

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

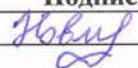
Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки: 18.04.01 Химическая технология, профиль Химия и
 технология биологически активных веществ
 Научно-образовательный центр Н.М.Кижнера

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

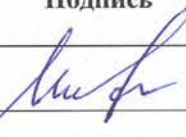
Тема работы
Исследование люминесцентных свойств 3-нитроформазанов квантово-химическими методами

УДК 535.37:547.556.9

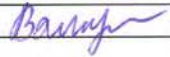
Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ71	Новиков Александр Станиславович		16.05.2019

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заместитель директора по развитию ИШХБТ	Трусова М. Е.	д.х.н., доцент		16.05.19

Консультант по экспериментальной части

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ИШХБТ	Валиев Р. Р.	к.ф.м.н.		16.05.2019

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения социально-гуманитарных наук	Подопригора И. В.	к.э.н., доцент		16.05.19

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель отделения общетехнических дисциплин	Романова С.В.			16.05.19

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент Научно-образовательного центра Н.М.Кижнера	Сарычева Т.А.	к.х.н., доцент		16.05.19

Томск – 2019 г.

Планируемые результаты по программе

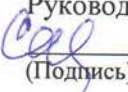
Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Применять глубокие естественно-научные, математические и инженерные знания для создания новых материалов
P2	Применять глубокие знания в области современных технологий химического производства для решения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

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки Химическая технология
 Отделение школы (НОЦ) Научно-образовательный центр Н.М.Кижнера

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

 16.05.19 Сарычева Т.А.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

Студенту:

Группа	ФИО
4ГМ71	Новикову Александру Станиславовичу

Тема работы:

Исследование люминесцентных свойств 3-нитроформазанов квантово-химическими методами	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	12.04.2019 №2849/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	01.06.2019 г.
--	---------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе <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>	Объект исследования – 3-нитроформазаны
--	--

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <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>	Аналитический обзор литературы Объекты и методы исследования Экспериментальные результаты и их обсуждение Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение Социальная ответственность Заключение по работе
Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i>	Графический материал полученных результатов

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы
(с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Подопригора Игнат Валерьевич, к.э.н., доцент отделения социально-гуманитарных наук
Социальная ответственность	Романова Светлана Владимировна, старший преподаватель отделения общетехнических дисциплин
Раздел на иностранном языке	Рыбушкина Светлана Владимировна, старший преподаватель отделения иностранных языков

Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:

На русском языке:

1.1 Коротко о люминесценции и электронных переходах, 1.2 Общие сведения о 3-нитроформазах, 1.3 Химические свойства 1,3,5-тризамещенных формазах, 1.4 Актуальные исследования 1,3,5-тризамещенных формазах, 1.4.1 Новый способ получения, 1.4.2 Использование комплексонов хиназолил-формаза-нового ряда для идентификации ионов Ni^{2+} , Pb^{2+} , Co^{2+} в семенах растений, 1.4.3 Фоторедокс превращения формазах и построение фотогальванической ячейки, 1.4.4 Новые сорбенты с иммобилизованными гетарилформаза-новыми группировками, 1.4.5 Комплексное исследование электронных состояний и спектров 3-нитроформазах, 1.5.1 Теория функционала плотности, 1.5.2 Обменно-корреляционный функционал B3LYP, 1.5.3 Временно-зависимая теория функционала плотности TDDFT, 1.5.4 Базисный набор

На английском языке:

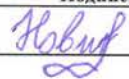
1.1 Briefly about luminescence and electronic transitions, 1.2 General information about 3-nitroformazans, 1.3 Chemical properties of 1,3,5-trisubstituted formazans, 1.4 Actual studies of 1,3,5-trisubstituted formazans, 1.4.1 New way of preparing 3-nitroformazans, 1.4.2 Use of quinazolyl-formazan complexones to identify Ni^{2+} , Pb^{2+} , Co^{2+} ions in plant seeds, 1.4.3 Photoreox transformation of formazans and photovoltaic cell construction, 1.4.4 New sorbents with immobilized hetarylformazan groups, 1.4.5 A comprehensive study of electronic states and spectra of 3-nitroformazans, 1.5.1 Density Functional Theory, 1.5.2 Exchange-correlation functional B3LYP, 1.5.3 Time-dependent density functional theory TDDFT, 1.5.4 Basic set

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	1.09.2018 г.
---	--------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заместитель директора по развитию ИШХБТ	Трусова М. Е.	д.х.н., доцент		1.09.2018

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ71	Новиков А.С.		1.09.2018

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
4ГМ71	Новикову Александру Станиславовичу

Школа	Инженерная школа новых производственных технологий	Отделение (НОЦ)	Научно-образовательный центр Н.М.Кижнера
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	Химическая технология/ Химия и технология биологически активных веществ

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Бюджет научного исследования составляет 133200 руб.</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды – 28%</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

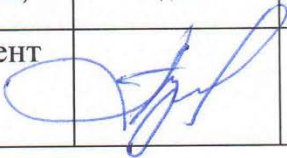
1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	<i>1.1 Потенциальные потребители результатов исследования</i> <i>1.2. Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i> <i>1.3 FAST – анализ</i> <i>1.4. SWOT – анализ</i> <i>1.5. Оценка готовности проекта к коммерциализации результатов научно-технического исследования</i>
2. <i>Разработка устава научно-технического проекта</i>	<i>2.1. Устав проекта</i> <i>2.2. Организационная структура проекта</i>
3. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	<i>- План проекта (календарный план НТИ)</i> <i>- Бюджет проекта исследования (планируемые затраты на выполнения НТИ)</i> <i>- Организационная структура проекта (выбор организационной структуры научного проекта)</i>
4. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	<i>4.1 Оценка сравнительной эффективности исследования</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

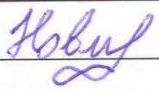
1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица смежности
3. Матрица SWOT
4. Оценка степени готовности проекта к коммерциализации
5. Организационная структура проекта
6. Календарный план-график проведения НИОКР
7. Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения социально-гуманитарных наук	Подопригора Игнат Валерьевич	к.э.н., доцент		16.05.2019

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ71	Новиков Александр Станиславович		16.05.2019

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
4ГМ71	Новиков Александр Станиславович

Школа	Инженерная школа новых производственных технологий	Отделение (НОЦ)	Научно-образовательный центр Н.М.Кижнера
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	Химическая технология/ Химия и технология биологически активных веществ

Тема ВКР:

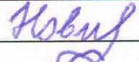
Исследование люминесцентных свойств 3-нитроформазанов квантово-химическими методами	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<i>Формазаны — группа органических соединений, которые активно используются в качестве фотофильтров, фундаментальное исследование которых принесет немало пользы научному сообществу</i>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	<i>Согласно статье 109 Трудового кодекса Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019)</i>
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	- Отклонение показателей микроклимата - Отсутствие или недостаток естественного и искусственного света - Повышенное воздействие электромагнитного излучения - Повышенное значение напряжения в электрической цепи
3. Экологическая безопасность:	— Никакой угрозы для экологии нет
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	— Замыкание в электропроводке с последующим возгоранием — Поражение работника электрическим током

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель отделения общетехнических дисциплин	Романова Светлана Владимировна			16.05.19

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ71	Новиков Александр Станиславович		16.05.19

Реферат

Выпускная квалификационная работа изложена на 80 с., содержит 13 рисунков, 33 таблицы, 33 источника литературы, приложение А.

Ключевые слова: люминесценция, флуоресценция, формазаны, 3-нитроформазаны, фотофизика.

Объект исследования: 3-нитроформазаны

Предмет исследования: Исследование люминесцентных свойств 3-нитроформазанов квантово-химическими методами

Цель работы – Изучение фотофизики 3-нитроформазанов с целью выявления причин отсутствия люминесценции.

В процессе работы проводились исследования как стационарных, так и возбужденных состояний 3-нитроформазанов. Была изучена геометрия, а также энергии электронных переходов и силы осцилляторов для 11 различных молекул. Рассчитаны радиационные константы электронного перехода и был сделан вывод, что основной канал деактивации возбужденной электронной энергии S_1 является внутренняя конверсия. Данный вывод верен для всей серии 3-нитроформазанов с учетом того, что природа электронных состояний и их энергии слабо зависят от электронной донорности и акцепторности заместителей.

Результаты исследования могут быть использованы для дальнейшего изучения 1,3,5 – тризамещенных формазанов с целью выявления люминесцентных свойств.

Выпускная квалификационная работа выполнена на базе НОЦ имени Н.М. Кижнера НИ ТПУ.

Руководитель: Заместитель директора по развитию ИШХБТ Трусова М. Е. д.х.н.

Выполнил: магистрант группы 4ГМ71 А.С. Новиков.

Условные обозначения и сокращения

МО – молекулярная орбиталь

HUMO – высшая свободная молекулярная орбиталь

LUMO – низшая свободная молекулярная орбиталь

АДТ – арендиазоний тозилаты

DFT – теория функционала плотности

TDDFT – временно зависящая теория функционала плотности

Содержание

	Введение	13
Глава 1	Литературный обзор	15
1.1	Коротко о люминесценции и электронных переходах	15
1.2	Общие сведения о 3-нитроформазах	16
1.3	Химические свойства 1,3,5-тризамещенных формазаов	17
1.4	Актуальные исследования 1,3,5-тризамещенных формазаов	18
1.4.1	Новый способ получения	18
1.4.2	Использование комплексоов хиазолил-формазаового ряда для идентификации ионов Ni^{2+} , Pb^{2+} , Co^{2+} в семенах растений	19
1.4.3	Фоторедокс превращения формазаов и построение фотогальванической ячейки	19
1.4.4	Новые сорбенты с иммобилизованными гетарилформазаовыми группировками	20
1.4.5	Комплексное исследование электронных состояний и спектров 3-нитроформазаов	21
1.5	Методы Расчета	22
1.5.1	Теория функционала плотности	22
1.5.2	Обменно-корреляционный функционал B3LYP	23
1.5.3	Временно-зависимая теория функционала плотности TDDFT	24
1.5.4	Базисный набор	24
Глава 2	Экспериментальная часть	25
2.1	Изучение геометрии молекул	25
2.2	Изучение фотофизики молекул	33
2.2.1	Исследование изомеров 1,5-(4-метоксифенил)-3-нитроформаза	34
Глава 3	Результаты и их обсуждение	36
3.1	Геометрия 3-нитроформазаов	36
3.2	Фотофизика 3-нитроформазаов	38
Глава 4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	40
4.1	Потенциальные потребители результатов исследования	40
4.2	Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	41

4.3	FAST-анализ.....	42
4.4	SWOT-анализ.....	43
4.5	Инициация проекта.....	44
4.6	Рабочая группа проекта.....	45
4.7	Планирование управления научно-техническим проектом.....	46
4.7.1	Организационная структура проекта.....	46
4.7.2	Контрольные события проекта.....	47
4.7.3	План проекта.....	47
4.8	Бюджет научного исследования.....	48
4.8.1	Сырьё и материалы.....	49
4.9	Оценка ресурсоэффективности.....	51
4.9.1	Оценка сравнительной эффективности исследования.....	51
Глава 5	Социальная ответственность.....	54
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	55
5.2	Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды.....	56
5.2.1	Отклонение показателей микроклимата.....	57
5.2.2	Отсутствие или недостаток естественного и искусственного света.....	58
5.2.3	Повышенное воздействие электромагнитного излучения	60
5.2.4	Повышенное значение напряжения в электрической цепи	62
5.3	Экологическая безопасность	63
5.4	Защита в чрезвычайных ситуациях	63
5.4.1	Оценка пожарной безопасности помещения	64
5.4.2	Мероприятия по устранению пожара	64
	Выводы	66
	Список публикаций студента	67
	Список используемых источников	68

Введение

Формазаы — группа органических соединений с общей формулой $R_1NH-N=CR_2-N=NR_3$. В последние годы данные вещества являются объектами многих исследований [1-8].

С химической точки зрения данные вещества интересны тем, что они подобно соединениям, имеющим в своей структуре ароматическое кольцо, обладают подвижной π -системой [4], склонны к таутомерным превращениям [5], а также могут быть использованы как модификаторы для сорбентов [6]. С физической же точки зрения формазаы интересны тем, что они способны генерировать заряды, а также их можно использовать в качестве фото- и термохромных материалов [7].

Кроме того, формазаы продолжают оставаться удобными моделями для изучения механизмов фото- и термохромных превращений в сложных органических системах, также с их помощью можно исследовать строение как свободных, так и координированных таутомерных лигандных хелатирующих комплексов, с их помощью решаются проблемы стабилизации необходимой формы лиганда за счет координации [5].

Задачи:

1. Изучить методы квантовой химии, в частности теорию функционала плотности.
2. Изучить влияние различных заместителей на электронные возбужденные состояния и люминесценцию данных молекул.
3. Изучить фотофизику и электронную спектроскопию 3-нитроформазаов.

Научная новизна

Проведены квантово-химические расчеты возбужденных электронных синглетных состояний S_1 , S_2 молекул 3-нитроформазапов с различными заместителями.

Показано, что основной канал деактивации возбужденной электронной энергии в электронных состояниях S_1 и S_2 является внутренняя конверсия с оценочной скоростью 10^{10} - 10^{12} с⁻¹ и $>10^{12}$ с⁻¹, соответственно.

Был сделан вывод, что введение различных электронодонорных или электроноакцепторных заместителей 3-нитроформазапы не оказывает влияние на способность флуоресценции, так как вся электронная энергия уходит по каналу внутренней конверсии.

Впервые изучена фотофизика и люминесцентные свойства 3-нитроформазапов.

Практическая значимость.

Благодаря изучению фотофизики и люминесцентных свойств различных молекул научная картина мира становится более ясной. Можно изучать как молекулы, которые уже обладают люминесценцией, с целью выявления её причин, так и наоборот, изучать молекулы ею не обладающие, с целью выявления причин её отсутствия. Так как в ходе данных исследований по всему миру образовывается научная база данных с различными классами молекул и их функциональными группами, то рано или поздно можно будет заранее предсказать какая молекула будет обладать люминесценцией, а какая нет. Тем самым химия, как наука, приблизится на шаг к своей главной задаче, а именно возможности получать вещества с заданными свойствами. Цель данной работы — это непосредственно внесение своей лепты в разрешение данной важнейшей химической задачи.

Глава 1. Теоретическая часть

1.1 Коротко о люминесценции и электронных переходах

Люминесценция – это излучение разнообразными частицами: атомами, молекулами, ионами, а также более сложными образованиями в ультрафиолетовой, инфракрасной и видимой областях электромагнитного спектра, которое возникает при переходе данных частиц из какого-либо возбужденного состояния в стационарное.

В спектроскопии поглощения и люминесценции имеются два основных типа орбиталей: низшая свободная молекулярная орбиталь (LUMO) и высшая занятая молекулярная орбиталь (HOMO). Данные типы орбиталей относятся к основному состоянию молекулы.

Когда один из двух электронов, обладающих противоположными спинами, переходит на молекулярные орбитали, которые обладают более высокими значениями энергии, то его спин не изменяется на противоположный, поэтому общее квантовое спиновое число продолжает оставаться равным нулю. Энергетические уровни, у которых мультиплетность как основного, так и возбужденного состояний равна 1, называются синглетными уровнями (обычно обозначаются как S_0 для основного состояния и S_1 , S_2 ... для возбужденных состояний). Данный тип перехода в квантовой механике называется синглет-синглетным. Кроме того, существует и другой тип электронного перехода, когда молекула из возбужденного синглетного состояния может перейти в такое состояние, когда электрон меняет спин на противоположный, и тогда уже два электрона имеют параллельные спины, и соответственно и их общее спиновое квантовое число будет равняться единице, тогда как мультиплетность будет равна трем. Такой тип энергетического состояния называется триплетным, поскольку он соответствует трем состояниям, которые равны по энергиям. В соответствии с правилом Хунда

синглетное состояние имеет более высокую энергию, чем триплетное состояние той же молекулы.

1.2 Общие сведения о 3-нитроформазах

Более 160 лет назад были синтезированы первые представители формазаов. Данный класс соединений смог привлечь внимание химиков в качестве прекурсоров для получения полиазотистых гетероциклов. С проявлением у формазаов металлохромных свойств стало возможно их использовать в качестве аналитических реагентов, комплексонов и красителей с большим спектром назначения. Более чем десять лет назад эти соединения стали достаточно доступными, что расширило границы их применения.

Возможность введения в структуру формазаов таких группировок, как краун-эфиры, поданды, различные фармакофорные, либо разнообразные комплексообразующие группы, с помощью которых становится возможным получать соединения с заданными свойствами. Кроме того, стоит отметить, что на основе формазаов получают твердофазные реагенты различного действия, химические и электрохимические сенсоры с целью осуществления контроля окружающей среды. Соединения данного класса представляют научный интерес как семейство особых лигандов, а именно π -сопряженных, хелатирующих, анионных и N-донорных. Соединения формазаов с металлами используются в качестве экологически безопасных красителей, в качестве компонентов оптических носителей записи, фото-, термочувствительных элементов, катализаторов повышенной активности. Металлокомплексы формазаов представляют научный интерес как молекулярные магнетики и кластеры оснований для дальнейшего роста металлопроката, сборки различных полимеров. [5].

1.3. Химические свойства 1,3,5-тризамещенных формазанов

В настоящий момент наиболее известны и изучены 1,3,5 – тризамещенные формазаны. Молекулы данных соединений находятся в таутомерных формах:

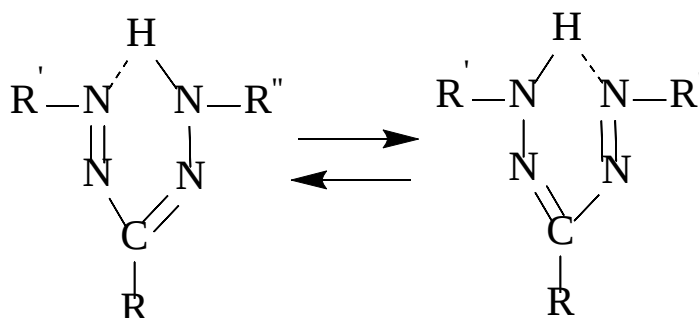


Рисунок 1 – Таутомерия 1,3,5 – тризамещенные формазанов

Эти вещества имеют тенденцию проявлять амфотерные свойства. 1,5-диарилформазаны, например, из-за того, что азот-водородные связи склонны давать протон, имеют слабо кислотные свойства, однако, когда они находятся в сильно кислых средах, наличие неподеленной пары электронов на атоме азота приводят к протонированию формазанов, и они уже проявляют себя как основания.

Одной из важнейших реакций 1,3,5 - тризамещенных формазанов является реакция с образованием солей тетразолия. Когда соли тетразолия восстанавливаются амальгамой Al и пропиофеноном в основных и кислых средах, образуются свободные радикалы - тетразолилы.:

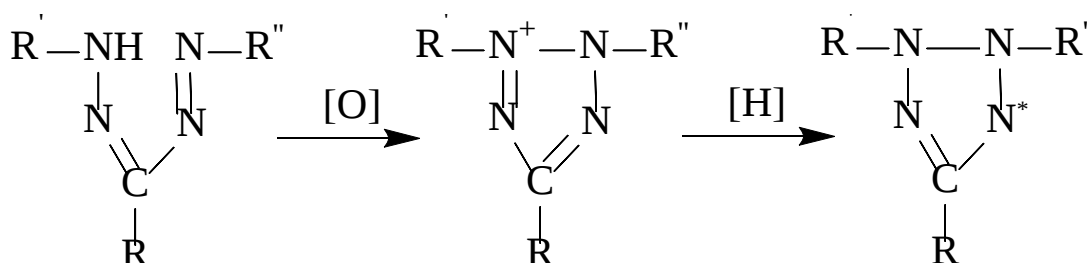


Рисунок 2 – Образование тетразолилов

1,3,5-Тризамещенный формазан алкилируется с образованием N-алкил (арил) производных. Формазаны, замещенные в положении 3 на Cl, Br, NO₂,

реагируют с нуклеофильными реагентами, давая соответствующие продукты замещения [9].

1.4 Актуальные исследования 1,3,5-тризамещенных формазанов

Так как в положения 1,3,5 можно включить множество различных функциональных групп, то свойства и области применения этих формазанов будут кардинально отличаться друг от друга. Далее будут приведены некоторые области применения в актуальных научных исследованиях.

1.4.1 Новый способ получения

3-Нитроформазаны являются одним из наиболее распространённых производных формазанов, обладающих широкими препаративными возможностями и представляющими интерес как аналоги дикетиминовых лигандов для металлов.

Классическим методом синтеза 3-нитроформазанов является взаимодействие диазониевых солей с нитрометаном в щелочной среде. В Национальном исследовательском Томском политехническом университете было показано, что АДТ способны взаимодействовать с нитрометаном в водных средах в присутствии оснований с образованием, соответствующих 3-нитроформазанов с высокими выходами:

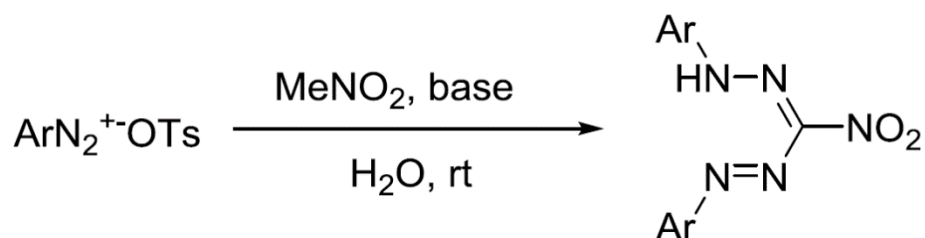


Рисунок 3 – Получение 3-нитроформазанов

Реакция заключалась в порционном добавлении АДТ к смеси нитрометана и соответствующего основания в водной среде. Стоит отметить, что 3-нитроформазаны образовывались как окрашенные кристаллические

осадки, отделялись простым фильтрованием и не нуждались в дополнительной очистке.

Разработанный метод позволяет синтезировать формазаны как с донорными, так и с акцепторными заместителями, что делает его наиболее универсальным из известных [1].

1.4.2 Использование комплексонов хиназолил-формазанового ряда для идентификации ионов Ni^{2+} , Pb^{2+} , Co^{2+} в семенах растений

Несмотря на большое разнообразие природных соединений, которые образуют комплексы с тяжелыми металлами, количество функциональных групп, которые непосредственно координируются с Pb^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} в природных объектах, невелико. Хорошо окрашенные стабильные комплексы образуются при взаимодействии тяжелых металлов с формазанами.

Обработка зерен злаков формазаном позволяет при гистохимическом исследовании долгоносика обнаруживать локализацию тяжелых металлов в его периферических частях путем характерного окрашивания тканей.

Микроскопические исследования показали, что комплексы с никелем и кобальтом в основном расположены в межклеточных пространствах, через которые транспортируются ионы. Комплексы свинца более равномерно распределены по краям долгоносика, они находятся в оболочках и клетках алейронового слоя. Это свидетельствует как о сорбции ионов структурными полисахаридами матрицы клеточной стенки, так и об их локализации в вакуолях и других клеточных структурах. [2].

1.4.3 Фоторедокс превращения формазанов и построение фотогальванической ячейки

Фотофизический переход солнечной энергии в электрическую максимально эффективно осуществляется на сегодняшний день в

полупроводниковых преобразователях на основе p-p переходов на границе контакта двух полупроводников.

На кафедре химической технологии органических красителей и фототропных соединений Санкт-Петербургского Технологического института была изучена возможность прямого преобразования солнечного света непосредственно в электрическую энергию при участии формазанов.

Формазан при нахождении в органической фазе, поглощает квант солнечного света и переходит из стационарного в возбужденное состояние, в котором взаимодействует с хиноном. В результате данного взаимодействия образуется отрицательно заряженная восстановленная форма хинона X^- и положительно заряженная соль тетразолия T^+ , которую поглощает вода. Учитывая всё вышеизложенное, в органической фазе накапливается электронодонор X^- , а в водной фазе – электроноакцептор T^+ . По мере увеличения их концентраций начинается разряд анионов на аноде в органической фазе и катионов на катоде в водной фазе, в итоге данный электронный цикл замыкается, и система возвращается в первоначальное состояние.

Перспективы совершенствования подобного рода фотогальванических ячеек весьма велики, так как солнечный свет непосредственно преобразуется в электрический ток [4].

1.4.4 Новые сорбенты с иммобилизованными гетарилформазановыми группировками

Установлено, что модификация минеральной матрицы силикагеля бензозалилформазановыми группами приводит к изменению состава и структуры твердофазного носителя, а также вследствие действия различных конкурирующих факторов (стерические требования к заместителям в молекуле формазана, химическое взаимодействие иммобилизованных групп с силикагелем) способствует реализации определенной формы

иммобилизованного реагента. Таким образом, 1- (4-сульфофенил) замещенные формазаны «фиксированы» в неионизированной форме, а 1- (2-гидрокси-5-сульфофенил) формазаны находятся в частично ионизированной форме в форме гидразона хинона. Выявленные особенности конфигурации иммобилизованных функциональных групп важны для синтеза модифицированных материалов с заданными свойствами и их практического применения в сорбционно-хроматографических (сорбционно-аналитических) процессах. [6].

1.4.5 Комплексное исследование электронных состояний и спектров 3-нитроформазанов

Известно, что формазаны в видимой области электронного спектра имеют интенсивные полосы поглощения. Ранее было показано, что первая интенсивная полоса в области 500 нм, обусловлена двумя электронными переходами: $\sigma \rightarrow \pi^*$ и $\pi \rightarrow \pi^*$ [8]. Первый электронный переход ($S_0 \rightarrow S_1$) имеет почти нулевую силу осциллятора в силу того, что перекрывание между σ -молекулярной орбиталью (МО) и π -МО почти нулевое, а второй электронный переход ($S_0 \rightarrow S_2$) имеет природу $\pi \rightarrow \pi^*$ и поэтому является сильно разрешенным в связи с сильным перекрыванием π -МО и π^* -МО. Таким образом, если предположить, что первый электронный переход ($S_1 \rightarrow S_0$) в равновесной геометрии S_1 имеет также природу $\sigma \rightarrow \pi^*$, то вероятность излучения фотона из электронного состояния S_1 будет нулевой. Данное предположение было подтверждено полученными экспериментальными данными, согласно которым 3-нитроформазаны не проявили люминесцентных свойств. Тем не менее, детальное исследование фотофизических свойств 3-нитроформазанов не проводилось до настоящего времени. Известные литературные данные показывают, что все 3-нитроформазаны находятся в TSSC (*trans-syn, s-cis*) конформации и не могут люминесцировать, однако было обнаружено, что 1,5-(4-метоксифенил)-3-нитроформазан может иметь другой стабильный изомер -

TASC (*trans-anti, s-cis*), где $S_0 \rightarrow S_1$ имеет силу осциллятора ($f=0.06$) и уже не является чисто $\sigma \rightarrow \pi^*$ [8]. Кроме того, у данного 3-нитроформазана существует, по крайней мере, один изомер – TAST (*trans-anti, s-trans*) у которого $S_0 \rightarrow S_1$ есть $\pi \rightarrow \pi^*$ т.е. является разрешенным, а $S_0 \rightarrow S_2$ имеет природу $\sigma \rightarrow \pi^*$. В связи с этим целью настоящей работы является детальное исследование фотофизических свойств 3-нитроформазанов с различными электронодонными и электроноакцепторными заместителями.

1.5 Методы расчета

1.5.1 Теория функционала плотности

В настоящее время наиболее популярным методом, используемым для изучения спектральных характеристик больших молекул (содержащих более 30 атомов), является метод теории функционала плотности (DFT). Его популярность объясняется тем, что его использование не требует больших компьютерных затрат, а результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными. Точность определения равновесной геометрии молекулы играет важную роль в расчете энергий возбужденных состояний, поскольку для характеристики электронного спектра поглощения молекулы необходимо рассчитать энергии электронных переходов, которые рассчитываются в геометрии основного состояния [11].

Традиционный DFT в формулировке Кона-Шама определяется теоремами Хоэнберга-Кона и существованием системы невзаимодействующих частиц, плотность электронов которой идентична плотности электронов реальной системы взаимодействующих частиц. Первая теорема Хоэнберга - Кона устанавливает взаимно-однозначное соответствие между точной электронной плотностью $\rho(\mathbf{r})$ и точным внешним потенциалом $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$. Поскольку внешний потенциал определяет точную волновую функцию основного состояния $\Psi(\mathbf{r})$, можно сделать вывод, что точная волновая функция

основного состояния является функционалом электронной плотности. Вторая теорема Хоэнберга-Кона гарантирует существование вариационного принципа, согласно которому рассчитанная энергия электронов системы с пробной электронной плотностью всегда выше, чем полная энергия, полученная с точной электронной плотностью. Обе теоремы Хоэнберга-Кона позволяют нам построить теорию многих тел, которая использует электронную плотность в качестве основной величины для расчетов. Использование того факта, что электронная плотность основного электронного состояния системы невзаимодействующих электронов (определяемая одним детерминантом Слейтера) точно равна электронной плотности реальной системы, приводит к уравнению Кона-Шама:

$$E[v] = \sum_{i=1}^N -\frac{1}{2} \int \psi_i^*(r) \nabla^2 \psi_i(r) + \int d^3r p(r) v(r) + \frac{1}{2} \int p(r) p(\hat{r}) w(|r - \hat{r}|) + E_{xe}[p]$$

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_s(r) \right] \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r), \text{ где } p(r) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(r)|^2$$

Результирующая плотность электронов в результате решения может быть использована для расчета полной энергии системы.

1.5.2 Обменно-корреляционный функционал B3LYP

Равновесная геометрия крупных молекул (включая формазаны), полученная с помощью метода теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP, дает хорошее согласие с экспериментальными данными, в частности с рентгеновскими измерениями [8]. Вкратце это можно описать следующим образом. B3 — это трехкомпонентный обменный корреляционный функционал Бекке, который использует 3 параметра для смешивания в точной обменной корреляции Хартри-Фока и LYP - корреляционный функционал Ли Янга и Парра, который восстанавливает

динамическую электронную корреляцию. B3LYP обычно быстрее, чем большинство методов после Хартри-Фока, и обычно дает сопоставимые результаты.

1.5.3 Временно-зависимая теория функционала плотности TDDFT

В задачах, связанных с вычислениями для возбужденных электронных состояний молекул, необходимо использовать временно-зависимую теорию функционала плотности (TDDFT). Она базируется на теоремах Рунге-Гросса, которые являются обобщением теорем Хоэнберга-Кона для нестационарной электронной плотности. TDDFT является квантово-механической теорией, используемой в физике и химии для исследования свойств и динамики систем многих тел в присутствии, зависящих от времени потенциалов, таких как электрические или магнитные поля. Влияние таких полей на молекулы и твердые вещества может быть изучено с помощью TDDFT для извлечения таких характеристик, как энергии возбуждения, частотно-зависимые характеристики отклика и спектры фотопоглощения [10].

1.5.4 Базисный набор

Чтобы описать поведение радикалов и молекул, когда электроны могут значительно отойти от центра заряда, необходимо ввести так называемые диффузные функции с малыми значениями экспоненциальных коэффициентов. Базисный набор 6-31G ** или 6-31G (d, p) обозначает базисный набор 6-31G с добавлением поляризационных функций d-типа к тяжелым атомам (атомный номер больше 2) и поляризацией p-типа функции легких атомов (водорода и гелия). Данный базис хорошо зарекомендовал себя при изучении спектров поглощения 3-нитроформазанов [8], поэтому он будет использоваться в данной работе.

Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

На сегодняшний день перспективы научных исследований определяются не столько тем, насколько велики масштабы открытий, которые сложно оценить на ранних этапах жизненного цикла высокотехнологичного и ресурсоэффективного продукта, сколько коммерческой ценностью разработки. Оценка коммерческого потенциала разработки является обязательным условием при поиске источников финансирования исследований и коммерциализации его результатов.

Коммерческая привлекательность научных исследований определяется не только превышением технических параметров над предыдущими разработками, но и тем, насколько быстро разработчик сможет найти ответы на такие вопросы - будет ли продукт востребован на рынке, чем он стоимостью будет удовлетворять потребителя, каков бюджет исследовательского проекта, как долго выходить на рынок и т. д.

Таким образом, целью раздела «Финансовое управление, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является определение перспектив и успеха исследовательского проекта, разработка механизма управления и поддержка конкретных проектных решений на этапе реализации.

4.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Чтобы проанализировать результаты исследования потребителей, необходимо изучить целевой рынок и провести его сегментацию.

Поскольку суть этой работы заключается в фундаментальном научном исследовании, которое проводится с помощью квантово-химических методов исследования на персональном компьютере, к целевому рынку можно отнести только научное сообщество, которое может быть заинтересовано в этой работе.

Таким образом, были определены заинтересованные стороны данного исследования, и в дальнейшем оно будет целесообразно обсуждаться по сравнению с аналогичными исследованиями, проводимыми на дорогостоящем оборудовании.

4.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Детальный анализ конкурирующих событий, существующих на рынке, должен проводиться систематически, поскольку рынки находятся в постоянном движении. Этот анализ был проведен с помощью оценочной карты, таблица 14. Она содержит оценочные баллы для двух подходов к изучению этих объектов. К1, К2 - конкурентоспособность соответствующих методик. Где 1 - наше исследование, проведенное с использованием квантово-химических методов исследования на персональном компьютере, а 2 - исследование на специализированном оборудовании.

Таблица 14 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы		Конкурентоспособность	
		Б1	Б2	К1	К2
Критерии оценки эффективности					
1. Точность выходных данных	0,1	4	5	0,4	0,5
2. Время работы	0,05	3	3	0,15	0,15
3. Наглядность выходных данных	0,05	5	4	0,25	0,2
4. Простота обработки данных	0,05	4	3	0,2	0,15
5. Экономичность исследования	0,75	5	1	3,75	0,75
Итого	1	21	16	4,75	1,75

Позиция разработчика и конкурента оценивается по каждому показателю экспертом по пятибалльной шкале, где 1 - самая слабая позиция, а 5 - самая сильная. Веса показателей, определяемых экспертом в сумме, должны составлять 1.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i, \quad (2)$$

Где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

Таким образом, мы имеем общий показатель конкурентоспособности для приведенных показателей наших разработок в 4,75 и 1,75 для другого метода анализа, что указывает на наличие явных преимуществ наших разработок и, следовательно, их конкурентоспособности.

4.3 FAST-анализ

FAST анализ выступает в качестве синонима для анализа стоимости.

FAST анализ включает в себя шесть этапов:

- выбор объекта FAST анализа;
- описание основных, основных и вспомогательных функций, выполняемых объектом;
- определение значимости функций, выполняемых объектом;
- анализ затрат на функции, выполняемые объектом исследования;
- построение функциональной схемы затрат объекта и его анализ;
- оптимизация функций, выполняемых объектом.

Рассмотрим реализацию каждого этапа в деталях.

Этап 1. Выбор объекта FAST анализа.

В рамках магистерской диссертации объект исследования служит объектом FAST-анализа.

Этап 2. Описание основных, основных и вспомогательных функций, выполняемых объектом.

Чтобы облегчить процесс идентификации и классификации функций метода исследования, рекомендуется сначала описать основную функцию

объекта исследования (метода), затем выбрать элементы, его формирующие, и описать все функции, выполняемые этими элементами. Вся информация, полученная в ходе реализации этого этапа, должна быть представлена в табличной форме (Таблица 15).

Таблица 15 – Классификация функций, выполняемых в рамках методики исследования

Наименование детали (узла, процесса)	Кол-во деталей на узел	Выполняемая функция	Ранг функции		
			Главная	Основная	Вспомогательная
Персональный компьютер	1	Обеспечивает получение, обработку и представление в данных в презентабельном виде	X		
Программное обеспечение	1	Позволяет непосредственно проводить необходимые квантово-химические исследования	X		

В таблице приведены все детали, узлы, процессы, используемые внутри метода с описанием функций и их рангов.

4.4 SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – это комплексный анализ исследовательского проекта. SWOT-анализ используется для изучения внешней и внутренней среды проекта. Это проводится в несколько этапов. Первый этап — это описание сильных и слабых сторон проекта, выявление возможностей и угроз для проекта, которые возникли или могут появиться во внешней среде. Давайте дадим интерпретацию каждого из этих понятий. Рекомендуется, чтобы результаты первого этапа SWOT-анализа были представлены в виде таблицы (таблица 16).

Таблица 16 – Матрица SWOT

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Экологичность технологии С2. Более низкая стоимость исследования по сравнению с другими С3. Квалифицированный персонал	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Необходимость самостоятельной обработки данных Сл2. Недостаток литературных данных по данному проекту
Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Появление спроса на продукт	С1. Значительная экономия средств за счет моделирования процесса С2. Новейшее исследование, которое в дальнейшем будет весьма востребовано	Сл1. Отсутствие некоторых необходимых оборудования для проведения опытов Сл2. Не до конца изучен данный метод исследования
Угрозы: У1. Отсутствие спроса на данное исследование У2. Быстрая потеря актуальности данной работы из-за быстрого технологического прогресса	С1. Исследование квантово-химическими методами снимает необходимость покупки сырья и синтеза объектов исследования С2. Снижение зависимости от внешних рынков	Сл1. Отсутствие рекламы на данный продукт Сл2. Недостаточная прибыль

4.5 Инициация проекта

Группа процессов инициации состоит из процессов, которые выполняются для определения нового проекта или нового этапа существующего. В рамках процессов инициации определяются первоначальные цели и содержание и регистрируются первоначальные финансовые ресурсы. Определяются внутренние и внешние заинтересованные стороны проекта, которые будут взаимодействовать и влиять на общий результат исследовательского проекта. Эта информация зафиксирована в Уставе проекта.

Устав проекта документирует потребности бизнеса, текущее понимание потребностей заказчика проекта, а также новый продукт, услугу или результат, который планируется создать.

Устав научного проекта магистерской работы имеет следующую структуру:

1. Цели и итоги проекта. Информация о заинтересованных сторонах проекта представлена в таблице 17.

Таблица 17 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидание заинтересованных сторон проекта
Министерство науки и образования РФ	Выполнения контрактных обязательств

В таблице 18 представлена информация об иерархии целей проекта и критериях достижения целей.

Таблица 18 – Цели и результат проекта

Цели проекта	Изучение фотофизических свойств 3-нитроформазанов с помощью квантово-химических методов анализа с целью выявления причин отсутствия у данных веществ люминесценции.
Ожидаемые результаты проекта:	Получение выходные данные, которые дадут ответы на поставленные вопросы
Критерии приемки результата проекта:	Получение значения энергии электронных переходов и сил осцилляторов, объясняющих механизм
Требования к результату проекта:	Должны быть проведены квантово-химические расчеты возбужденных электронных синглетных состояний S_1 , S_2 ; Показать основной канал дезактивации энергии; Низкая трудозатратность синтеза

4.6 Рабочая группа проект

На данном этапе работы необходимо описать: кто входит в рабочую группу данного проекта, определить роль каждого участника в данном проекте, а также прописать функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте. Эту информацию представить в табличной форме (табл. 19).

Таблица 19 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, час.
1	Валиев Рашид Ринатович, консультант	Руководитель	Постановка задачи	20
1	Новиков Александр Станиславович, магистрант НОЦ Кижнера	Исполнитель проекта	Реализация проекта	20
ИТОГО:				20

К реализации исследовательского проекта привлечен ряд специалистов:

- Руководитель проекта - отвечает за реализацию проекта в указанных пределах ресурсов, координирует деятельность участников проекта. В связи с этим руководитель магистерской диссертации.

- Подрядчик проекта - специалист, который выполняет индивидуальную работу над проектом. В случае выполнения магистерской работы научным сотрудником - исполнителем проекта является аспирант. Если магистерская работа является частью научного проекта, может быть несколько исполнителей.

4.7 Планирование управления научно-техническим проектом

4.7.1 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 12.



Рисунок 12 – Организационная структура проекта

4.7.2. Контрольные события проекта

В рамках данного раздела необходимо определить ключевые события проекта, определить их даты и результаты, которые должны быть получены по состоянию на эти даты. Эта информация представлена в таблице 20.

Таблица 20 – Контрольные события проекта

№	Контрольное событие	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	Обсуждение плана проекта	01.09.18	Утверждение участников исследования
2	Литературный анализ статей	14.10.18	Отчет по изученной литературе
3	Собеседование с руководителем обсуждения всей имеющей информации	16.10.18	Предварительные условия определения
4	Подбор рабочих условия для проведения исследования	19.10.18-15.02.19	Отчет о проделанной работе
5	Обработка и обсуждение полученных результатов, корректировка	20.03.19	Отчет
6	Оформление отчетов, представление результатов на конференциях, подготовка к защите	31.05.19	Отчет, сертификаты из конференции
7	Защита магистерской диссертации	17.06.19	Диплом

4.7.3 План проекта

В рамках планирования научного проекта необходимо построить календарный график проекта (табл. 21).

Таблица 21 – Календарный график проекта.

Код	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
1	1.Обсуждение плана проекта	11	01.09.18	12.09.18	Новиков А.С., Валиев Р.Р.
2	Литературный анализ статей	30	14.09.18	14.10.19	Новиков А.С., Валиев Р.Р.
3	Подготовка необходимого оборудования	2	15.10.18	16.10.18	Новиков А.С., Валиев Р.Р.
4	Собеседование с руководителем, обсуждение всей имеющейся информации	1	16.10.18	16.10.18	Новиков А.С., Валиев Р.Р.
5	Описание полученных результатов, корректировка	34	15.02.19	20.03.19	Новиков А.С., Валиев Р.Р.
6	Отчет по исследовательской работе	71	21.03.19	31.05.19	Новиков А.С.
7	Защита магистерской диссертации	20	01.06.19	17.06.19	Новиков А.С.
	ИТОГО	169			

Диаграмма Ганта представляет собой вид гистограмм (гистограмм), который используется для иллюстрации графика проекта, где работа над темой представлена длинными сегментами, характеризующимися датами начала и окончания этих работ.

Таблица 22 – Календарный план-график проведения НИОКР.

№	Исполнитель	Кол-во дней	Продолжительность работ									
			сентябрь	октябрь	ноябрь	декабрь	январь	февраль	март	апрель	май	июнь
1	Новиков А.С., Валиев Р.Р.	11										
2	Новиков А.С.	30										
3	Новиков А.С., Валиев Р.Р.	2										
4	Новиков А.С., Валиев Р.Р.	1										
5	Новиков А.С.	34										
6	Новиков А.С.	71										
7	Новиков А.С., Валиев Р.Р.	20										
	Итого	169										

-магистрант
 -руководитель

4.8 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета исследований должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов запланированных расходов, необходимых для его реализации. В процессе бюджетирования затраты группируются по пунктам, представленным в таблице 23.

Таблица 23 – Сырье и материалы.

Наименование	Марка, ТУ, ГОСТ	Кол-во	Цена за ед., руб., с НДС	Сумма, руб.
Сырье и реагенты				
Ноутбук Lenovo V130-14IKB, 81HQ00E9RU, 14", темно-серый		1 шт	30000	30000
Лицензия Gaussian 09 на 1 год		1 шт	5000	5000
Итого по статье C1.				35000

4.8.1 Сырье и материалы

В эту статью включена стоимость покупки всех видов материалов, комплектующих и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по данной теме. Количество необходимых материальных ценностей определяется нормами расхода.

Также в данную статью расходов включили затраты на электроэнергию, согласно действующему тарифу (3,42 руб. за 1 кВт/ч).

А) Расход электроэнергии в месяц для ноутбука составляет 14 кВт/мес

Длительность использования: 4 месяца

$$E = 14 * 4 = 56 \text{ кВт.}$$

Общая сумма затрат на электроэнергию составляет:

$$C_{\text{эл}} = 56 * 3,42 = 191,52 \text{ руб.}$$

Итого расходы по материалам:

$$C_1 = C_{\text{м}} + C_{\text{эл}} = 35000 + 191,52 = 35191,52 \text{ руб.}$$

Расчет основной заработной платы

В работе над проектом принимало участие 2 человека: студент-магистрант и руководитель проекта.

Оплату труда студента-магистранта в форме стипендии рассчитывали за период с 01.2019 по 05.2019 год (работа над проектом) по установленной в учебном договоре ставке 3000 руб./месяц: $5 \times 3000 = 15000$ руб.

Зарплата руководителя рассчитывалась за весь период работы над проектом (с января по май 2019 года).

Согласно числу трудодней и таблице окладов ППС и НС (приложение к приказу ректора ТПУ), а также с учетом должностей исполнителей и утвержденными для указанных должностей размерами оклада, оплата труда руководителя составила:

Руководитель проекта – 0,5 ставки ассистента, к.ф.м.н

Оклад (1 месяц) = 10000 руб.

Зарплата за исчисленный период: $10000 \text{ руб.} \times 5 \text{ мес.} = 50000 \text{ руб.}$

С учетом Районного коэффициента: $50000 \times 1,3 = 65000 \text{ руб.}$

Сумма расходов по оплате труда сотрудников составила

$$65000 + 15000 = 80000 \text{ руб.}$$

Таблица 24 – Расчёт основной заработной платы с января по май

Исполнители	Зб, руб.	к _р	Змес, руб	Зосн, руб.
Руководитель	10000	1,3	130000	100000
Магистрант			3000 _{стип.}	15000

Социальный налог на сотрудников (за исключением магистранта) равен 28 % от сумм заработной платы:

$$65000 \times 0,28 = 18200 \text{ руб.}$$

Таблица 25 – Отчисления на социальные нужды

	Руководитель	Магистрант
Зарплата	65000	15000
Отчисления на соц. нужды	18200	

Общая сумма расходов по оплате труда составила:

$$C_2 = 65000 + 15000 + 18200 = 98200 \text{ руб.}$$

Таблица 26 – Бюджет научного исследования

№	Наименование	Сумма
1	Сырье, оборудование и электроэнергия	35191,52

2	Заработная плата	98200
Итого		133391,52

Итоговая сумма расходов по исследовательскому проекту выглядит следующим образом:

$$C_{\Sigma} = C_1 + C_2 = 35191,52 + 98200 = 133391,52 \text{ Руб.}$$

4.9 Оценка ресурсоэффективности

Для оценки социальной эффективности научного проекта мы оценили предположительную степень влияния реализации проекта на различные критерии социальной эффективности.

Таблица 27 – Критерии социальной эффективности.

ДО	ПОСЛЕ
Необходимость покупать дорогостоящее оборудование в дорогостоящую лабораторию для изучения фотофизики материалов	Возможность с достаточной точностью решать данные задачи с помощью квантово-химических методов анализа
Необходимость нанимать внушительный перечень сотрудников, работу которых нужно также оплачивать	Возможность решение данных задач с помощью одного человека и одного ПК

Также провели сравнительную оценку эффективности метода-разработок в сравнении с уже указанным аналогом, таблица 27 и выявили потенциальную конкурентоспособность наших разработок на рынке в будущем.

4.9.1 Оценка сравнительной эффективности исследования

Таблица 28 – Группировка затрат по статьям аналогов разработки

Вариант исполнения аналога №	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	Основная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Итого плановая себестоимость
1	0	35000	80000	18200	133200
2	10000	700000	350000	54600	1114600

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\max}} \quad (3)$$

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

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

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

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

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

$$I_m^a = \sum_{i=1}^n a_i b_i^a, \quad I_m^p = \sum_{i=1}^n a_i b_i^p, \quad (4)$$

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

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

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности рекомендуется проводить в форме таблицы, пример которой приведен ниже.

Таблица 29 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта.

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1
1. Способствует росту производительности труда пользователя	0,1	5	4
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	4	3
3. Помехоустойчивость	0,15	5	4
4. Энергосбережение	0,20	5	4
5. Надежность	0,25	5	5

6. Материалоемкость	0,15	1	2
ИТОГО	1	25	22

$$I_m^P = 5 \times 0,1 + 4 \times 0,15 + 5 \times 0,15 + 5 \times 0,20 + 5 \times 0,25 + 1 \times 0,15 = 4,25$$

$$I_1^A = 4 \times 0,1 + 3 \times 0,15 + 4 \times 0,15 + 4 \times 0,20 + 5 \times 0,25 + 2 \times 0,15 = 3,8$$

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволяет судить о приемлемости существующего варианта решения поставленной, в магистерской диссертации, технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

Глава 5. Социальная ответственность

Научная работа проводилась в комнате общежития №16 Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Магистерская диссертация связана с изучением фотофизических свойств 3-нитроформазанов квантово-химическими методами.

В качестве объектов исследования нами выбраны 1,5-замещенные-3-нитроформазаны, содержащие в структуре как донорные, так и акцепторные заместители. Все 3-нитроформазаны были получены по ранее разработанному методу [8], причем люминесцентные свойства данных формазанов были исследованы впервые.

Равновесные геометрии электронных состояний S_1 и S_2 были оптимизированы методом временно-зависимой теории функционала плотности (TDDFT) с обменно-корреляционным функционалом B3LYP и базисным набором 6-31G(d,p). Для каждого случая были вычислены энергии и силы осцилляторов деактивационных электронных переходов $S_1 \rightarrow S_0$, $S_2 \rightarrow S_0$. Для незамещенного 3-нитроформазана были вычислены также энергии триплетных электронных состояний в геометрии S_1 . Далее для данного 3-нитроформазана были вычислены фотофизические константы скоростей электронных переходов, такие как внутренняя и интеркомбинационная конверсии.

Благодаря изучению фотофизики и люминесцентных свойств различных молекул научная картина мира становится более ясной. Можно изучать как молекулы, которые уже обладают люминесценцией, с целью выявления её причин, так и наоборот, изучать молекулы ею не обладающие, с целью выявления причин её отсутствия. Так как в ходе данных исследований по всему миру образовывается научная база данных с различными классами молекул и их функциональными группами, то рано или поздно можно будет заранее предсказать какая молекула будет обладать люминесценцией, а какая нет. Тем самым химия, как наука, приблизится на шаг к своей главной задаче, а именно возможности получать вещества с заданными свойствами. Цель

данной работы — это непосредственно внесение своей лепты в разрешение данной важнейшей химической задачи.

В данном разделе рассматриваются вопросы охраны труда и техники безопасности, связанные с работой в жилом помещении, а также разрабатываются мероприятия по предотвращению воздействия на здоровье жильцов опасных и вредных факторов.

5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Сотруднику, постоянно работающему за компьютером, очень нелегко долгое время концентрировать взгляд на экране монитора. Устают глаза, шея, спина, затекают ноги. Для предотвращения негативных последствий воздействия на организм необходимо делать перерывы в работе. Законодательно установление перерывов закреплено в статье 109 Трудового Кодекса РФ. Правда, указано, что виды работ, предусматривающих предоставление работникам в течение рабочего времени специальных перерывов, а также их продолжительность устанавливаются правилами внутреннего трудового распорядка.

Однако, по типовой инструкции по охране труда при работе на персональном компьютере ТОО Р-45-084-01 всё же вменяется установление перерывов. В целом продолжительность непрерывной работы за компьютером не должна превышать 2-х часов.

Обращаем внимание, что основная работа за компьютером предусматривает не менее 50 % времени в течение рабочей смены или рабочего дня нахождения за ним. Время перерыва зависит от вида и сложности осуществляемой работы путем деления на группы. Выделяют 3 группы: А (работа по считыванию информации с экрана компьютера с предварительным запросом), Б (работа по вводу информации), В (творческая работа в режиме диалога с компьютером).

В зависимости от сложности работы установление числа и длительности перерывов происходит следующим образом:

- для группы А (не свыше 60000 считываемых знаков за смену) перерыв составляет 15 минут, предоставляется два раза – через два часа после начала работы и перерыва на обед;
- для группы Б (не свыше 40000 вводимых знаков за смену) перерыв составляет 10 минут через каждый трудовой час;
- для группы В (не свыше шести 6 часов за смену) перерыв составляет 15 минут через каждый трудовой час.

Если рабочая смена длится 12 часов, время регламентированных перерывов при работе на компьютере за 8 часов работы предоставляется в вышеуказанном порядке, а за оставшиеся 4 часа – 15 минут за каждый час (вне зависимости от категории).

Во время перерывов следует выполнять специальную гимнастику для снятия напряжения с глаз. Рекомендуемый комплекс упражнения представлен в Приложении 8 к СанПиНу 2.2.2/2.4.1340-03. Выполнять какую-либо работу, не связанную с компьютером, во время перерыва нельзя. Потому как перерыв приравнивается к времени отдыха. А в соответствии со ст. 106 ТК РФ время отдыха — это свободное от исполнения трудовых обязанностей время, которое работник может использовать по своему усмотрению.

Поскольку вышеизложенные условия для безопасного выполнения данной работы выполняются, то условия труда являются более чем удовлетворительными.

Производственная безопасность

5.2 Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды

Производственная безопасность определяется как комплекс мероприятий по обеспечению безопасности в случае возникновения опасных факторов и включает в себя электробезопасность, безопасную эксплуатацию оборудования, безопасное протекание технологических процессов. Согласно ГОСТ 12.0.003 – 2015 [22] приведена классификация вредных и опасных факторов, выявленные в ходе выполнения работ по методикам. Результаты представлены в виде таблицы 30.

Таблица 30 – Классификация вредных и опасных факторов

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Расчет	Обработка данных	Получение результатов	
1. Отклонение показателей микроклимата	+	+	+	Гост 12.1.005-88 Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны.
2. Отсутствие или недостаток естественного света	+	+	+	СанПиН 2.2.2.542-96 Гигиенические требования к видеодисплейным терминалам, персональным электронно-вычислительным машинам и организации работ.
3. Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	+	СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95.
4. Повышенное воздействие электромагнитного излучения	+	+	+	СанПиН 2.2.4/2.1.8.055-96. Электромагнитные излучения радиочастотного диапазона (ЭМИ РЧ).
5. Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека	+	+	+	Санитарные правила и нормы Федеральный закон "Технический регламент о требованиях пожарной безопасности" от 22.07.2008 N 123-ФЗ

5.2.1 Отклонение показателей микроклимата

В жилых помещениях для соблюдения специальных норм микроклимата предусмотрены следующие в соответствии с СанПиНом 2.2.4.548-96 [23] и ГОСТ 12.1005 – 88 (2000) [24] («Общие санитарно-

гигиенические требования к воздуху рабочей зоны»): помещения оснащены, устройством для отопления; используется теплоизоляционные материалы (асбест);

Согласно нормативным документам [22] описанная работа относится к категории 1а относятся работы с интенсивностью энерготрат до 120 ккал/ч (до 139 Вт). Поэтому в жилых помещениях создаются оптимальные микроклиматические условия для нормального функционального состояния человека (табл.31).

Таблица 31 – Допустимые нормы микроклимата в рабочей зоне производственных помещений (Категория работ 1а) [23]

Сезон года	Категория работ по уровню энергозатрата, ккал/ч	Температура воздуха, °С		Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/сек	
		Диапазон ниже оптимальных	Диапазон выше оптимальных		Если $t^0 < t^0_{\text{оптим.}}$	Если $t^0 > t^0_{\text{оптим.}}$
Теплый	1а (до 139)	21,0-22,9	25,1-28,0	15-75	0,1	0,2
Холодный		20,0-21,9	24,1-25,0		0,1	0,1

Для обеспечения нормальных условий труда санитарные нормы СанПи Н 2.2.1 / 2.1.1.1031-01 устанавливают, что на каждого работника должно приходиться 4,5 м² площади помещения и 20 м³ объема воздуха.

Площадь этой комнаты 20 м², объем 70 м³. В этой комнате работают 2 человека, соответственно один человек имеет 10 м² и 35 м³ воздуха. Это соответствует санитарным нормам.

Фактическая температура воздуха в теплый период составляла 23–24 °С, в холодный - 22–23 °С, что соответствует требуемым нормативам.

5.2.2. Отсутствие или недостаток естественного и искусственного света

В данном помещении используется искусственный и естественный свет, поскольку работа в основном визуальная, тогда естественного света

недостаточно, особенно ночью. Правильно спроектированное и выполненное освещение обеспечивает высокий уровень эффективности, оказывает положительное психологическое воздействие на человека и способствует повышению производительности труда. При выборе типа светильников необходимо учитывать требования к освещению, экономические показатели, условия окружающей среды. В помещениях люминесцентные лампы типа ОД используются в качестве источников искусственного освещения. Лампы ОД (открытые с двумя лампами) предназначены для помещений с хорошим отражением потолка и стен, допускаются при умеренной влажности и пыли. В соответствии с санитарно-гигиеническими требованиями рабочее место должно быть освещено естественным и искусственным освещением. Работник постоянно работает на ПК, напрягает зрение. Согласно стандартам освещения [28] и отраслевым нормам внутреннего освещения при работе с ПК, для общего освещения рекомендуется 300 - 500 люкс [29].

Площадь этой комнаты 20 м², объем 70 м³

Методика расчёта освещения описана в литературе. Рекомендуемая освещенность помещения, при среднем контроле различия с тёмным фоном, составляет $E = 300 \text{лк}$, $гп = 50\%$, $гс = 30\%$, $гр = 10\%$.

Аудитория: $H = 3,5 \text{ м}$; $L = 10 \text{ м}$; $B = 2 \text{ м}$.

Высота подвеса светильника – 0,5 м; рабочая поверхность стола на уровне 0,8 м от пола.

Площадь аудитории:

$$(B \times L = 20 \text{ м}^2). \quad (5)$$

Индекс помещения:

$$i = 10 \times 3,5 / [3,7(10 + 3,5)] = 35 / (3,7 \times 13,5) = 0,7.$$

По справочнику выбираем коэффициент использования светового потока $\eta = 0,31$.

Определяем необходимое количество ламп для заданного светового потока $F = 1150 \text{ лм}$:

$$N = \frac{300 \cdot 20 \cdot 1,1 \cdot 1,25}{1150 \cdot 0,31 \cdot 4} = 5,78 \approx 6$$

Таким образом, в жилом помещении необходимо установить шесть светильников в один ряд. В данном помещении находится 2 блока по 4 лампы, тем самым необходимые условия данным помещением полностью соблюдены.

5.2.3 Повышенное воздействие электромагнитного излучения

При работе ВДТ уровни напряженности, плотности магнитного потока электромагнитного поля, напряженности электростатического поля не должны превышать допустимых значений, приведенных в табл. 32: на расстоянии 50 см от экрана правая, левая, верхняя и задняя поверхности видеомонитора.

Таблица 32 - Допустимые значения параметров ионизирующих электромагнитных излучений

Наименование параметра	Допустимые значения
Напряжённость электрического поля. Электрическая составляющая, не более диапазон частот 5 Гц - 2 кГц диапазон частот 5 Гц - 2 кГц	25,0 В/м 2,5 В/м
Плотность магнитного потока, не более диапазон частот 5 Гц - 2 кГц диапазон частот 5 Гц - 2 кГц	250 нТл 25 нТл

Допустимые уровни интенсивности (плотности потока мощности) электромагнитных полей, излучаемых клавиатурой, системным блоком, мышью, системами беспроводной передачи информации на расстояния и другими вновь разработанными устройствами, в зависимости от основной рабочей частоты изделия, не должны превышать значений приведены в табл. 34.

Таблица 33 - Допустимые уровни электромагнитных полей

Диапазоны частот	0,3 - 300 кГц	0,3 - 3,0 МГц	3,0- МГц	30,0 - МГц	0,3 - ГГц
Допустимые уровни	25 В/м	15 В/м	10 В/м	3 В/м	10 мкВТ/см ²

Допустимые уровни напряженности электрического поля промышленной частоты 50 Гц, создаваемые монитором, системным блоком, клавиатурой и изделием в целом, не должны превышать 0,5 кВ / м.

Допустимые уровни напряженности электростатического поля, создаваемого монитором, клавиатурой, системным блоком, мышью и продуктом в целом, не должны превышать 15,0 кВ / м.

Интенсивность инфракрасного (ИК) и видимого излучения от экрана видеомонитора не должна превышать 0,1 Вт / м² в видимом (400 - 760 нм) диапазоне, 0,05 Вт / м² в ближнем ИК-диапазоне (760 - 1050 нм) , 4 Вт / м² в дальнем (более 1050 нм) инфракрасном диапазоне. Интенсивность ультрафиолетового излучения с экрана видеомонитора не должна превышать 0,0001 Вт / м² в диапазоне 280-315 нм и 0,1 Вт / м² в диапазоне 315 - 400 нм. Излучение в диапазоне 200 - 280 нм не допускается.

Конструкция ВДТ, компьютеров и ПК должна обеспечивать безопасный для пользователя уровень мощности дозы рентгеновского облучения в любой точке пространства на расстоянии 0,05 м от экрана и частей корпуса ВДТ, компьютера или ПВЭМ в любом положении. регулировочные устройства. Уровень мощности дозы рентгеновского облучения не должен превышать 7,74x10¹² А / кг (ампер на килограмм), что соответствует эквивалентной дозе 0,1 мрем / ч (100 мкР / ч; 0,03 мкР / с).

Площадь на рабочее место с VDT, компьютерами и ПК для взрослых пользователей должна составлять не менее 6,0 м², а объем не менее 20,0 м³.

Для внутренней части интерьера следует использовать диффузные отражающие материалы с коэффициентом отражения: для потолка - 0,7 - 0,8; для стен - 0,5 - 0,6; для пола - 0,3 - 0,5.

Поверхность пола в помещениях эксплуатации ВДТ, компьютеров и ПК должна быть гладкой, без отверстий, нескользкой, удобной для уборки и влажной уборки, иметь антистатические свойства.

Это рабочее место отвечает всем вышеперечисленным требованиям.

5.2.4 Повышенное значение напряжения в электрической цепи

По действующим правилам устройства электроустановок (ПЭУ) жилые помещения с точными приборами относятся к 1 категории по степени опасности поражения электрическим током

В настоящее время оснащение жилого помещения электрооборудованием высоко. Обеспечение электробезопасности в жилом помещении следуют в соответствии по ГОСТу 12.1.019-2017 [30]. Источниками электроопасности могут быть: ноутбук, электрический чайник, звуковые колонки. Используемое электрооборудование должно отвечать технике безопасности и условиям его эксплуатации.

Работу с электрооборудованием и электрическими приборами, находящимися под напряжением, нужно выполнять с применением электрозащитных средств (диэлектрических резиновых перчаток, галош, ковров, изолирующих подставок).

При напряжении в 42В и более, электроприборы надежно заземлены и при аварийной ситуации происходит защитное выключение.

Все розетки должны быть промаркированы для определения ее напряжения. Строго запрещается работать на неисправных электрических приборах и установках. Руководитель, отвечающий за технику безопасности, регулярно должны проводить инструктажи, проверять состояние оборудования и приборов, не допускать использование неисправных устройств.

При чрезвычайных происшествиях нужно оказать первую медицинскую помощь, которая состоит из двух этапов это освобождение пострадавшего от действия тока и оказания ему доврачебной медицинской помощи. Нужно

избавить, как можно быстрее пострадавшего от действия тока, и сразу же оказать медицинскую помощь, так как исход поражения зависит от длительности прохождения тока через человека.

5.3 Экологическая безопасность

При работе с ЭВМ не было замечено угроз для экологии. После полного выхода данного персонального компьютера из строя его следует утилизировать в ближайшем месте по приему негодной электронной техники.

5.4 Защита в чрезвычайных ситуациях

К чрезвычайным ситуациям в помещении относится возникновение пожара на рабочем месте. В случае пожара ЧС предусмотрены первичные средства пожаротушения: огнетушители ОХП-10 и ОУ-5 для тушения электрооборудования.

В случае возникновения пожара эвакуация людей проводится согласно плану эвакуации (рис. 13)



Рисунок 13 – План эвакуации при пожаре из помещений ТПУ

5.4.1 Оценка пожарной безопасности помещения

Согласно техническому регламенту о требованиях пожарной безопасности ФЗ-123 от 22.07.2008 г., в зависимости от характеристики используемых в производстве веществ их количества, по пожаровзрывоопасности комната № 722 относится к категории Д, к которой относятся помещения, в которых находятся (обращаются) негорючие вещества и материалы в холодном состоянии. [31].

5.4.2 Мероприятия по устранению пожара

На предприятии предусмотрен ряд мер, направленных на обеспечение тушения пожара:

- Обеспечен проезд к зданию;
- Наличие пожарных щитов;
- Наличие гидрантов с пожарными рукавами;
- Тепловая сигнализация;
- Телефонная связь с пожарной охраной;
- Огнетушители (углекислотный ОУ – 2).

В результате оценки рабочего места было выявлено, что в жилой комнате общежития № 16 все меры, связанные с безопасностью жизнедеятельности соблюдены, все расчеты соответствуют нормам.

Выводы по разделу

В ходе проведенного анализа рабочего места за персональным компьютером было установлено что:

- Показатели микроклимата удовлетворяют критериям нормы;
- Естественный свет поступает в необходимом объёме, рабочая зона в достаточной мере освещена;

- При умеренной работе за компьютером воздействие электромагнитного излучения минимально;

- Все розетки промаркированы, вся электропроводка изолирована специализированным изоляционным материалом;

- В случае пожара в данном помещении есть всё необходимое для того, чтобы безопасно покинуть опасный участок.

Таким образом данное рабочее место полностью удовлетворяет всем требованиям для безопасной работы.

Список публикаций студента

1. Исследование влияния ПАВ на фильтрацию газа в образцах угля / Новиков А.С., Ёлкин И.С. // Сборник материалов 6 всероссийской, 59-й научно-практической конференции молодых ученых с международным участием «Россия молодая» - Кемерово: 2014.
2. Комплексные соединения роданидов металлов с амидопирином / Новиков А.С., Черкасова Е.В. // Сборник материалов 6 всероссийской, 59-й научно-практической конференции молодых ученых с международным участием «Россия молодая» - Кемерово: 2014.
3. Образование эфиров первичных спиртов при окислении алифатических длинноцепочечных кетонов пероксилауриновой кислотой по Байеру-Виллигеру / Новиков А.С., Боркина Г.Г., Воронина С.Г., Перкель А.Л. // Сборник материалов 3 всероссийской конференции «химия и химическая технология: достижения и перспективы» - Кемерово: 2016.
4. Исследование фотофизических свойств 3-нитроформазапов / Новиков А.С., Валиев Р.Р., Петунин П.В., Дёрина К.В., Гадиров Р.М., Постников П.С. // Сборник материалов XIV Международной конференции по импульсным лазерам и применениям лазеров – AMPL-2019» - Томск: 2019.

Список используемых источников

1. Petunin P.V., Valiev R.R., Kalinin R.G., Trusova M. E., Zhdankin V.V., Postnikov P. S. General and Simple Method for the Synthesis of 3-nitroformazan Using Arenediazonium Tosylates// Current Organic Synthesis, 2016, 13, 6, 623-6.
2. Kuznetsova E. A. Use of quinazoline (hinazolil)-formazans complexes for Identification of ions Ni^{2+} , Pb^{2+} , Co^{2+} in the seeds of plants// Fundamental Research. –2013. –No10 (part 6). -WITH. 1266-1270.
3. Fokina A.I., Domracheva L.I., Zyкова Yu.N., Skugoreva S., Lyalina E.I., Trefilova L.V. Improving tetrazol-Topographic method of biotesting using cyanobacteria//Theoretical and Applied Ecology, 2017, 31-41.
4. Ponyaev A.I., Zivich AB, Koldobsky G.I. Photoreox transformations of formazans and the construction of a photovoltaic cell // Izvestiya SPbGTI, 2010, 7, 33, 49-53.
5. Buzykin B.I., Lipunova G.N., Pervova I.G. Progress in chemistry of formazans: synthesis - properties - application. M.: Scientific world, 2009. 295 p.
6. Maslakova, T.I., Pervova, IG, Skorykh, TV, Melkozerov, S.A., Glavatskikh, S.P., Lipunov, I.N. New sorbents with immobilized hetarylformazan groups // Sorption and chromatographic processes. 2009. T. 9. Vol. 3. p. 354-363.
7. Sigeikin G. I., Lipunova G. N., Pervova I. G. // Russian Chemical Reviews. –2006. – V. 75. –P. 885–900.
8. Valiev R.R., Drozdova A. K., Petunin P.V., Postnikov P. S., Trusova M. E., Cherepanov V. N. Complex study of electronic states and spectra of 3-nitroformazans // Russian physics journal, vol. 59, no. 2, june, 2016
9. Дудинов А.А., Степанов Б.И.; Химия формазанов, М., 1992.
10. Valiev R. R., Cherepanov V. N., Baryshnikov G. V., Sundholm D. // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2018. – V.20. – P. 6121-6133.
11. Valiev R.R. Quantum chemistry in spectroscopy / RR Valiev - TSU Publishing House, 2018. - 142 p.

12. Gilroy J. B, Otieno, P.O.; Ferguson, M.J.; McDonald, R.; Hicks, R.G. // *Inorg. Chem.* – 2008. – V. 47. – P. 1279–1286.
13. Sokolowska-Gajda J., Freeman H.S., Reife A. // *Part 2: Iron Complexed Formazan Dyes. Dyes and Pigments.* – 1996. – V. 30. – P. 1–20.
14. Tezcan H., Tokay N. // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy.* – 2010. – V. 75. – P. 54–60.
15. Tezcan H., Tokay N. // *Int. J. of Quantum Chemistry.* – 2010. – V. 110. – P. 2140–2146.
16. Tavakol H. // *Int. J. of Quantum Chemistry.* – 2012. – V. 112. – P. 1215–1224.
17. Valiev R. R., Cherepanov V. N., Ermolina E. G., et. al. // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy.* - 2012. – V. 87. – P. 40–45.
18. Valiev R. R., Sinelnikov A. N., Aksenova Y. V., Kuznetsova R. T., Berezin M. B., Semeikin A. S., Cherepanov V. N. // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy.* – 2014. – V. 117. – P. 323–329
19. Valiev R. R., Kalugina Yu. N., Cherepanov V. N. // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy.* – 2012. – V. 99. – P. 122–125.
20. Gaussian 09, Revision A.1, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, Jr., J. A.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J. M.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.;

Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J.// Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.

21. www.skif.tsu.ru.
22. ГОСТ 12.0.003-2015. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация
23. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. Санитарные правила и нормы. – М., 1997. – 14 с.
24. ГОСТ 12.1005 – 88 (2000) «Система стандартов безопасности труда. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны»
25. ГН 2.1.5.689-98G предельно допустимые концентрации (ПДК) химических веществ в воде водных объектов хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования - М: Минздрав России, 1998
26. Санитарные нормы СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки. М: Минздрав России, 1996-11с
27. ГОСТ 12.1.003-2014. Шум. Общие требования безопасности
28. СНиП 23-05-95 «Естественное и искусственное освещение»
29. Т.Г. Феоктистова. Безопасность жизнедеятельности. Производственная санитария и гигиена труда. Расчет производственного освещения//Москва – 2013, с.22-23
30. ГОСТ 12.1.019-2017. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты
31. Федеральный закон от 22.07.2008 N 123-ФЗ (ред. От 02.07.2013) «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности».
32. ГОСТ 12.1.006–84 ССБТ. Электромагнитные поля радиочастот. Общие требования безопасности.
33. СанПиН 2.2.4/2.1.8.055-96. Электромагнитные излучения радиочастотного диапазона (ЭМИ РЧ). Санитарные правила и нормы

Приложение А

Английская часть

Раздел (1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.4.1, 1.4.2, 1.4.3, 1.4.4, 1.4.5, 1.5.1, 1.5.2, 1.5.3, 1.5.4,)

(Briefly about luminescence and electronic transitions, General information about 3-nitroformazans, Chemical properties of 1,3,5-trisubstituted formazans, Actual studies of 1,3,5-trisubstituted formazans, New way of preparing 3-nitroformazans, Use of quinazoly-formazan complexones to identify Ni^{2+} , Pb^{2+} , Co^{2+} ions in plant seeds, Photoreox transformations of formazans and photovoltaic cell construction, New sorbents with immobilized hetarylformazane groups, A comprehensive study of electronic states and spectra of 3-nitroformazans, Density functional theory, Exchange-correlation functional B3LYP, Time-dependent density functional theory TDDFT, Basis set)

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ71	Новиков Александр Станиславович	<i>Novik</i>	16.05.2019

Консультант отделения иностранных языков

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель отделения иностранных языков	Рыбушкина Светлана Владимировна	Старший преподаватель	<i>Rybushkina</i>	16.05.2019