



Институт физики высоких технологий

Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология, профиль Химия и технология биологически активных веществ

Кафедра биотехнологии и органической химии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы

Изучение состава и структуры смолисто-асфальтеновых компонентов нефтей различных химических типов

УДК 665.6.033.28

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ4А	Торломоева Алтынай Эженовна		27.05.16

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Младший научный сотрудник	Чешкова Татьяна Викторовна	к.х.н.		30.05.16
Доцент	Юсубова Роза Явдовна	к.х.н.		2.06.16

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Екатерина Валентиновна	к.ф.н.		24.05.2016

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Федорчук Юрий Митрофанович	к.т.н.		27.05.16

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. Кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
БИОХ	Краснокутская Елена Александровна	д.х.н., профессор		2.06.2016

Томск – 2016 г.

Планируемые результаты обучения
по ООП 18.04.01 «Химическая технология» (магистр)
профиль «Химия и технология биологически активных веществ»

Код результ ата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Применять <i>глубокие</i> естественно-научные, математические и инженерные знания для создания <i>новых</i> материалов
P2	Применять <i>глубокие</i> знания 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, нанотехнологий
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</i> знания по <i>проектному менеджменту</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</i> знания <i>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 физики высоких технологий
 Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология, профиль Химия и технология биологически активных веществ
 Кафедра биотехнологии и органической химии

УТВЕРЖДАЮ:

Зав. кафедрой БИОХ

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

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФНО
4ГМ4А	Торломоева Алтынай Эженовна

Тема работы:

Изучение состава и структуры смолисто-асфальтеновых компонентов нефтей различных химических типов

Утверждена приказом директора (дата, номер)	№ 3086/с от 25.04.2016
---	------------------------

Срок сдачи студентом выполненной работы:	<i>3.06.2016</i>
--	------------------


ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	<p><i>объект исследования: нефти Крапивинского и Усинского месторождений.</i></p> <p><i>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>
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	<p><i>Аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области;</i></p> <p><i>Задачи исследования:</i></p> <ol style="list-style-type: none"> <i>1. Выделить смолы и асфальтены из нефтей Крапивинского и Усинского месторождений</i> <i>2. Провести деструкцию эфирных связей в молекулах асфальтенов и смол исследуемых нефтей с помощью трибрана бора.</i> <i>3. Провести десульфуризацию в молекулах смол и асфальтенов исследуемых нефтей с использованием тетрабората натрия.</i> <i>4. Изучить состав продуктов хемоллиза смолисто-асфальтеновых компонентов нефтей Крапивинского и Усинского месторождений с использованием современных физико-химических методов исследования (ИКС, ХМС).</i> <p><i>Содержание процедуры исследования, проектирования,</i></p>

	конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе.
Перечень графического материала	1. Сегментирование рынка 2. Оценка конкурентоспособности технических решений 3. Матрица SWOT 4. График проведения и бюджет НИИ 5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИИ 6. Потенциальные риски 7. Схема размещения светильников на потолке 8. План эвакуации 9. Балансовая схема образования суммарных выбросов
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Меньшикова Елена Валентиновна
Социальная ответственность	Федорчук Юрий Митрофанович
Раздел на иностранном языке	Сумцова Ольга Витальевна
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках: <i>Литературный обзор</i>	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	10.02.2016
--	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Младший научный сотрудник	Чешкова Татьяна Викторовна	к.х.н.		10.02.16
Доцент	Юсубова Роза Явидовна	к.х.н.		10.02.16.

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ4А	Торломоева Алтынай Эженовна		10.02.16

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 99 с., 29 рис., 44 табл., 54 источника, 3 прил.

Ключевые слова: нефть, смолисто-асфальтеновые компоненты, химическая деструкция, эфирные и сульфидные мостики,

Объектами исследования являются нефти Крапивинского и Усинского месторождений

Цель работы – характеристика фрагментов, связанных в молекулах смол и асфальтенов нефтей различных химических типов эфирными и сульфидными мостиками.

В процессе исследования проводились реакции деструкции эфирных и сульфидных мостиков в смолисто-асфальтеновых компонентах исследуемых нефтей

В результате исследования получили данные о фрагментах смол и асфальтенов, связанных эфирными и сульфидными мостиками

Область применения: нефтехимия

Экономическая эффективность/значимость работы: выбран наиболее эффективный вариант решения поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

ОПРЕДЕЛЕНИЯ, ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

ГХ-МС	-	газовая хромато-масс-спектрометрия
ИК	-	инфракрасная спектроскопия
ЯМР	-	ядерный магнитный резонанс
ЭПР	-	электронный парамагнитный резонанс
УВ	-	углеводороды
АУ	-	ароматические углеводороды
ГАС	-	гетероатомные соединения
САВ	-	смолисто-асфальтеновые вещества
ВМГС	-	высокомолекулярные гетероорганические соединения
N	-	азот
S	-	сера
O	-	кислород
H	-	водород
НДС	-	нефтяные дисперсные системы
ТГФ	-	тетрагидрофуран
УН	-	нефть Усинского месторождения
КН	-	нефть Крапивинского месторождения

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	9
1. Литературный обзор	11
1.1 Общая характеристика нефти	11
1.2 Состав нефти	12
1.2.1 Фракционный состав нефти	12
1.2.2 Элементный состав нефти	13
1.2.3 Смолисто-асфальтеновые вещества	14
1.3 Методы определения функциональных групп в составе смолисто-асфальтеновых компонентов нефти	17
1.4 Происхождение нефти	20
1.4.1 Теория происхождения нефти	20
1.4.2 Биогенная теория происхождения нефти	21
1.5 Классификация нефтей	23
2. Объекты и методы исследования	25
2.1 Объекты исследования	25
2.2 Методы исследования	25
3. Расчеты и аналитика	28
3.1 Разделение нефти	28
3.2 Разрушение простых и сложноэфирных связей в смолах и асфальтенах	29
3.3 Восстановление алкилбромидов	30
3.4 Десульфуризация смол и асфальтенов	30
3.5 Хроматографическое разделение продуктов восстановления и десульфуризации	31
4. Результаты и обсуждения	32
4.1 Характеристика смол и асфальтенов	32
4.2 Результаты исследования продуктов восстановления в смолах	35

4.3	Результаты исследования продуктов десульфуризации в смолах	42
4.4	Результаты исследования продуктов восстановления в асфальтенах	47
4.5	Результаты исследования продуктов десульфуризации в асфальтенах	50
5.	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	55
6.	Социальная ответственность	72
	Заключение	91
	Список публикаций	93
	Список литературы	94
	Приложение А – Приложение на иностранном языке	99

ВВЕДЕНИЕ

Накопление информации о составе и строении смолисто-асфальтеновых веществ (САВ) различных нефтяных дисперсных систем (НДС) необходимо для решения проблем, связанных с формированием состава нефтей, разработкой и совершенствованием технологий добычи и переработки углеводородного сырья.

Вопросы о химической природе САВ до настоящего времени остаются открытыми. Причины слабой изученности этих компонентов обусловлены тем, что смолы и асфальтены являются самыми сложными по составу и строению компонентами НДС. Углеводородный скелет их молекул содержит нафтеновые, ароматические и гетероароматические циклы с алифатическими боковыми заместителями

Наиболее перспективными методами исследования САВ считаются методы термической и химической деструкции макромолекул смол и асфальтенов. Термолиз позволяет провести идентификацию и количественный анализ получаемых продуктов, но не позволяет установить детальное строение макромолекул САВ, например тип связей и природу функциональных групп. С помощью метода селективной химической деструкции можно установить детали строения «блоков», составляющих макромолекулы смол и асфальтенов, в частности, получить информацию о наличии и составе структурных фрагментов, присоединенных к ядру макромолекул сульфидными и эфирными связями, определить общее количество и длину алкильных цепей, соединенных с ароматическим ядром.

Цель данной работы - характеристика фрагментов, связанных в молекулах смол и асфальтенов нефтей различных химических типов эфирными и сульфидными мостиками.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Выделить смолы и асфальтены из метановой нефти Крапивинского месторождения и нафтеноароматической нефти Усинского месторождений

2. Провести деструкцию сульфидных и эфирных связей в молекулах смол и асфальтенов исследуемых нефтей с использованием селективных химических реагентов (борида никеля и трибромида бора)
3. Изучить состав продуктов хемолiza смолисто-асфальтеновых компонентов нефтей Крапивинского и Усинского месторождений с использованием современных физико-химических методов исследования (ИКС, ХМС).

ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 Общая характеристика нефти

Нефть представляет собой взаимный сопряжённый раствор углеводородов и гетероатомных органических соединений, тёмно-коричневого цвета, иногда почти бесцветную, а иногда даже имеющую чёрный цвет.

Нефть является горючим ископаемым наряду с каменным углем, бурым углем и сланцами, которые получили название *каустоболитов*. В отличие от других горючих ископаемых нефть состоит из готовой смеси различных углеводородов, тогда как для получения углеводородов из твёрдых горючих ископаемых требуется специальная термическая обработка. Поэтому нефть является ценнейшим сырьём как для получения разнообразных моторных топлив и смазочных масел, так и продуктов нефтехимического синтеза.

Из нефти получают: авиационное, автомобильное, дизельное, реактивное, печное и котельное топлива, смазочные масла. Это топливное направление переработки нефти. В этом направлении используется 90 % всей добываемой нефти. Особенно много требуется светлых нефтепродуктов - бензина, дизельного топлива, керосина.

Начиная с середины XX века, возникла новая область использования нефти - *нефтехимия*. Если в первой половине XX века промышленность органического синтеза и полимерных материалов базировалась в основном на растительном сырье и продуктах переработки угля, то в настоящее время преобладающим видом сырья являются углеводороды нефти и природного газа. Возник и начал быстро развиваться раздел химии, заложивший научные основы химической, а не топливной переработки нефти.

Нефтехимия — это раздел органической химии, посвящённый переработке нефти и газа в продукты, стоимость которых является причиной большей рентабельности нефтехимических производств: они окупаются за 2-3 года, тогда как заводы нефтепереработки за 10-12 лет. Предметом нефтехимии являются процессы получения нефтепродуктов и конечных

химических продуктов, а также материалов. Под химическими продуктами подразумеваются функциональные производные углеводородов — спирты, альдегиды, кетоны, кислоты, галоид- и нитропроизводные, а также неорганические материалы — аммиак, водород. А также пластмассы, каучуки, волокна, моющие средства, душистые вещества, лекарства, средства борьбы с сельскохозяйственными вредителями.

Без развития нефтехимии невозможна химизация сельского хозяйства. Основа всех азотистых удобрений — аммиак, 75% его производится на базе водорода, получаемого из нефтехимического сырья. Большинство средств борьбы с сельскохозяйственными вредителями получают на основе полупродуктов нефтехимии. Сейчас примерно 80 % всех органических химических продуктов получается на основе нефти и газа. [1]

1.2 Состав нефти

1.2.1 Фракционный состав нефти

Фракционный состав является важным показателем качества нефти. В процессе перегонки на нефтеперерабатывающих заводах при постепенно повышающейся температуре из нефти отгоняют фракции, отличающиеся друг от друга пределами выкипания. При атмосферной перегонке получают следующие фракции: выкипающие до 350 °С называются светлыми дистиллятами, при этом:

- до 100 °С — петролейная фракция;
- до 180 °С — бензиновая фракция;
- 140–180 °С — лигроиновая фракция;
- 180–220 °С — керосиновая фракция;
- 220–350 °С — дизельная фракция.

Фракции, выкипающие до 200°С, называют легкими, или бензиновыми, от 200 до 300 °С — средними, или керосиновыми, выше 300 °С — тяжелыми, или масляными.

Все фракции, выкипающие до 300 °С, называют *светлыми*, остаток после отбора светлых дистиллятов (выше 350 °С) называется *мазутом*.

Дальнейшая ректификация мазута при атмосферном давлении крайне затруднена, поэтому его разгоняют под вакуумом, при этом получают следующие фракции в зависимости от переработки:

- для получения топлива (350–500 °С) — вакуумный газойль (вакуумный дистиллят);
- более 500°С — вакуумный остаток (гудрон).

Получение масел происходит в следующих температурных интервалах: 300–400 °С — легкая фракция, 400–450 °С — средняя фракция, 450–490 °С — тяжелая фракция, более 490 °С — гудрон. Асфальтосмолопарафиновые отложения (АСПО) также относят к тяжелым компонентам нефти — $T_{пл} \sim 80$ °С.

1.2.2 Элементный состав нефти.

Основными элементами, входящими в состав нефти, являются С и Н. Содержание С колеблется в пределах 82-87%, Н-11 -14%, S-0,1-5%. Содержание N и О у большинства нефтей не превышает десятых долей процента.

Нефть состоит в основном из смеси метановых (алкановых), нафтеновых (циклоалкановых) и ароматических углеводородов. Кроме этого, в нефтях присутствуют кислородные, сернистые и азотистые соединения.

К *кислородным* соединениям нефти относятся нафтеновые кислоты, фенолы, асфальто-смолистые вещества. *Сернистые соединения* — это H_2S , меркаптаны, сульфиды, тиофены, тиофаны, *азотистые соединения* — гомологи пиридина, гидропиридина и гидрохинолина. Компонентами нефти являются также растворенные в ней газы, вода и минеральные соли.

Содержание газов (C_1 - C_4) в нефти колеблется от десятых долей до 4%, воды от 0,5 до 10% и выше, минеральных солей от 0,1 до 4000 мг/л и выше. Кроме того, минеральные вещества содержатся в нефтях в виде растворов солей органических кислот, в комплексных соединениях и др.

Состав минеральных компонентов определяется в золе, получаемой при сжигании нефти. Содержание золы не превышает десятых долей

процента, считая на водород. В золе обнаружено до 20 различных элементов (Ca, Fe, Si, Zn, Cu, Al, Mo, Ni, V, Na, Sn, Ti, Mn, Sr, Pb, Co, Ag, Ba, Cr и др.), содержание которых колеблется от $5 \cdot 10^{-6}$ до $1 \cdot 10^{-8}$ %.

1.2.3 Смолисто-асфальтеновые вещества

В тяжелой части нефти содержатся *смолисто-асфальтеновые вещества*. Это сложная смесь наиболее высокомолекулярных соединений, представляющих собой гетероорганические соединения со сложной гибридной структурой, включающей серу, кислород, азот и некоторые другие металлы. Наиболее богаты смолисто-асфальтеновыми веществами молодые нефти с высоким содержанием ароматических соединений [3].

Молекулярная структура их до сих пор точно не установлена. Современный уровень знаний и возможности инструментальных физико-химических методов исследований (например, электронная микроскопия, п-д-М-метод, рентгеноструктурная, ЭПР- и ЯМР-спектроскопия, и т.д.) позволяют лишь дать возможное представление о структурной организации, установить количество конденсированных нафтено-ароматических циклов, а также других характеристик и построить среднестатистические теоретические модели гипотетических молекул смол и асфальтенов. В практике исследования состава и строения нефтяных, угле- и коксохимических остатков широко используется сольвентный способ Ричардсона, основанный на различной растворимости групповых компонентов в органических растворителях (слабых, средних и сильных). По этому признаку различают следующие условные групповые компоненты:

- 1) растворимые в низкомолекулярных (слабых) растворителях (изооктане, петролейном эфире) — масла и смолы (*мальтены*). Смолы извлекают из мальтенов адсорбционной хроматографией (на силикагеле или оксиде алюминия);
- 2) нерастворимые в низкомолекулярных алканах C_5-C_8 , но растворимые в бензоле, толуоле, четырёххлористом углероде — *асфальтены*:

3) нерастворимые в бензине, толуоле и четыреххлористом углероде, но растворимые в сероуглероде и хинолине— *карбены*;

4) нерастворимые ни в каких растворителях — *карбоиды*.

Смолы — вязкие малоподвижные жидкости или аморфные твердые тела от тёмно-коричневого до темно-бурого цвета с плотностью около единицы или несколько больше. Они представляют собой плоскоконденсированные системы, содержащие пять-шесть колец ароматического, нафтенового и гетероциклического строения, соединенные посредством алифатических структур.

Асфальтены — аморфные, но кристаллоподобной структуры твёрдые тела тёмно-бурого или черного цвета с плотностью несколько больше единицы. При нагревании не плавятся, а переходят в пластическое состояние при температуре около 300 °С, а при более высокой температуре разлагаются с образованием газообразных и жидких веществ и твердого остатка — *кокса*. Они в отличие от смол образуют пространственные, в большей степени конденсированные кристаллоподобные структуры. Наиболее существенные отличия смол и асфальтенов проявляются по таким основным показателям, как растворимость в низкомолекулярных алканах, отношение С:Н, молекулярная масса, концентрация парамагнитных центров и степень ароматичности.

Смолы образуют истинные растворы в маслах и топливных дистиллятах. Отличительной особенностью их является полициклическая конденсированная система из 4-5 колец, 1-3 метильных групп и одного длинного алкильного (C_3-C_{12}) заместителя. Эти молекулы могут состоять из одного или нескольких фрагментов. Характерным отличием смол является обязательное наличие гетероатомов в молекуле. Содержание серы в смолах, выделенных из нефтей различных месторождений, колеблется от сотых долей до 9%, относительное содержание азота 52-63 %. Так как атомы серы и азота в смолах входят обязательно в циклическую ароматическую структурную единицу типа тиофена, пиррола или пиридина, то часть

ароматических циклов будут гетероароматическими. Молекулы смол преимущественно бифрагментарны, причём каждый фрагмент содержит два конденсированных ароматических (гетероароматических) кольца. В смолисто-асфальтеновых веществах кислород (1-5 %) входит в состав функциональных групп: карбоксильной, фенольной, спиртовой, сложноэфирной и карбонильной. На основании детального исследования состава и свойств нейтральных смол, Сергиенко предложена следующая модельная структурная формула [4] :

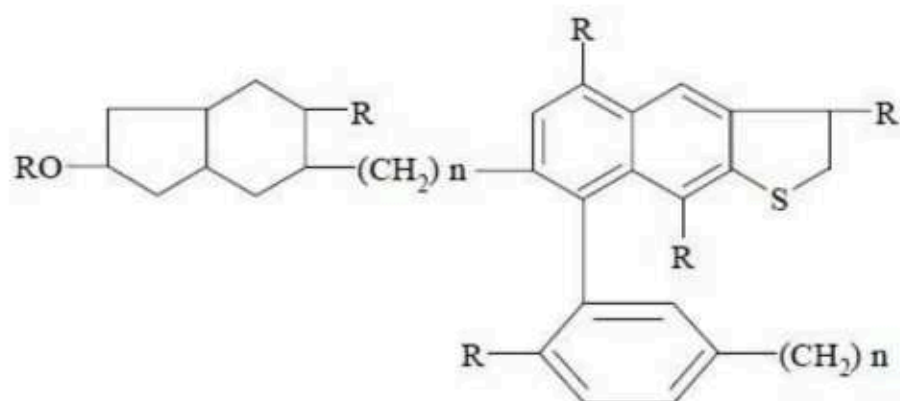


Рисунок 1 – Модельная структура смол по Сергиенко

Асфальтены в тяжёлых нефтяных остатках находятся в коллоидном состоянии. Благодаря межмолекулярным взаимодействиям, асфальтены могут образовывать ассоциаты – надмолекулярные структуры. По своему химическому строению асфальтены — это полициклические, сильно конденсированные, ароматические системы, связанные с пяти- и шестичленными гетероциклами. Они резко отличаются от остальных компонентов тем, что их фрагменты имеют три ароматических кольца, а молекулы состоят из 4-5 фрагментов. Благодаря трём конденсированным ароматическим кольцам, структурные фрагменты асфальтенов имеют практически плоское пространственное строение. По-видимому, за счёт π -электронных облаков и полярных групп фрагменты асфальтенов собираются в пачки параллельно расположенных плоскостей. Рентгенструктурным анализом были обнаружены образования, состоящие из 4-5 параллельных

слоёв, не упорядоченных относительно оси, перпендикулярной к этим плоскостям [5]:

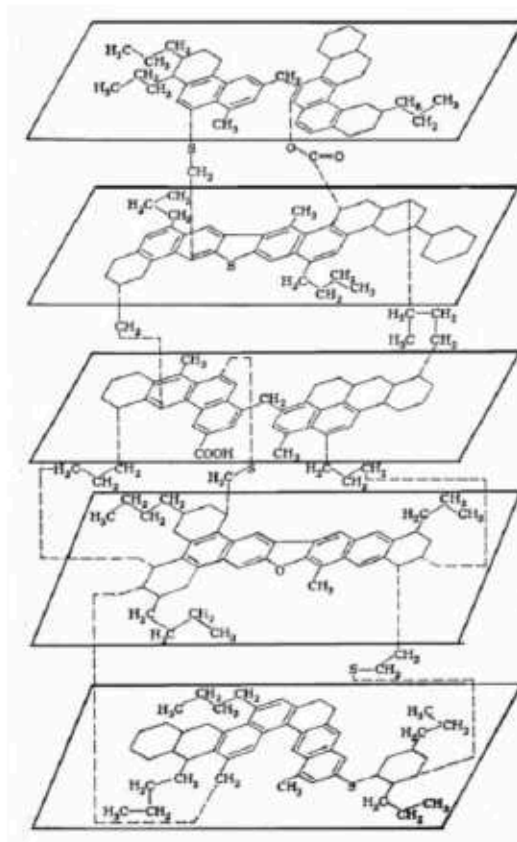


Рисунок 2 – Гипотетические модели асфальтовых молекул по Залке

1.3 Методы определения функциональных групп в составе смолисто-асфальтовых компонентов нефти

Методами, позволяющими определить те или иные функциональные группы в составе молекул САВ нефти и получить дополнительную информацию об особенностях их структуры, являются метод щелочного гидролиза (с NaOH), метод RICO (Ruthenium-ion catalyzed oxidation) - селективное окисление асфальтенов катализируемое ионами рутения, и реакции с бромидом бора для определения эфирных и сложноэфирных связей [6, 7]; десульфуризация на бориде никеля, NaBH₄ или NaBD₄ [8]; мягкое каталитическое гидрирование смол и асфальтенов [9,10]; термолиз в сочетании с ГХ-МС образующихся продуктов реакции [11, 12, 13, 14, 15]; а также неразрушающие рентгеновские спектроскопические методы [16, 17, 18, 19 - 28].

Метод щелочного гидролиза и реакции с VBr_3 позволяют установить наличие простых эфирных и сложноэфирных связей в молекулах ВМГС нефти. Рентгеновскими спектроскопическими методами можно определить и количественно оценить функциональные группы, в которые входят атомы азота или серы. В процессе каталитического гидрирования растворов смол и асфальтенов под давлением при сравнительно небольших температурах идет реакция гидронолиза связей углерод-гетероатом, не затрагивая связи углерод-углерод углеродного скелета молекул смол и асфальтенов. В данном процессе образуются гидрогенизаты, практически не содержащие гетероатомов и с не очень снизившимися молекулярными массами, что свидетельствует о том, что большая часть гетероатомов входит в циклические структурные фрагменты молекул асфальтенов и смол, а не в алифатические мостики. Следовательно, атомы серы располагаются преимущественно в циклических структурных фрагментах смол и асфальтенов, а не в алкилсульфидных фрагментах и мостиковых связях. Метод RICO позволяет определить длину алкильных мостиковых связей в молекулах САВ нефти. Термолиз в сочетании с ГХ-МС (особенно в проточном непрерывном режиме) может дать наиболее полную информацию о соединениях, которые, вероятнее всего, будут являться структурными фрагментами молекул САВ нефти.

Для идентификации и оценки функционального типа сернистых структур, входящих во фрагменты молекул асфальтенов и смол в настоящее время существуют три типа методов. Химическая деструкция (восстановление, окисление), неразрушающий рентгеновский спектроскопический анализ, и различные варианты термической деструкции (термолиз, флэш-пиролиз и др.) с отбором жидких и газообразных продуктов и последующим их анализом методами газовой хроматографии и масс-спектрометрии.

Для оценки типов серусодержащих фрагментов молекул смол и асфальтенов в последнее время также используется метод ионно-

циклотронно-резонансной масс-спектрометрии с Фурье-преобразованием и ионизацией в «электроспрее» (поток электронов в форме спрея) - *ESI-FT-ICR-MS* (*Electrospray Ionization Fourier Transform Ion Cyclotron Resonance Mass Spectrometry*)

Такие методы как рентгеновская адсорбция (*extended x-ray absorption fine structure spectroscopy – EXAFS*; *x-ray absorption near-edge structure spectroscopy XANES*, *xray photoelectron spectroscopy - XPS*), основанные на обработке ближней или дальней тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения, а также на измерении энергетических спектров электронов, вылетающих при воздействии на твердое тело монохроматическим рентгеновским излучением [29 - 31], позволяют проанализировать практически все функциональные типы сернистых структур в составе асфальтенов и смол, используя для идентификации и количественной оценки модельные сероорганические соединения.

Десульфуризация (расщепление сульфидных групп) асфальтенов и смол как на бориде никеля Ni_2B , так и на тетраборате натрия $NaBH_4$ (или $NaBD_4$) [32, 33] позволяет идентифицировать и количественно оценить содержание сульфидных групп в молекулах САВ нефти, а также определить возможные структурные фрагменты соединенные через сульфидные связи друг с другом или с ядрами смол или асфальтенов. Стоит отметить, что данным методом практически невозможно определить серу, входящую в ароматические кольца (бенз -, дибенз – и нафтобензтиофеновую) и тиациклановую серу (рис. 3).

Расщепление связей C-S в сульфидных структурах асфальтенов можно проводить с помощью метилиодида [34]. Данный реагент не затрагивает C-S связи в циклических сульфидных структурах. Как и в случае десульфуризации на бориде никеля (или тетрагидроборате натрия), данный метод не позволяет идентифицировать и количественно оценить тиациклановые и ароматические серусодержащие структуры.

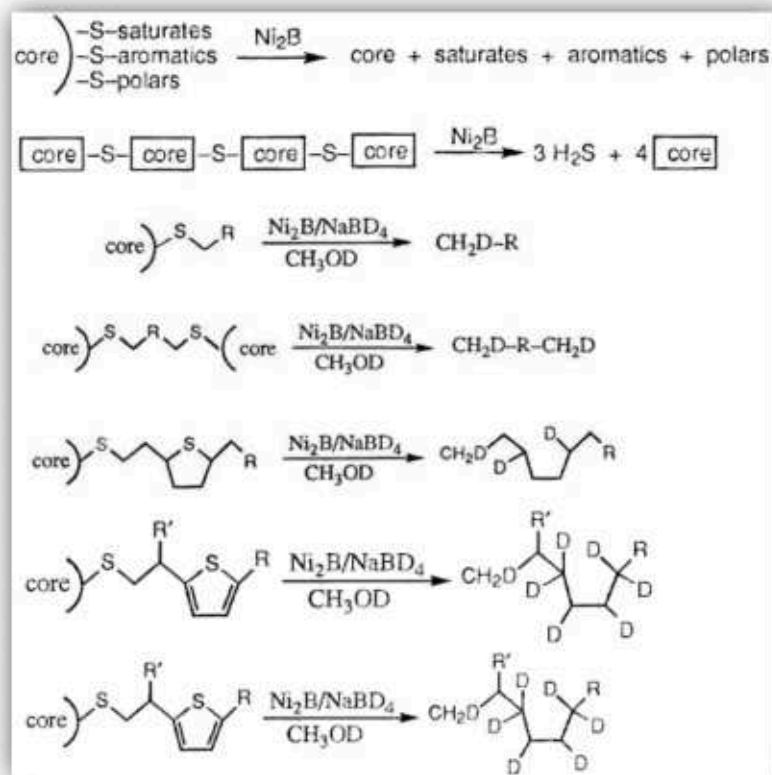


Рисунок 3 - Схемы реакций восстановительной десульфуризации САВ нефти.

1.4 Происхождение нефти

Вопрос о происхождении нефти и газа имеет большое теоретическое и практическое значение. Решение вопроса генезиса нефти позволяет облегчить поиск и разведку нефтяных и газовых месторождений, оценить их запасы, правильно организовать добычу и переработку.

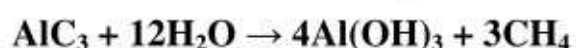
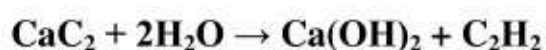
Процесс нефтеобразования длительный, стадийный процесс. Он протекал на протяжении многих миллионов лет.

Существует множество теорий о происхождении нефти и газа. Наибольшее распространение получили две концепции: теории органического (биогенного) и неорганического (абиогенного) происхождения [35].

1.4.1 Неорганическая теория происхождения нефти

Абиогенная теория предполагает образование нефти из различных элементов неорганического происхождения. В 1877 г Д.И. Менделеевым была выдвинута одна из неорганических теорий происхождения нефти. Им

была предложена так называемая *карбидная* гипотеза. По этой версии, вода проникла в глубь земли по трещинам в осадочных и кристаллических породах до магмы, где реагировала с карбидами тяжелых металлов, образуя углеводороды:



Под действием высоких температур на больших глубинах углеводороды и вода испарялись, поднимались к наружным частям земли и конденсировались в хорошо проницаемых осадочных породах. Опыты, проведённые химиками, подтвердили такую возможность образования углеводородов.

В 1982 г. русский учёный Соколов В.Д. выдвинул так называемую "*космическую*" гипотезу. Согласно ей углеводороды нефти образованы из углерода и водорода в эпоху формирования Земли и других планет. По мере охлаждения Земля эти углеводороды поглощались ею и конденсировались в земной коре. Одним из веских доводов этой гипотезы является обнаружение значительных количеств газа метана в атмосфере планет.

Глубинные массивные кристаллические периодитовые породы, как и метеориты, содержат элементарный углерод и карбиды тяжёлых металлов. Эти же породы содержат воду, водород, окись углерода и углекислоту. Поэтому в наше время выдвинут целый ряд других гипотез о неорганическом происхождении нефти и газа из первичных минералов планеты в результате химических реакций непосредственно из углерода и водорода в условиях высоких температур, давлений и каталитического действия оксидов металлов (Fe, Ni и др.) (Н.А. Кудрявцев, В.Б. Порфирьев и др.).

1.4.2 Органическая теория происхождения нефти

Значительное большинство геологов и химиков являются приверженцами *органического* происхождения нефти и газа. Сторонники органической гипотезы например, М.В. Ломоносов, В.И. Вернадский, И.М. Губкин, А.Ф. Добрянский и др., считали, что источниками происхождения

нефти были остатки флоры и фауны, скопившихся в течение многих миллионов лет на дне водоемов в прошлые геологические эпохи в виде ила. Отмершие организмы перекрывались в дальнейшем слоями осадочных пород и под влиянием анаэробных бактерий подвергались биохимическим превращениям. При этом происходили сложные процессы гидролиза и восстановление *липидов* (жироподобные вещества), углеводов, белков и лигнина, содержащихся в организмах. Часть органического вещества керогена в верхних слоях осадочных отложений превращалась бактериями в газы (CO_2 , N_2 , NH_3 , CH_4 и др.) – стадия *диагенеза*. В нижних же слоях отложений на глубине 1-3 км в условиях высокого давления (10-30 МПа) и повышенной температуры (120-150⁰С) при каталитическом влиянии горных пород начиналась решающая фаза генезиса нефти: образование углеводородов из органического вещества и их превращения - стадия *катагенеза*.

Продукты превращения - нефть и газ первоначально рассеяны в нефтематеринской, обычно, глинистой породе. В результате давления породы, диффузии, фильтрации по порам и трещинам под действием капиллярных сил нефть и газ способны мигрировать в толще пород. В результате миграции нефть и газ скапливались в так называемых ловушках, т.е. в малопроницаемых горных породах. Такие скопления нефти называют *нефтяными залежами*. Если количество нефти и газа в залежи велико, или в данной структуре пластов горных пород имеется несколько залежей, то говорят о нефтяном, нефтегазовом или газовом месторождении.

Большая часть геологических и геохимических наблюдений и фактов лучше подтверждает гипотезу органического происхождения нефти. Особенно убедительно выглядит хорошо доказуемая связь между составом нефти, живого вещества и органического вещества древних осадочных пород и современных осадков.

1.5 Классификация нефтей

На начальном этапе развития нефтяной промышленности основным показателем качества нефти была *плотность*. Нефти делили на лёгкие ($\rho_{15}^{15} < 0,828$), утяжелённые ($\rho_{15}^{15} = 0,828-0,884$) и тяжёлые ($\rho_{15}^{15} > 0,884$). В лёгких нефтях содержится больше бензиновых и керосиновых фракций, и сравнительно мало серы и смол. Из таких нефтей вырабатывают смазочные масла высокого качества. Тяжёлые нефти характеризуются высоким содержанием смолисто-асфальтеновых веществ, гетероатомных соединений, и поэтому мало пригодны для производства масел и топлив. Грозненским нефтяным научно-исследовательским институтом (ГрозНИИ) предложена химическая классификация нефтей. За основу этой классификации принято преимущественное содержание в нефти одного или нескольких групп углеводородов. Различают шесть типов нефтей: *парафиновые, парафино-нафтеновые, нафтеновые, парафиново-нафтеново-ароматические, нафтеново-ароматические и ароматические*.

В *парафиновых* нефтях все фракции содержат значительное количество алканов: бензиновые — не менее 50 %, а масляные — 20 % и более. Количество асфальтенов и смол очень мало.

В *парафиново-нафтеновых* нефтях и их фракциях преобладают алканы и циклоалканы, содержание аренов и смолисто-асфальтеновых соединений мало.

Для *нафтеновых* нефтей характерно высокое (до 60 % и более) содержание циклоалканов во всех фракциях. Они содержат минимальное количество твёрдых парафинов, смол и асфальтенов.

В *парафино-нафтено-ароматических* нефтях содержится примерно равное количество углеводородов всех трёх групп, твёрдых парафинов не более 1,5 %. Количество смол и асфальтенов доходит до 10 %.

Нафтено-ароматические нефти содержат преобладающее количество цикланов и аренов, особенно в тяжёлых фракциях. Алканы содержатся в лёгких фракциях в небольшом количестве, количество смол и асфальтенов около 15-20 %.

Ароматические нефти характеризуются преобладанием аренов во всех фракциях и высокой плотностью.

Для оценки товарных качеств подготовленных на промыслах нефтей, принята в 2002 году технологическая классификация нефти [36].

Таблица 1 - Классификация и требования к качеству подготовленных на промыслах нефтей

Показатель	Класс	Тип	Группа			Вид		
			1	2	3	1	2	3
Массовая доля серы, %: до 0,6 – малосернистая 0,6-1,80 – сернистая 1,80-3,50 – высокосернистая более 3,50 – особо высокосернистая	1 2 3 4							
Плотность при 20 0С, кг/м ³ : до 830 – особо лёгкая 830,1- 850,0 – лёгкая 850,1-870,0 – средняя 870,1-895,0 – тяжёлая более 895,0 – битумозная		0(0 ₃) 1 (1 ₃) 2 (2 ₃) 3 (3 ₃) 4 (4 ₃)						
Массовая доля воды, % не более			0,5	0,5	1,0			
Концентрация хлористых солей, мг/дм ³ , не более			100	300	900			
Содержание механических примесей, % мас., не более			0,05	0,05	0,05			
Давление насыщенных паров: кПа, мм рт. ст.			66,7 500	66,7 500	66,7 500			
Массовая доля, % не более: сероводорода метил- и этилмеркаптанов						20 40	50 60	100 100

Условное обозначение марки нефти состоит из четырёх цифр, соответствующих обозначениям класса, типа, группы и вида нефти. Например, нефть марки 2,2₃,1,2 означает, что она сернистая, поставляется на экспорт, средней плотности, по качеству промышленной подготовки соответствует первой группе и по содержанию сероводорода и лёгких меркаптанов – 2-му виду.

ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1 Объекты исследования

В качестве объекта исследования были взяты образцы нефтей Крапивинского и Усинского месторождений. Крапивинское нефтяное месторождение расположено на территории Каргасокского района Томской области, в 450 км от г. Стрежевого и в 600 км от Томска, а его юго-западная часть расположена в Омской области. Отложения легкие (0,786–0,873 г/куб. м); сернистые (0,57–1,1 %), малопарафинистые (1,0–2,44 %). В пределах площади месторождения пробурено 150 эксплуатационных и разведочных скважин. Исследуемая нефть является метановой и относится к среднеплотным, малосмолистым, сернистым нефтям (табл. 2).

Усинское месторождение расположено в Тимано-Печорской нефтегазоносной провинции. Усинская нефть является нафтеноароматической, тяжелой ($\rho > 934$ кг/м³) высоковязкой ($v_{50} > 31$), высокосернистой (1,98 % мас.), с малым количеством светлых фракций и твердых парафинов, но с высоким содержанием смол, асфальтенов и гетероатомов.

Таблица 2 – Характеристика нефти Усинского месторождения.

η , мм ² /с	ρ^{20}_4 , кг/м ³	Содержание, % мас.						
		C	H	N	S	асфальтены	смолы	масла
13,7	921-971,5	82,03	12,12	0,35	1,05	7,6	22,1	70,3

Таблица 3 - Характеристика нефти Крапивинского месторождения

η , мм ² /с	ρ^{20}_4 , кг/м ³	Содержание, % мас.						
		C	H	N	S	асфальтены	смолы	масла
13,7	867	83,27	11,02	0,35	1,05	2,6	8,8	85,10

2.2 Методы исследования

Различают несколько видов анализа нефтей и нефтяных фракций: элементный, индивидуальный, групповой, структурно-групповой. Развитие

техники современных физико-химических методов анализа смесей позволило перейти от определения элементного состава нефтей к исследованиям группового и индивидуального состава нефтяных фракций.

При анализе масляных фракций и смолисто-асфальтеновых составляющих нефти удается идентифицировать пока лишь некоторые индивидуальные соединения. Групповое разделение этих фракций, включающих гибридные структуры, — также достаточно сложная и не вполне решенная задача. С использованием масс-спектрологии, ЯМР-спектрологии и других современных методов проводят структурно-групповой анализ высокомолекулярных нефтяных фракций.

ИК-спектры регистрировали на FTIR-спектрометре NICOLET 5700 в области $400 - 4000 \text{ см}^{-1}$. Образцы в растворе четыреххлористого углерода наносили в виде пленки на пластинки из бромида калия. Обработку ИК-спектров проводили с использованием программного обеспечения «OMNIC 7.2» Thermo Nicolet Corporation. Электронные спектры поглощения получали на спекрофотометре «Uvikon 943» в ультрафиолетовой области $\lambda = 190-400$ нм и видимой области $\lambda = 400-700$ нм.

Хромато-масс-спектры получали на DFS приборе «Thermo Scientific». В газовом хроматографе использовали кварцевую капиллярную колонку TR5MS длиной 30 м и внутренним диаметром 0,25 мм. Хроматографирование проводили в режиме программированного подъема температуры от 80 до 300 °С со скоростью 4 град/мин и затем в течение 30 мин при конечной температуре. Газ носитель – гелий. Сканирование масс-спектров осуществлялось каждую секунду в диапазоне масс до 500 а.е.м. Обработку полученных результатов проводили с помощью программы Xcalibur. Идентификацию соединений выполняли с использованием литературных данных и компьютерной библиотеки масс-спектров NIST 02. Относительную распространенность каждого типа соединений рассчитывали как частное от деления суммарной площади идентифицированных пиков различных типов соединений к сумме площадей всех установленных типов

соединений. Идентификацию соединений выполняли с использованием литературных данных и компьютерной библиотеки масс-спектров NIST 02.

Элементный состав исследуемых объектов определяли методом сожжения: С, Н, N – в реакторе Покровского с последующим газохроматографическим анализом продуктов деструкции; S – колбовым методом по Шенигеру [38].

Для *определения плотности* нефти использовали методику, которая соответствует [39]. Метод основан на определении относительной плотности - отношения массы испытуемого продукта к массе воды, взятой в том же объеме и при той же температуре.

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

Студенту:

Группа	ФНО
4ГМ4А	Торломоева Алтынай Эженовна

Институт	ИФВТ	Кафедра	БНОХ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	18.04.01 «Химическая технология»

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Себестоимость ресурсов научного исследования составила 1320,29 рублей. Итоговая плановая себестоимость НИ – 417639,18 рублей.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Отчисления на социальные нужды 27,1% составили 6637,59 рублей.

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:


1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	С позиции финансовой и ресурсной эффективности проект является наиболее приемлемым и конкурентоспособным.
2. Планирование процесса управления НИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация пунктов	Составлен календарный план-график проведения НИ; Распланирован бюджет НИ.
3. Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Сравнительная эффективность разработки составляет 1,42.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Сегментирование рынка
2. Оценка конкурентоспособности технических решений
3. Матрица SWOT
4. График проведения и бюджет НИ
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ
6. Потенциальные риски

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФНО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Екатерина Валентиновна	к.ф.н		18.05.16 _г

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФНО	Подпись	Дата
4ГМ4А	Торломоева Алтынай Эженовна		18.05.16

ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

4.1. Предпроектный анализ

4.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования

Таблица 12 – Сегментирование рынка

Химия нефти	Переработка нефти	Высокомолекулярные соединения нефти
Исследовательские центры университетов		
Научные центры		
Нефтяные компании		

Были определены рынки сегментирования: наиболее интересным представляется исследование химии нефти, т.к. уровень конкуренции на данном сегменте более низок.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

Таблица 13- Оценочная карта для сравнения конкурентных технических разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
Скорость проведения эксперимента	0,1	4	4	3	0,4	0,4	0,3
Безопасность эксперимента	0,15	4	4	4	0,6	0,6	0,6
Техническая оснащенность проекта	0,18	5	5	5	0,9	0,9	0,9
Наличие реактивов	0,2	5	4	4	1	0,8	0,8
Экономические критерии оценки эффективности							
Конкурентоспособность	0,15	5	4	3	0,75	0,6	0,45
Финансирование научной разработки	0,11	5	3	5	0,55	0,33	0,55
Наличие сертификации разработки	0,11	5	4	5	0,55	0,44	0,55
Итого	1	33	28	29	4,75	4,07	4,15

B_{K1} – метод термической деструкции; B_{K2} – метод RICO.

$4,75/4,15=1,14>1$, метод, применяемый в данном проекте выгоден с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.

4.1.3 FAST-анализ

В рамках магистерской диссертации в качестве объекта FAST-анализа выступает объект исследования – смолисто-асфальтеновые компоненты (САВ) нефтей.

Таблица 14- Классификация функций, выполняемых объектом исследования

Наименование процесса	Выполняемая функция	Ранг функции		
		Главная	Основная	Вспомогательная
Химическая деструкция	Разрыв эфирных и сульфидных мостиков	X		
Жидкостно-адсорбционная хроматография	Разделение на полярную и неполярную фракции на силикагеле		X	
Сушка	Доведение до постоянной массы			X

Таблица 15-Матрица смежности

	Функция 1	Функция 2	Функция 3
Функция 1	=	<	<
Функция 2	>	=	>
Функция 3	>	<	=

Таблица 16 - Матрица количественных соотношений функций

	Функция 1	Функция 2	Функция 3	Итого	Значимость функции
Функция 1	1	0,5	0,5	2	0,23
Функция 2	1,5	1	1,5	4	0,44
Функция 3	1,5	0,5	1	3	0,33
0,5 при «<»; 1,5 при «>»; 1 при «=»				$\Sigma=9$	1

Таблица 17 - Определение стоимости функций, выполняемых объектом исследования

Процесс	Выполняемая функция	Т дн	Стоимость материала, р	Заработн ая плата, р	Себестои мость, р
Химическая деструкция	Разрыв эфирных и сульфидных мостиков	6	1128,09	3531,34	5 787,52
ЖАХ	Разделение на полярную и неполярную фракции на силикагеле	16	192,2	543	735,2
Сушка	Доведение до постоянной массы	2	-	950,74	950,74

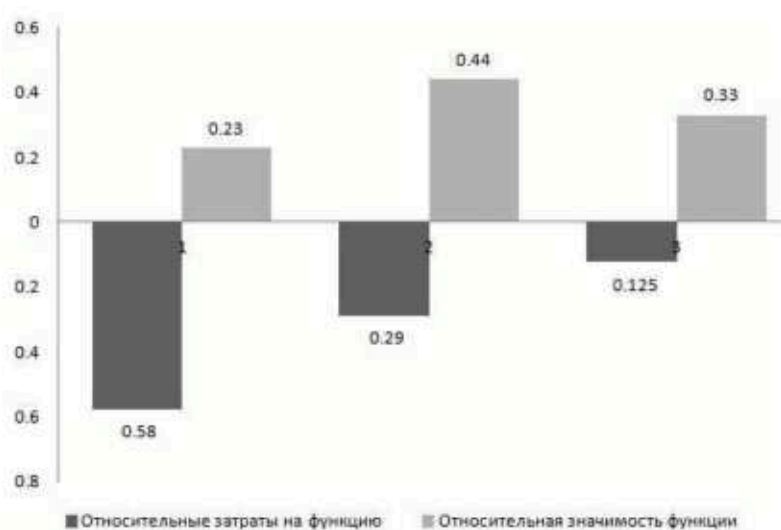


Рисунок 22 - Функционально-стоимостная диаграмма

Построенная функционально-стоимостная диаграмма позволяет выявить диспропорции между полезностью функций и затратами на них. Анализ ФСД показывает явное наличие рассогласования по функциям 1 и 3. Необходимо провести работы по ликвидации данных диспропорций.

В качестве конкретных шагов, которые необходимо предложить на данном этапе, должны выступать предложения связанные с экономией за счет: применения принципиально новых конструкторских решений; совмещения функций в сборочных единицах и деталях; оптимизации протекаемых процессов; применения новых материалов.

Результатом проведения FAST-анализа высокотехнологической и ресурсоэффективной разработки должно быть снижение затрат на единицу полезного эффекта, достигаемое путем:

- сокращения затрат при одновременном повышении потребительских свойств объекта;
- повышения качества при сохранении уровня затрат;
- уменьшения затрат при сохранении уровня качества;
- сокращения затрат при обоснованном снижении технических параметров до их функционально необходимого уровня;
- повышения качества при некотором, экономически оправданном увеличении затрат.

4.1.4 SWOT-анализ

Таблица 18- Матрица SWOT

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Заявленная экономичность и энергоэффективность технологии. С2. Экологичность технологии. С3. Уникальность научной разработки С4. Наличие бюджетного финансирования. С5. Квалифицированный персонал.	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Дефицит необходимых реактивов. Сл2. Отсутствие необходимого оборудования для проведения научной работы.
Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ИХН СО РАН. В2. Стабильный спрос на продукт В3. Опубликование научной разработки в научных журналах. В4. Повышение стоимости конкурентных разработок	1. Исследование методов химической деструкции для исследования состава и структурных особенностей фрагментов макромолекул смолисто-асфальтовых веществ нефти КН и УН с использованием современного комплекса физико-химических методов исследования	1. Приобретение необходимых реактивов для проведения эксперимента возможно за счет сотрудничества с другими лабораториями. 2. Опубликование научной разработки дает возможность получения дополнительного финансирования.
Угрозы: У1. Отсутствие необходимых реагентов для проведения экспериментов У2. Развитая конкуренция технологий производства У3. Введения дополнительных государственных требований к сертификации продукции У4. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства	1. Повышение конкурентоспособности за счет государственного финансирования и получения новых данных об исследуемой нефти.	1. Доработка методики проведения химической деструкции смол и асфальтенов по ее конкурентным преимуществам.

4.1.5. Оценка готовности проекта к коммерциализации

Таблица 19 - Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

Наименование	Степень проработанности и научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
Определен имеющийся научно-технический задел	5	4
Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	4	4
Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	5
Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	5
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	4
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	5	5
Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	4
Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	3	4
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	4	3
Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	4	4
Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	3	3
Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	4	3
Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	3
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	5
Проработан механизм реализации научного проекта	5	5
ИТОГО БАЛЛОВ	64	62

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i$$

$B_{\text{сум}}=62$, разработка считается перспективной, а знания разработчика достаточными для успешной ее коммерциализации.

4.1.6. Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Исходя из специфики исследования следует, что для коммерциализации подходит метод *Передача интеллектуальной собственности* в уставной капитал предприятия. Поскольку полученная в ходе исследования информации о составе и строении САВ необходима для

решения проблем, связанных с формированием состава нефтей, разработкой и совершенствованием технологий их добычи и переработки.

4.2 Инициация проекта

4.2.1 Цели и результат проекта

Таблица 20 - Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИ ТПУ	Защита магистерской диссертации
СО РАН Институт химии нефти	Выполнение проекта, предоставление полной информации по выполненной работе

Таблица 21 - Цели и результат проекта

Цели проекта:	Изучение состава и структуры смолисто-асфальтеновых компонентов нефтей; оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения исследования; определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.
Ожидаемые результаты проекта:	Изучение особенностей строения САВ;
Критерии приемки результата проекта:	Наличие проведенных анализов (ИКС, ХМС) и их расшифровка Целесообразность исследования
Требования к результату проекта:	Имеются все данные по исследованию Приведены расчеты, анализы, методики исследования

4.2.2. Организационная структура проекта

Таблица 22 - Рабочая группа проекта

ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо- затраты, час.
Чешкова Т.В СО РАН Институт химии нефти ЛГОСН к.х.н., научный сотрудник	Руководит ель проекта	Ответственность за реализацию проекта в пределах заданных ограничений по ресурсам, координирование деятельности участников проекта.	135
Торломоева А.Э НИ ТПУ магистр	Исполните ль	Проведение необходимых исследований и экспериментов	603
Рябова Н.В СО РАН Институт химии нефти ЛФХМИ	Субподряд чик	Проведение ИК-спектроскопии	9
СО РАН Институт химии нефти	Субподряд чик	Проведение ГХ-МС анализа	9

4.3 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

4.3.1 Расчет материальных затрат НТИ

Таблица 25 - Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, (З _м), руб.
Бензол	л	0,8	350	280
Гексан	л	0,52	705	366,6
Диэтиловый эфир	л	0,06	935	56,1
Литийалюминия гидрид	кг	0,0003866	108 554	41,96
Петролейный эфир	л	0,52	235	122,2
ТГФ	л	0,1	716	71,6
Хлороформ	л	0,0158	296	4,67
ВВг ₃	л	0,0024	54 700	131,28
NaOH	г	0,12	88,5	10,62
Na ₂ SO ₄	г	0,1	58	5,8
SiO ₂ (АСК)	г	0,182	1060	192,92
HCl	л	0,008	67	0,54
Этанол	л	0,2	180	36
Итого: 1320,29				

4.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для экспериментальных работ

Таблица 11 - Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
1	Колба круглодонная со шлифом, 250 мл	4	139	556
2	Колба плоскодонная, 250 мл	4	60	240
3	Колба трехгорлая	1	98	98
4	Стакан мерный	6	107	642
5	Цилиндр мерный	2	581	116
6	Колонка хроматографическая	2	472	944
7	Пипетка	2	5	10
8	Холодильник обратный	1	430	430
9	Хлоркальциевая трубка	1	96	96
10	Капельная воронка с противодавлением	1	1699	1699
11	Мешалка механическая	1	2 097*	2 097
12	Мешалка магнитная	2	4 968*	9 936
13	Стеклянная палочка	1	11	11
14	Индикаторная бумага	1	157	157
15	Плитка электрическая	2	399	798
16	Муфельная печь	1	864, 57	864,57
17	Аппарат Сокслета	1	418	418
18	Делительная воронка	1	472	472
19	FTIR-спектрометр NICOLET 5700	1	156 250*	156 250
20	DFS прибор«Thermo Scientific»	1	186 956*	186 956
Итого:				361 926

* -амортизация

4.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

$$Z_{\text{ин}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{E_{\text{д}}}$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.; М – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя; F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таб. 13)

Таблица 26 - Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней:		
- выходные дни	118	118
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени:		
- отпуск	42	28
- невыходы по болезни	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	191	205

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_b \cdot k_p,$$

где Z_b – базовый оклад, руб.;

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

$$Z_m = 17\,000 \cdot 1,3 = 22\,100 \text{ руб}; Z_{дн} = (22\,100 \cdot 11,2) / 191 = 1295,92 \text{ руб}$$

$$Z_m = 17\,000 \cdot 1,3 = 22\,100 \text{ руб}; Z_{дн} = (22\,100 \cdot 11,2) / 205 = 1207,41 \text{ руб}$$

Таблица 27 - Расчёт основной заработной платы с января по май

Исполнители	Z_b , руб.	k_p	Z_m , руб.	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	17 000	1,3	22 100	1295,92	15	19 438,8
Магистрант						9 100
Инженеры	17 000	1,3	22 100	1207,41	1	2414,82 (2 чел)

4.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн}$$

$$Z_{внб} = k_{внб} \cdot Z_{осн}$$

Таблица 28 – Расчет страховых отчислений

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	19 438,8	1915,7
Инженер	2414,82	724,45
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,271	
Итого: 6637,59		

4.3.5 Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

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

где $k_{\text{накл}}$ – коэффициент накладных расходов.

$$C_{\text{накл}} = 0,8 \cdot (19438,8 + 1915,7 + 2414,82 + 724,45) = 19595,02$$

Таблица 29 - Группировка затрат по статьям

Вид работ	Статьи						
	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов),	Специальное оборудование для экспериментальных работ	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Накладные расходы	Итого плановая себестоимость
Теоретическое ознакомление и подбор материала по теме работы	0	0	16 846,96	1660,27	5 015,46	16 982,35	40 505,04
Построение макетов (моделей) и проведение экспериментов	1320,29	18720	3667,16	0	0	753,65	24 461,1
Проведение анализов	0	343 206	2414,82	724,45	850,74	1 224,69	348 420,2
Оценка эффективности полученных результатов	0	0	0	0	0	0	0
Определение целесообразности проведения ОКР	0		2591,84	255,43	771,6	634,33	4 252,84

4.4 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в табл. 16.

Таблица 30 - Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.		
	Текущий проект	Исп.2*	Исп.3*
1. Материальные затраты НИИ	1320,29		
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	361 926	361454	362822
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	30 953,62	30 953,62	30 953,62
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	2684,15	2684,15	2684,15
5. Отчисления во внебюджетные фонды	6637,59	6637,59	6637,59
6. Затраты на научные и производственные командировки	-	-	-
7. Контрагентские расходы	-	-	-
8. Накладные расходы	19595,02	19595,02	19595,02
9. Бюджет затрат НИИ	363 246	362 774	364 142

*- варианты исполнения проекта (варьируемый параметр – хроматографическая колонка)

Таблица 31- Реестр рисков

Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления
Протекание колонки	негативное	4	5	высокий	Постоянно следить за установкой	Высокая скорость элюирования
Попадание инородных объектов в образец в процессе сушки	негативное	1	2	низкий	Помещать в сушильный шкаф; Держать рабочее место в порядке	Загрязненное рабочее пространство

4.5 Определение ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

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

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования (см. табл. 16). Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется:

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

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки; Φ_{ri} – стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

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

$$I_{ri} = \sum q \cdot b_i,$$

где I_{ri} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки; a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки; b_i^a, b_i^p – балльная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания; n – число параметров сравнения.

Таблица 32- Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

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

$$I_{p-исп1} = 4 \times 0,1 + 5 \times 0,15 + 3 \times 0,15 + 4 \times 0,2 + 4 \times 0,25 + 4 \times 0,15 = 4;$$

$$I_{p-исп2} = 5 \times 0,1 + 5 \times 0,15 + 4 \times 0,15 + 5 \times 0,2 + 5 \times 0,25 + 5 \times 0,15 = 4,85;$$

$$I_{p-исп3} = 4 \times 0,1 + 4 \times 0,15 + 3 \times 0,15 + 3 \times 0,2 + 3 \times 0,25 + 3 \times 0,15 = 3,25$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения

разработки ($I_{испi}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исп1} = \frac{I_{p-исп1}}{I_{фин1}}, \quad I_{исп2} = \frac{I_{p-исп2}}{I_{фин2}} \text{ и т.д.}$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность проекта (\mathcal{E}_{cp}):

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп1}}{I_{исп2}}$$

Таблица 33 - Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,99	1	0,98
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4	4,85	3,25
3	Интегральный показатель эффективности	4,04	4,85	3,42
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	0,83	1,42	0,84

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволило выбрать эффективный вариант (Исполнение 2) решения поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

Список публикаций

1. Торломоева А.Э Die Entwicklung der Erforschungen von Benzol in der geschichtlichen Diachronie. Научный руководитель: доцент Прохорец Е.К
2. Торломоева А.Э, Лхагвадорж Я, «Особенности химического состава нефти Крапивинского месторождения». Научный руководитель: к.х.н Коваленко Е.Ю.; к.х.н Чешкова Т.В.
3. Торломоева А.Э, «Особенности химического состава нефти Крапивинского месторождения». Научный руководитель к.х.н Коваленко Е.Ю.; к.х.н. Чешкова Т.В.
4. Торломоева А.Э., к.х.н. Коваленко Е.Ю.; к.х.н. Чешкова Т.В., д.х.н. Сагаченко Т.А., «Химический состав нефти Крапивинского месторождения»
5. Торломоева А.Э., к.х.н. Чешкова Т.В «Состав соединений, связанных через эфирные мостики в молекулах смол нефтей Усинского и Крапивинского месторождений»