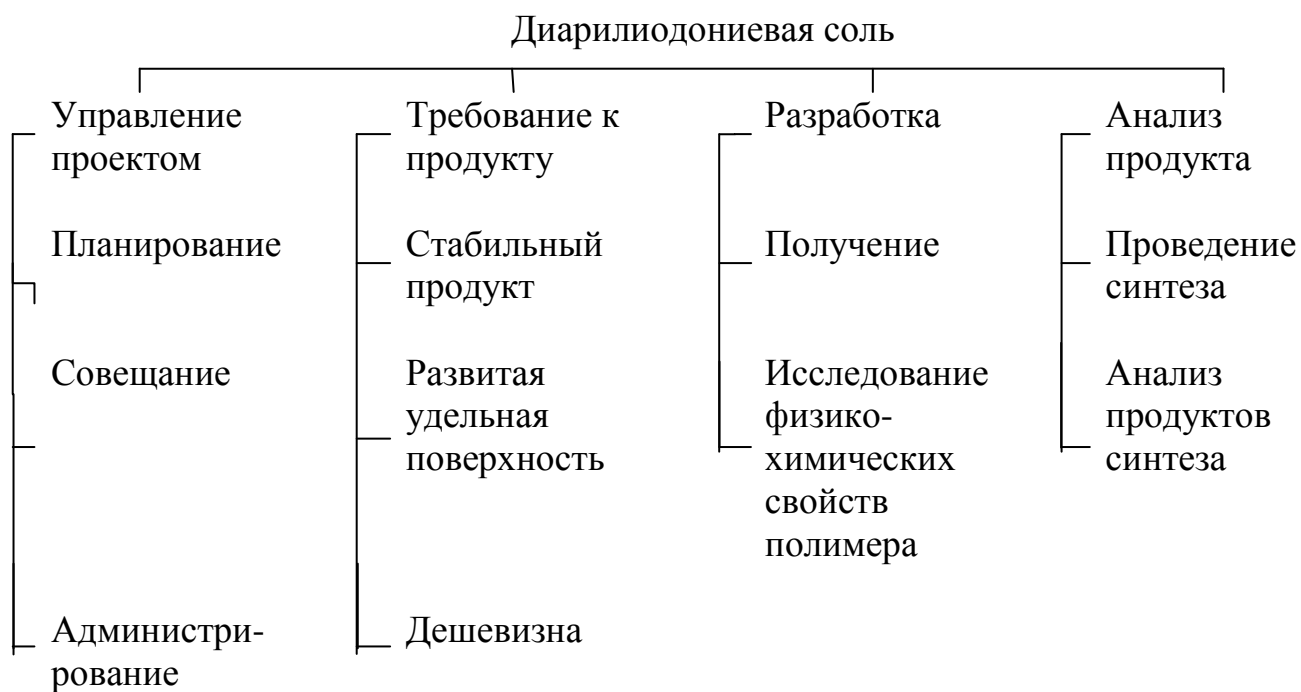


Рисунок 4.1 – Иерархическая структура работ

#### 4.7.2 Контрольные события проекта

Ключевые события проекта, их даты и результаты представлены в таблице 11.

Таблица 9  
Контрольные события проекта

№ п/п	Контрольное событие	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	Получение тозилированного продукта	26.11.15	ЯМР спектр
2	Наработка тозилированного метоксифенила	11.12.15	ТСХ
3	Получение иодирующего реагента NIS	15.02.16	ТСХ
4	Получение иодированного продукта	08.04.16	ЯМР спектр, ГХМС
5	Получение соли поливалентного иода	01.03.16	ЯМР спектр
6	Очистка полученной соли	10.03.16	ГХМС
7	Определение физических свойств соли	28.03.16	Акты испытаний
8	Определение химических свойств соли	05.04.16	Акты испытаний

### 4.7.3 План проекта

Календарный план проекта исследования диарилиодониевых солей-производных фенола представлен в таблице 12.

Таблица 10  
Календарный план проекта

Код работ	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	Проведение литературного и патентного обзора	45	7.09.15	21.10.15	Ухин А.О.
2	Теоретический анализ	25	23.10.15	17.11.15	Ухин А.О.
3	Постановка задачи исследования	7	18.11.15	25.11.15	Кукурина О.С Ухин А.О.
4	Получение тозилированного продукта	14	26.11.15	10.12.15	Ухин А.О.
5	Наработка тозилированного метоксифенила	14	11.12.15	26.12.15	Ухин А.О..
6	Получение иодирующего реагента NIS	14	15.02.16	28.02.16	Ухин А.О.
7	Получение иодированного продукта	7	1.03.16	9.03.16	Ухин А.О..
8	Получение соли поливалентного иода	15	10.03.16	25.03.16	Ухин А.О.
9	Очистка полученной соли и определение физико-химических свойств	22	14.04.16	8.05.16	Ухин А.О.
10	Результаты и обсуждения	4	8.05.16	12.05.16	Кукурина О.С Ухин А.О.
11	Оформление работы	14	13.05.16	27.05.16	Ухин А.О.
12	Разработка презентации и раздаточного материала	5	30.05.17	5.06.17	Кукурина О.С Ухин А.О.
<b>Итого:</b>		197			

Для данной НИР выбран линейный график планирования (таблица 13), так как работа выполняется последовательно, она характеризуется сравнительно небольшим количеством этапов и относится к простым.



#### 4.8 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. Расчет стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам. Результаты по данной статье заносятся в таблицы 14, 15, 16.

Таблица 12

Расчет затрат на сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

№ п/п	Наименование затрат	Единица измерений	Расход	Цена за единицу, руб	Сумма, руб
1	Гваякол	г	100	8027,93	8027,93
2	п-тозил хлорид	г	100	10481.81	10481.81
3	Триэтиламин	мл	100	2795.14	2795.14
4	NBS	г	100	2941.41	2941.41
5	Иод	г	100	800,00	800,00
6	Дихлорметан	л	2	400,00	800,00
7	Этилацетат	л	2	200,00	400
8	Гексан	л	2	600,00	1200,00
9	Ацетон	кг	5	550,00	2250,00
10	Дозатор	шт	1	8900,00	8900,00
11	Промывалка	шт	2	650	1300
12	Наконечники для дозатора	шт	400	530	530
13	Пробирки	шт	100	800	800
<b>Итого</b>					40056,3
Транспортно-заготовительные расходы (4 %)					1213,058
<b>Итого по статье</b>					41269,35

Таблица 13

№ п/п	Наименование оборудования	Кол -во	Стоимость, руб.	Норма амортизации, %	Срок, дни	Амортизация, руб
1	Роторный испаритель, фирма «Heidolph»	1	56759	15	80	1866
2	Компьютер	1	35000	5	120	575
3	Вакуумный насос	1	45920	10	80	1006
<b>Итого</b>			137679			3447

Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

Таблица 14  
Расчет энергетических затрат

Наименование оборудования	Мощность, кВт	Время работы, ч	Энергозатраты за период выполнения проекта, кВт·ч	Затраты на энергию за период выполнения проекта, руб. (4,36 руб./кВт)
Роторный испаритель, фирма «Heidolph»	0,295	240	70,8	308,69
Компьютер	0,350	240	84,0	366,24
<b>Итого</b>				674,93

Рассчитаем все затраты на выполнение исследовательской работы (таблица 17).

Таблица 15  
Группировка затрат по статьям

Вид работ	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты, руб	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ, руб	Энергозатраты, руб	Основная заработная плата, руб	Отчисления на социальные нужды, руб	Накладные расходы	Итого плановая себестоимость, руб
	41269,35	3447	674,93	138977,36	41971,16	15287,51	241627,31

Расчет основной заработной платы приведен в таблице 20.

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

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп},$$

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

Основная заработная плата ( $Z_{осн}$ ) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб},$$

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:

$$Z_{дн} = \frac{Z_{м} \cdot M}{F_{д}},$$

где  $Z_{м}$  – 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;  $F_{д}$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Таблица 16 –  
Баланс рабочего времени одного исполнителя НИР за 2016-2017 учебный год

Показатели рабочего времени	Исполнитель
Календарное число дней	365
Количество нерабочих дней	
- выходные дни	147
- праздничные дни	14
Номинальный фонд рабочего времени	204
Потери рабочего времени	
- отпуск	48
- невыходы по болезни	10



Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_b \cdot (k_{пр} + k_d) \cdot k_p$$

где  $Z_b$  – базовый оклад, руб.;  $k_{пр}$  – 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 Томска).

$$Z_{м(н.рук)} = 20380 \cdot 1,12 \cdot 1,3 = 29673,28$$

$$Z_{м(конс)} = 7500 \cdot 1,12 \cdot 1,3 = 10920,00$$

$$Z_{м(исп)} = 6590 \cdot 1,12 \cdot 1,3 = 9595,04$$

Среднедневная заработная плата:

$$Z_{дн(н.рук)} = \frac{29673,28 \cdot 10,4}{146} = 2113,71 \text{руб.};$$

$$Z_{дн(конс)} = \frac{10920,00 \cdot 10,4}{146} = 777,86 \text{руб.};$$

$$Z_{дн(исп)} = \frac{6590 \cdot 10,4}{146} = 469,42 \text{руб.}$$

Основная заработная плата руководителя (от ТПУ) рассчитывается на основании отраслевой оплаты труда.

$$Z_{осн(н.рук)} = 2113,71 \cdot 22 = 46501,62 \text{руб.};$$

$$Z_{осн(конс)} = 777,86 \cdot 110 = 85564,93 \text{руб.};$$

$$Z_{осн(исп)} = 469,42 \cdot 197 = 92475,74 \text{руб.}$$

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 19.

Таблица 17  
Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_b$ , руб.	$k_{пр}$	$k_p$	$Z_m$ , Руб	$Z_{дн}$ , руб.	$T_p$ , раб. дн.	$Z_{осн}$ , руб.
Руководитель	20380	1,12	1,3	29673,28	1296,65	22	46501,62
Магистрант	6590	1,12	1,3	9595,04	419,28	197	92475,74

Рассчитываем отчисления на социальные нужды (30,2%):

Таблица 18  
Расчёт основной заработной платы

	Заработная плата, руб	Социальные отчисления, руб
Руководитель	46501,62	14043,49
Магистрант	92475,74	27927,67
<b>Итого</b>	<b>138977,36</b>	<b>41971,16</b>

Накладные расходы

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

где  $k_{\text{накл}} = 11\%$  коэффициент накладных расходов.

Таблица 21  
Накладные расходы

	Руководитель	Магистрант
Зарплата, руб.	46501,62	92475,74
Накладные расходы, руб	5115,18	10172,33

#### 4.9 Организационная структура проекта

В практике используется несколько базовых вариантов организационных структур: функциональная, проектная, матричная.

Наиболее подходящей организационной структурой данной работы является проектная, представленная на рисунке 14.

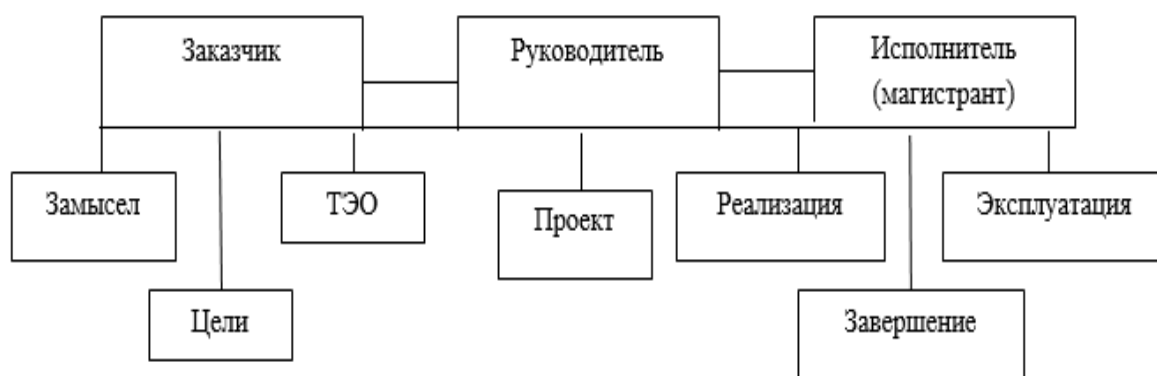


Рисунок 4.2 – Организационная структура проекта

#### 4.10 Матрица ответственности

Для распределения ответственности между участниками проекта формируется матрица ответственности (таблица 22).

Таблица 22  
Матрица ответственности

Этапы проекта	Руководитель	Магистрант
Проведение литературного и патентного обзора	О	И
Теоретический анализ	О	И
Постановка задачи исследования	О	И
Экспериментальная часть	О	И
Результаты и обсуждения	О	И
Оформление работы	О	И
Разработка презентации и раздаточного материала	О	И

Степень участия в проекте:

*Ответственный (О)*– лицо, отвечающее за реализацию этапа проекта и контролирующее его ход.

*Исполнитель (И)* – лицо (лица), выполняющие работы в рамках этапа проекта.

*Согласующее лицо (С)* – лицо, осуществляющее анализ результатов проекта и участвующее в принятии решения о соответствии результатов этапа требованиям.

#### 4.11 План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта (таблица 23).

Таблица 23  
План управления коммуникациями

<b>№ п/п</b>	<b>Какая информация передается</b>	<b>Кто передает информацию</b>	<b>Кому передается информация</b>	<b>Когда передает информацию</b>
1.	Статус проекта	Магистрант	Руководителю	Ежеквартально (первая декада квартала)
2.	Обмен информацией о текущем состоянии проекта	Магистрант	Участникам проекта	Еженедельно (пятница)
3.	Документы и информация по проекту	Руководитель	Магистранту	Не позже сроков графиков и к. точек
4.	О выполнении контрольной точки	Магистрант	Руководителю	Не позже дня контрольного события по плану управления

## 4.12 Реестр рисков проекта

Риски, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия (нежелательные эффекты), проанализированы в таблице 24.

Таблица 24  
Реестр рисков

№	Риск	Потенциально е воздействие	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Способы смягчения риска	Условия наступления
1	Примеси	Изменение структуры и свойств продукта	1	5	Проверка и очистка оборудовани, ХЧ и ОХЧ реактивы и растворители	Загрязнение и не герметичност ь установки, грязные реагенты и их вышедший срок годности
2	Не соблюдение условий синтеза	Снижение качества продукта и малый выход	2	5	Контроль процесса	Невниматель ность работника, неисправност ь установки
3	Финансиро- вание	Не хватка денежных средств для проведения исследований	3	4	Привлечение инвесторов	Сокращение бюджета
4	Незаинтере- сованность	Отсутствие рынка сбыта	4	5	Поддержание актуальности разработки	Отсутствие новизны и востребован- ности исследования

#### 4.13 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.

Свод затрат по статьям налогов представлен в таблице 25.

Таблица 25  
Группировка затрат по статьям аналогов разработки

Наименование статьи	Сумма, руб.		
	Разработка	Ан. Разраб. 1	Ан. Разраб. 2
1. Материальные затраты НТИ	41269,35	41269,35	41269,35
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	3447	3447	3447
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	138977,36	138977,36	138977,36
4. Социальные отчисления	41971,16	41971,16	41971,16
5. Затраты на электроэнергию	674,93	965,86	1804,35
6. Накладные расходы	15287,51	15287,51	15287,51
<b>7. Бюджет затрат НТИ</b>	<b>242988,65</b>	<b>243279,58</b>	<b>244118,07</b>

В вариантах исполнения (аналог 1, аналог 2) происходит увеличение затрат на электроэнергию, за счет увеличения расхода сырья.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\Phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{242988,65}{244118,07} = 0,995;$$

$$I_{\Phi}^{a1} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{243279,58}{244118,07} = 0,996;$$

$$I_{\Phi}^{a2} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} = \frac{244118,07}{244118,07} = 1.$$

где  $I_{\Phi}^p$  – интегральный финансовый показатель разработки;  $\Phi_{pi}$  – стоимость  $i$ -го варианта исполнения;  $\Phi_{\max}$  – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное удешевление стоимости разработки.

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

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a; \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p$$

где  $I_m$  – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов;  $a_i$  – весовой коэффициент  $i$ -го параметра;  $b_i^a, b_i^p$  – балльная оценка  $i$ -го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;  $n$  – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в таблице 26.

Таблица 26

Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Разработка	Ан. Разраб. 1	Ан. Разраб. 2
1. Способствует росту производительности труда	0,1	5	4	3
2. Удобство в эксплуатации	0,15	4	4	4
3. Энергосбережение	0,20	5	4	3
4. Надежность	0,15	5	5	5
5. Воспроизводимость	0,25	4	4	4
6. Материалоемкость	0,15	5	4	3
ИТОГО	1	28	25	22

$$I_m^p = 5 \cdot 0,1 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,20 + 5 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,25 + 5 \cdot 0,15 = 4,6$$

$$I_m^{a1} = 4 \cdot 0,1 + 4 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,20 + 5 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,25 + 4 \cdot 0,15 = 4,15$$

$$I_m^{a2} = 3 \cdot 0,1 + 4 \cdot 0,15 + 3 \cdot 0,20 + 5 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,25 + 3 \cdot 0,15 = 3,7$$

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

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p}, \quad I_{финр}^a = \frac{I_m^a}{I_{\phi}^a},$$

$$I_{\phi}^p = \frac{4,6}{0,995} = 4,62;$$

$$I_{\phi}^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_{\phi}^{a1}} = \frac{4,15}{0,996} = 4,17;$$

$$I_{\Phi}^{a1} = \frac{I_m^{a2}}{I_{\Phi}^{a2}} = \frac{3,7}{1} = 3,7.$$

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

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\Phi}^{a1}} = \frac{4,62}{4,17} = 1,11;$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{финр}}^p}{I_{\Phi}^{a2}} = \frac{4,62}{3,7} = 1,25.$$

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

Таблица 27

Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Ан. Разраб. 1	Ан. Разраб. 2	Разработка
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,995	1	0,996
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,15	3,7	4,6
3	Интегральный показатель эффективности	4,17	3,7	4,62
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,11	1,25	–

По полученным значениям интегральных показателей эффективности можно сделать вывод, что существующий вариант решения поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является наиболее приемлемым.

Вывод: был проведен предпроектный анализ, описана инициализация проекта, спланировано управление НТП, разработка является конкурентоспособной, обладает средней перспективностью, а также определен бюджет НТИ, который составил 1,9 млн. руб.