

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

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Синтез и исследование реакционной способности арилиодониевых солей в присутствии нано-размерных частиц меди

УДК 661.7

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ4А	Садовский Вадим Васильевич	<i>Садовский</i>	2.06.16

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Юсубова Р.Я.	к.х.н	<i>Юсубова</i>	2.06.16

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Е.В.	к.ф.н	<i>Меньшикова</i>	27.05.2016

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Федорчук Ю.М.	д.т.н	<i>Федорчук</i>	31.05.16

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Биотехнологии и органической химии	Краснокутская Е.А.	д.х.н., профессор	<i>Краснокутская</i>	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 14.03.16 Краснокутская Е.А.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФИО
4ГМ4А	Садовскому Вадиму Васильевичу

Тема работы:

Синтез и исследование реакционной способности арилиодониевых солей в присутствии нано-размерных частиц меди

Утверждена приказом директора (дата, номер)

А.Н. Яковлев от 25.04.2016
№3086/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:

3.06.2016

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе

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

Объект исследования: несимметричные диарилиодониевые соединения.

Сырье – иодбензол, замещенные арилпроизводные

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Аналитический обзор по теме «Синтез и исследование реакционной способности арилиодониевых солей».</p> <p>Задача исследования: Изучение реакционной способности арилиодониевых солей в присутствии нано-размерных частиц меди.</p> <p>Разработка методов получения замещенных иодониевых солей и исследование их свойств.</p>
--	---

<p>Перечень графического материала</p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	
--	--

<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</p> <p><i>(с указанием разделов)</i></p>

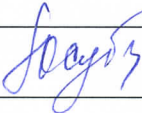
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	к.ф.н., доцент Меньшикова Екатерина Валентиновна
Социальная ответственность	д.т.н., профессор Федорчук Юрий Митрофанович
Литературный обзор на английском языке	ст. преподаватель, Сумцова Ольга Витальевна

<p>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</p>
--

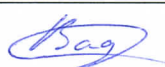
Литературный обзор

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Юсубова Р.Я.	к.х.н		14.03.16

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ4А	Садовский Вадим Васильевич		14.03.16

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

Студенту:

Группа	ФИО
4ГМ4А	Садовскому Вадиму Васильевичу

Институт	физики высоких технологий	Кафедра	биотехнологии и органической химии
Уровень образования	магистр	Направление	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 проекта - 262085,07руб. из них: материалы и оборудование -14 368,55 руб. затраты по основной заработной плате - 156782,4 руб. затраты по дополнительной заработной плате - 14681,09 руб. выплаты во внебюджетные фонды - 37103,36 руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Нормы и нормативы по заработной плате исполнителей темы: коэффициент дополнительной заработной платы 12% от основной заработной платы, премиальный коэффициент к месячному окладу работника – 30% от заработной платы по тарифной ставке, коэффициент доплат и надбавок – 0,2, районный коэффициент для г. Томска – 1,3, выплаты во внебюджетные фонды – 27,1 %

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	Перспективность данной разработки выше среднего. Для улучшения разработки требуются дополнительные инвестиции для ускорения выхода разработки на рынок, что сделает данный реагент более перспективным.
2. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Вычислен бюджет затрат на научно-исследовательский проект по 3 исполнениям. Построен график Гантта Оценены риски проекта
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Наиболее эффективным вариантом решения технической задачи является получения диарилиодоний трифлатов. Интегральный финансовый показатель разработки – 0,85. Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки – 4,15.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. Альтернативы проведения НИ
4. График проведения и бюджет НИ
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Меньшикова Е.В.	к.ф.н.		10.02.2016

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ4А	Садовский Вадим Васильевич		10.02.2016

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
4ГМ4А	Садовскому Вадиму Васильевичу

Институт	физики высоких технологий	Кафедра	биотехнологии и органической химии
Уровень образования	магистр	Направление	18.04.01 Химическая технология

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p><i>1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения) – опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы) – негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу) – чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера) 	<ul style="list-style-type: none"> - для обслуживающего персонала необходимо обеспечить оптимальные, в крайнем случае, допустимые значения метеоусловий на рабочем месте, исключить контакт с вредными, токсичными веществами, которые могут образовываться в процессе синтеза, обеспечить комфортную освещенность рабочего места, уменьшить до допустимых пределов шум от системы вентиляции; - в связи с присутствием электричества для питания электрооборудования и освещенности лаборатории, наличии горючих и взрывоопасных газов, необходимо предусмотреть, если есть, то перечислить средства коллективной и индивидуальной защиты от электро-, пожаро- и взрывоопасности; - необходимо предусмотреть мероприятия по предотвращению негативного воздействия на окружающую природную среду используемых энергетических проявлений и образующихся отходов; - необходимо обеспечить устойчивую работу производственного участка при возникновении чрезвычайных ситуаций, характерных для Сибири – сильные морозы, пурга, человеческий фактор, диверсия.
<p><i>2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> - приводится список законодательных и нормативных документов


Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p><i>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства) 	<ul style="list-style-type: none"> - приводится перечень всех используемых в работе реагентов, их агрегатное состояние, класс опасности (токсичности), механизм воздействия их на организм человека, единицы измерения количества (концентрации); приводится перечень средств коллективной и индивидуальной защиты персонала, а также защиты окружающей среды; - приводятся данные по оптимальным и допустимым значениям микроклимата на рабочем месте, перечисляются методы обеспечения этих значений; приводится расчет освещенности на рабочем месте; - приводятся данные по реальным значениям шума на рабочем месте, разрабатываются мероприятия по защите персонала от шума, при этом приводятся значения ПДУ, средства коллективной защиты, СИЗ;
---	--


<p>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности</p> <ul style="list-style-type: none"> - механические опасности (источники, средства защиты); - термические опасности (источники, средства защиты); - электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); - пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения) 	<ul style="list-style-type: none"> - приводятся данные по значениям напряжения используемого оборудования, классификация помещения по электробезопасности, допустимые безопасные для человека значения напряжения, тока и заземления, перечисляются СКЗ и СИЗ; - приводится классификация пожароопасности помещений, указывается класс пожароопасности помещения, перечисляются средства пожарообнаружения и принцип их работы, средства пожаротушения, принцип работы, назначение маркировка; - пожаровзрывобезопасность.
<p>3. Охрана окружающей среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> - защита селитебной зоны - анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); - анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); - анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); - разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды. 	<ul style="list-style-type: none"> - приводится перечень отходов при эксплуатации установки, перечисляются методы улавливания, переработки, хранения и утилизации образовавшихся отходов.
<p>4. Защита в чрезвычайных ситуациях:</p> <ul style="list-style-type: none"> - перечень возможных ЧС на объекте; - выбор наиболее типичной ЧС; - разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; - разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; - разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий 	<ul style="list-style-type: none"> - приводятся возможные для Сибири ЧС; - разрабатываются превентивные меры по предупреждению ЧС; - разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; - разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.
<p>5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> - специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; - организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны 	<ul style="list-style-type: none"> - приводится перечень ГОСТов, СНиПов и др. законодательных документов, использованных в работе.
<p>Перечень графического материала:</p>	
<p>При необходимости представить эскизные графические материалы к расчётному заданию</p>	<ul style="list-style-type: none"> - Пути эвакуации - План размещения светильников на потолке рабочего помещения

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	10.02.16
--	----------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Федорчук Юрий Митрофанович	д.т.н		10.02.16

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ГМ4А	Садовский Вадим Васильевич		10.02.16

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 120 с., 3 рис., 21 схема, 26 табл., 65 источников, 11 прил.

Ключевые слова: поливалентный иод, иодониевые соли, диарилиодониевые соединения, арилирование.

Объектом исследования являются свойства несимметричных диарилиодониевых соединений.

Цель работы – синтез и исследование реакционной способности арилиодониевых солей в присутствии нано-размерных частиц меди.

В процессе исследования проводился синтез диарилиодоний тозилатов и трифлатов и изучение их реакционной способности в реакциях восстановительного элиминирования в присутствии азидов натрия, нано-размерных частиц меди и порошка меди.

В результате исследования изучено влияние донорных и акцепторных заместителей на ход реакции восстановительного элиминирования диарилиодониевых солей в присутствии азидов натрия и меди.

Область применения: получение реагентов для селективного арилирования в синтезе биологически активных соединений.

Экономическая эффективность работы очень высока, так как данный продукт может являться важным субстратом для получения БАВ и фармпрепаратов в целом.

В будущем планируется расширение ряда замещенных диарилиодониевых солей и изучение их химических свойств.

Определения, обозначения, сокращения, нормативные ссылки

Обозначения и сокращения

ФИА – фенилиодозодиацетат или ДИБ - диацетоксиодбензол

ДМФА – диметилформаид

ЯМР – ядерный магнитный резонанс

ТСХ – тонкослойная хроматография

ПДК – предельно допустимая концентрация

mCPBA – м-хлорнадбензойная кислота

TMSOTf – триметилсилилтрифторметансульфонат

Нормативные ссылки

В работе использованы ссылки на следующие стандарты:

1. ГОСТ 12.0.003-74. «Система стандартов безопасности труда. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация»
2. ГОСТ 12.1.005-88. «Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны»
3. СанПиН 2.2.4.548-96. «Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений»
4. ГОСТ 124021-75. «Системы вентиляции. Общие требования»
5. ГН 2.2.5.1313-03 Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны
6. ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности
7. ГОСТ 12.1.003-88. «Шум. Общие требования безопасности»
8. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки
9. СНиП 23.05-95 «Естественное и искусственное освещение»
10. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.

11. ГОСТ 12.1.013-98 «Система стандартов безопасности труда. Строительство. Электробезопасность. Общие требования»
12. ГОСТ 12.4.009-83 «Система стандартов безопасности труда. Пожарная техника для защиты объектов. Основные виды. Размещение и обслуживание»
13. ГОСТ 12.1.004-91 «Пожарная безопасность. Общие требования»
14. Федеральный закон от 21.12.1994 N 68-ФЗ «О защите населения и территорий от чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера»
15. Инструкция по охране труда при работе с химическими веществами ТПУ-Томск 2008

Оглавление

	Введение	
1	Литературный обзор	15
1.1	Классификация и общие особенности иодониевых солей	15
1.2	Получение диарилиодониевых солей	16
1.3	Применение иодониевых солей	19
1.3.1	Арилирование	19
1.3.2	Введение фтора и применение в ПЭТ	24
1.3.3	Фотохимические реакции	26
1.3.4	Окисление спиртов с помощью алкоксирадикалов	26
1.3.5	Окисление кислот	27
2	Экспериментальная часть	
2.1	Объекты и методы исследования	28
2.1.1	Характеристика используемых веществ	29
2.1.2	Методика синтеза диацетоксиодбензола	31
2.1.3	Методика синтеза диарилиодоний тозилатов	32
2.1.4	Методика синтеза диарилиодоний трифлатов	33
2.1.5	Методика синтеза хлор и бром замещенных диарилиодоний трифлатов	34
2.1.6	Реакция азид натрия с диарилиодоний тозилатами в присутствии нано-размерных частиц меди	35
2.1.7	Реакция азид натрия с диарилиодоний тозилатами в присутствии порошка меди	35
2.1.8	Реакция азид натрия с диарилиодоний трифлатами в присутствии нано-размерных частиц меди	36
2.1.9	Реакция азид натрия с диарилиодоний трифлатами в присутствии порошка меди	37
2.2	Расчеты и аналитика	38
2.3	Результаты проведенного исследования	41
3	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	
3.1	Предпроектный анализ	51

3.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования	51
3.1.2	Анализ конкурентных технических решений	52
3.1.3	SWOT-анализ	53
3.1.4	Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	54
3.1.5	Оценка готовности проекта к коммерциализации	54
3.1.6	Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	56
3.2	Инициация проекта	56
3.2.1	Цели и результат проекта	56
3.2.2	Определение трудоемкости выполнения работ	58
2.2.3	Разработка графика проведения научного исследования	59
3.3	Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	62
3.3.1	Материальные затраты	62
3.3.2	Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ	62
3.3.3	Основная заработная плата исполнителей темы	65
3.3.4	Дополнительная заработная плата исполнителей темы	67
3.3.5	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	67
3.3.6	Контрагентные расходы	68
3.3.7	Накладные расходы	68
3.3.8	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта	69
3.3.9	Реестр рисков проекта	70
3.3.10	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	70
4	Социальная ответственность	
4.1	Анализ вредных и опасных факторов производственной среды	73
4.1.1	Микроклимат	73
4.1.2	Вредные вещества	75
4.1.3	Производственный шум	78

4.1.4	Освещенность	79
4.2	Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды	82
4.2.1	Факторы механической природы	82
4.2.2	Факторы электрической природы	83
4.2.3	Факторы пожарной и взрывной природы	84
4.3	Охрана окружающей среды	86
4.4	Защита в чрезвычайных ситуациях	87
4.5	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	88
	Выводы	91
	Список публикация	92
	Список использованных источников	93
	Приложение А	

Введение

За последние сто лет химия соединений поливалентного иода набрала популярность во многих направлениях органического синтеза. Особое внимание заслуживают соединения иода с валентностью III и V. Данные соединения широко используются в органическом синтезе, в связи с их уникальными свойствами в окислительных процессах с образованием новых химических связей C-C- и C-X-связей, где X=O, N, S, Se, F, Cl, Br, I и т. д.

Диарилиодониевые соли являются наиболее устойчивыми и поэтому наиболее привлекательным классом среди иодониевых солей. Первые соединения диарилиодониевых солей были получены в 1894 году Хартманом и Меером. Диарилиодониевые соли $Ar_2I^+X^-$ являются стабильными соединениями, физические свойства которых зависят от природы анионной составляющей в структуре соли. Химия иодониевых солей очень интенсивно развивается, в частности иодониевые соли, так же как и диазониевые успешно применяются в качестве арилирующих агентов, в реакциях разложения и т.д.

Целью данного исследования является изучение реакционной способности арилиодониевых солей в присутствии нано-размерных частиц меди.

Научная новизна: впервые показано использование нано-размерных частиц меди в реакции восстановительного элиминирования диарилиодоний тозилатов и трифлатов в присутствии азиды натрия.

Практическая значимость работы: получены несимметричные диарилиодониевые соли с донорными и акцепторными заместителями, которые могут быть использованы в качестве мягкого и селективного арилирующего агента.

1. Литературный обзор

1.1. Классификация и общие особенности иодониевых солей

Органические соединения поливалентного иода относятся к двум общим структурным типам: иод (III), соединения **1** и **2**, также называемые λ^3 -иодидами, и иод (V); соединение **3**, или λ^5 -иодиды (схема 1). Атом иода в λ^3 -иодидах **1** имеет в общей сложности 10 электронов и общую геометрию тригональной бипирамиды с двумя гетероатомными лигандами L, занимающими осевые позиции, а наименее электроотрицательная арильная группа и обе пары электронов, находятся в экваториальных положениях. Иодониевые соли **2**, с учетом тесно связанной анионной части молекулы, имеют сходную псевдотригональную бипирамидальную геометрию и, как правило, классифицируются как поливалентные λ^3 -иодиды с двумя углеродными лигандами (R_2IX , **2**). В поливалентной модели, связывание в R_2IX преобразует негибридизованные 5p орбитали йода в линейную X-I-X связь. Такая линейная трехцентровая, четырехэлектронная (3с-4е) связь, имея высокую степень поляризации, и длиннее и слабее, по сравнению с обычной ковалентной связью. Эта связь называется "поливалентной", присутствие этой связи в λ^3 -иодидах определяет их высокую электрофильную активность.

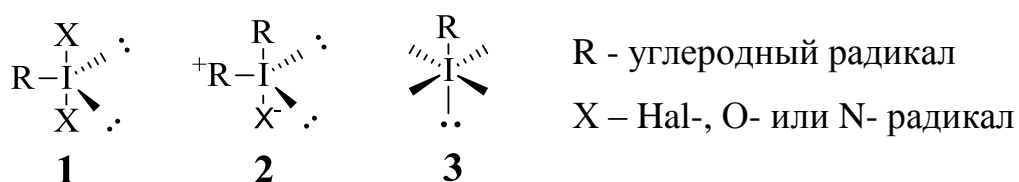


Рисунок 1.1 Общие классы соединений поливалентного иода

Диарилиодониевые соли были обнаружены более ста лет назад, и они наиболее изучены среди иодониевых солей. Их химия была широко освещена в недавних обзорах, в первую очередь, в обзоре Мерритт и Олофссон [1]. С 1980-х годов значительная исследовательская деятельность была сосредоточена на арилиодониевых производных, $Ar(R)IX$, содержащих алкил-, алкенил- или фторалкильную группы в качестве лиганда R. Эти производные нашли

применение в качестве отличных реагентов для электрофильного переноса лиганда R к электроно насыщенным органическим соединениям. Высокая реакционная способность арилиодониевых солей, Ar(R)IX, в этих реакциях объясняется способностью к "быстрому отщеплению" группы ArI. Например, способность к отщеплению PhI группы примерно в 106 раз больше, чем трифлатной [2].

Стабильные иодониевые соли нашли многочисленное практическое применение, например, в качестве катионных фотоинициаторов в области химии полимеров [3], в качестве биологически активных соединений и т.д.

1.2. Получение диарилиодониевых солей

Ранее известные способы получения диарилиодониевых солей основаны на взаимодействии аренов с иодом и иодидом калия в присутствии концентрированной серной кислоты [4]. Диарилиодоний тетрафторбораты **5** и **7** могут быть получены с помощью бор-иод(III) - обменной реакции (диацетоксиид)аренов с тетраарилборатами **4** [5] или арилбороновыми кислотами **6** [6], с последующей обработкой насыщенным раствором тетрафторбората натрия (схема 2). Последние модификации этого процесса включают в себя использование арилтрифторборатов, ArBF₃-K⁺, а не тетраарилборатов в более мягких условиях [7].

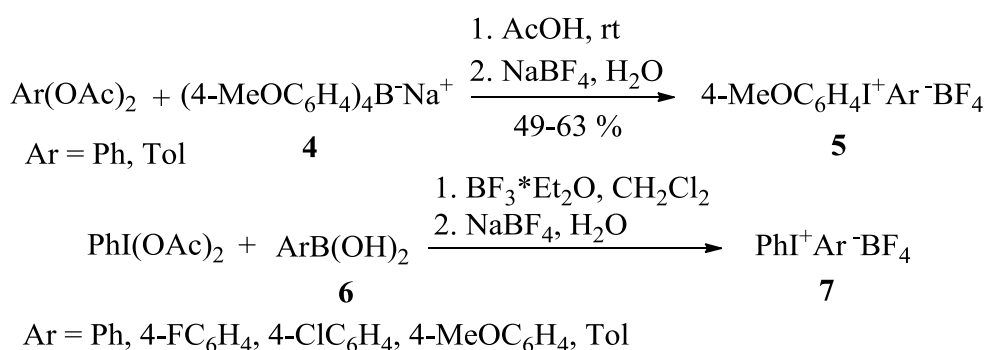


Схема 1.

В другом методе группа японских ученых использует аналогичные олово-иод (III), и кремний-иод (III) - обменные реакции (диацетоксиид)аренов

или иодозобензола с тетрафенилстаннатом или триметилсилилбензолом в присутствии бортрифторидэфирата [8].

Фрох и сотрудники сообщили о подготовке перфторарилиодониевой соли, $(C_6F_5)_2I^+AsF_6^-$, для электрофильного арилирования C_6F_5I со стабильным $C_6F_5Xe^+AsF_6^-$ [9].

Существует много различных методов получения симметричных и несимметричных диарил- и гетарилиодоний сульфатов и органосульфатов. Обычно несимметричные диарил- и гетероарил(арил)- иодониевые тозилаты получают путем реакции [гидрокси(тозилокси)- иод] аренов с аренами [10], арил- или гетероарилтриметилсиланами [11], арилтрибутилстаннатами [12], или арилбороновыми кислотами. Реакция [гидрокси(тозилокси)йод]бензола с арилстаннатами протекает в более мягких условиях по сравнению с арилсиланами и применима к широкому спектру аренов с электроноакцепторными заместителями. Арилбороновые кислоты в целом имеют некоторое преимущество над арилстаннатами в случае электронно-богатых гетероциклических прекурсоров [13].

Общая методика получения несимметричных диарилиодоний трифлатов **10** из иодбензола [14] или (диацетоксиид)-аренов **8** [15] в реакции с аренами **9** в трифторметансульфоновой кислоте, показана на схеме 2. Данная методика проста и позволяет получать диарилиодоний трифлаты с относительно высокими выходами, но имеет очень важное ограничение: используемые ароматические субстраты, должны быть не чувствительны к действию сильных кислот. Кроме того, возможно получение олигомерных иодониевых солей в качестве побочных продуктов, в результате реакции (диацетоксиид)бензола с трифторметансульфоновой кислотой [16]. Данная методика была усовершенствована и позволила проводить реакцию в более селективных и мягких условиях, и получать желаемые арил(фенил)иодониевые трифлаты из (диацетоксиид)-бензола и арилбороновой кислоты в присутствии трифторметансульфонокислоты, при $-30^\circ C$ с 74-97% выходами.

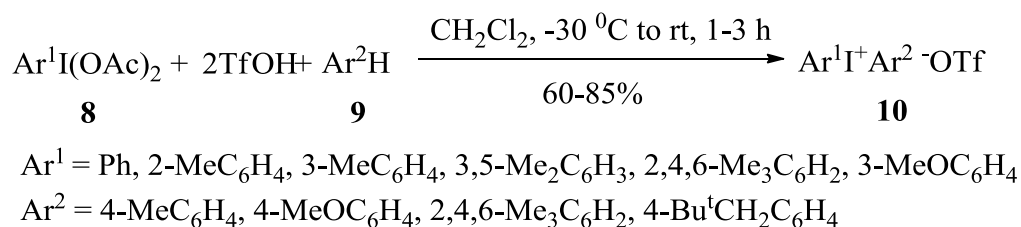


Схема 2.

Недавно были опубликованы результаты модифицированных методов получения диарилиодоний трифлатов [17]. Китакура и Хоссэйн разработали «one-pot» реакцию для получения симметричных диарилиодоний трифлатов с хорошими выходами непосредственно из иодаренов и ароматических субстратов с использованием $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$ как окислителя [18]. Дополнительное усовершенствование данного метода состоит в проведении реакции аренов с элементарным йодом и $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8$ в трифторуксусной кислоте, с последующей обработкой трифлатом натрия (схема 3) [19].

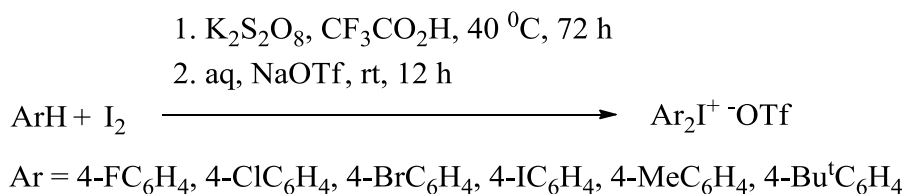


Схема 3.

Олофссон и его сотрудники так же разработали несколько эффективных «one-pot» синтезов диарилиодониевых солей [20]. Предложенный метод позволяет получать как симметричные, так и несимметричные диарилиодоний трифлаты **13** как из электронно-дефицитных, так и обогащенных электронами аренов **12** и арилиодидов **11** с использованием *m*CPBA, в качестве окислителя, и трифторметансульфокислоты (схема 4). Обогащенные электронами диарилиодоний тозилаты получают аналогичным образом с использованием толуолсульфокислоты вместо трифторметансульфоновой кислоты в качестве реагента [21]. Симметричные диарилиодоний трифлаты могут быть синтезированы с помощью модифицированной методики взаимодействия аренов с йодом, *m*CPBA и трифторметансульфокислотой при аналогичных

условиях. Аналогичную методику, основанную на реакции арилбороновых кислот с арилиодидами, mCPBA и $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ недавно использовали для синтеза региоселективных несимметричных диарилиодоний тетрафторборатов [22]. В дальнейшем при совершенствовании такого подхода, были получены ряд симметричных и несимметричных диарилиодоний трифлатов с использованием мочевины- H_2O_2 в качестве экологически чистого окисляющего средства [23]. Кита и сотрудники недавно показали, что гексафторизопропанол (HFIP) может быть использован в качестве высокоэффективного растворителя для синтеза различных диарилиодоний солей [24].

Скульский и Краскевич также сообщили о новом методе получения различных симметричных диарилиодоний бромидов (с 15-88% техническим выходом) из аренов в реакции ArH с NaIO_4 в серной кислоте с последующим добавлением KBr [25].

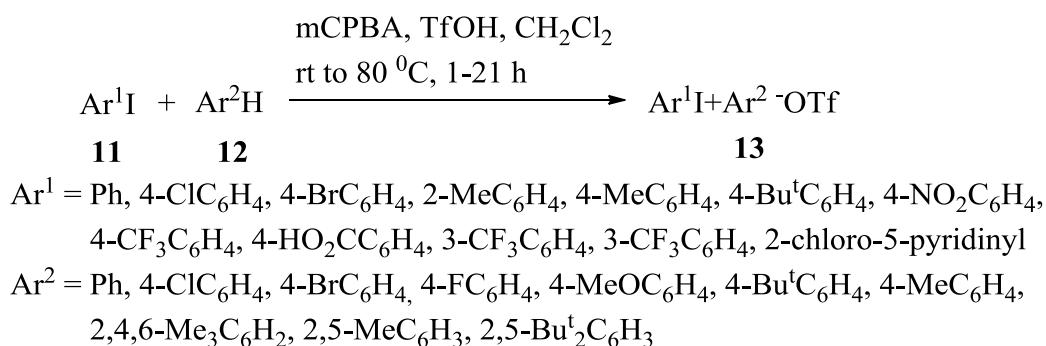


Схема 4.

1.3. Применение иодониевых солей

1.3.1. Арилирование

Наиболее важные и синтетически полезные реакции арилиодониевых солей включают прямое электрофильное арилирование различных нуклеофилов, реакции кросс-сочетания в присутствии переходных металлов.

Многочисленные примеры реакций арилиодониевых солей с такими нуклеофилами, как тиосульфат анионы, фторид-анион, малонаты, и силил-енольные эфиры представлены в обзорах Жданкина В.В. [26].

Механизм сольволиза метокси-замещенных диарилиодоний тетрафторборатов, $\text{ArI}^+\text{Ph}^- \text{BF}_4^-$, в метаноле и 2,2,2-трифторэтанола был исследован в статье Фуджита М. [27]. Продукты сольволиза включают алкоксиды продуктов замещения (ArOR и PhOR), а также иодарены (PhI и ArI). Соотношение продуктов, $\text{ArOR} / \text{PhOR}$, в диапазоне от 8/2 до 4/6. Результаты данного исследования, являются экспериментальным доказательством того, что образование арил-катиона в этих условиях идет через лиганд или $\text{S}_{\text{N}}\text{Ar}_2$ механизм, в котором молекула растворителя выступает как нуклеофил в переходном состоянии. При проведении реакции в инертных (ненуклеофильных) растворителях, некоторые нуклеофилы могут вступать в реакцию с иодониевыми солями. Когда диарилиодониевая соль реагирует с F^- анионом как нуклеофилом, среди продуктов обнаруживается арилфторид. Данная реакция широко применяется для введения ^{18}F изотопа в различные органические субстраты для получения меченых агентов для позитронно-эмиссионной томографии.

Арилирование углеродных нуклеофилов с использованием арилиодониевых солей особенно важно. Соединения, содержащие активную метиленовую группу, такую как малонаты, или соответствующие карбанионы, полученные в результате реакции легко реагируют с диарилиодониевыми солями с образованием альфа-арилированных продуктов [28]. Аггарваль и Олофссон разработали прямое асимметричное альфа-арилирование прохиральных кетонов с использованием хиральной амид литиевой основы и диарилиодониевых солей [29]. В конкретном примере, депротонирование производного циклогексанона **14** с помощью хиральной основы Симпкинса с последующей реакцией с пиридилиодониевой солью дает арилированный продукт **15** с 94% избытком энантиомера (схема 5).

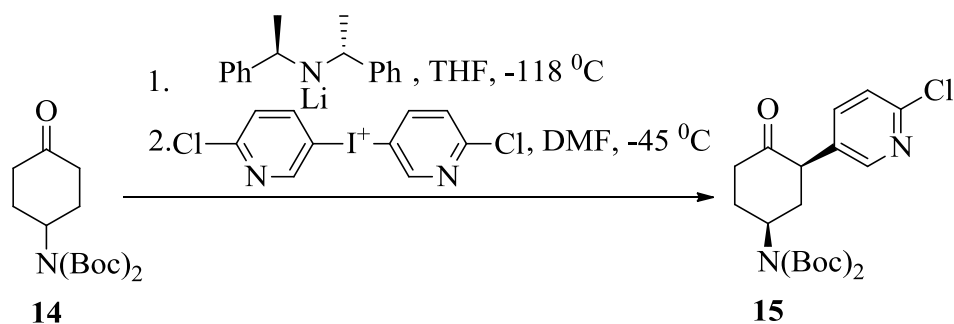


Схема 5.

Кюдо и соотрудники сообщили о региоселективном деароматизирующем фенилирование фенолов и нафтолов с использованием диарилиодониевых солей [30]. Например, обработка нафтолов **16**, замещенных в орто-положении небольшой донорной группой, хлоридом дифенилиодония приводит к их региоселективному орто-фенилированию с получением продуктов **17** (схема 6). Механизм данной реакции включает в себя нерадикальное прямое связывание лигандов на иодном центре в поливалентном соединении. Формирование фенольных эфиров из-за о-фенилирования также может произойти, когда реакцию фенолят-аниона с хлоридом дифенилиодония проводят в полярном апротонном растворителе, таком как ДМФА.

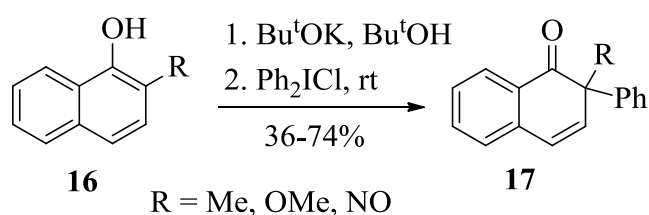


Схема 6.

Индолы и пирролы могут быть эффективно арилированы арилиодониевыми солями в мета-положение при отсутствии металлических катализаторов (схема 7) [31]. Реакция несимметричных диарилиодониевых солей приводит к преимущественной передаче менее стерически затрудненного ароматического фрагмента.

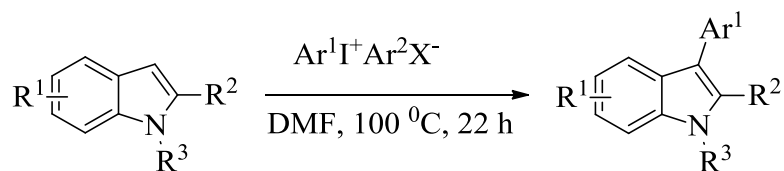


Схема 7.

Тиофен(фенил)иодониевые соли и другие гетероарил(фенил)иодониевые соли могут быть использованы в качестве селективных агентов гетероарилрования в реакциях с этиловым эфиром фенола. Гетероарилрование происходит при комнатной температуре в растворе гексафторизопропанола (HFIP) в присутствии TMSOTf через SET-механизм [32].

О-арилрование соответствующих фенолов с использованием симметричных иодониевых солей было использовано в синтезе гидроксильированных и метоксилированных, полибромированных дифениловых эфиров, некоторые из которых связаны являются природными продуктами. В частности, несколько полибромдифениловых эфиров **20** были получены реакцией иодониевой соли **18** с фенолами **19** в растворе N, N-диметилацетамида в основных условиях (схема 8) [33].

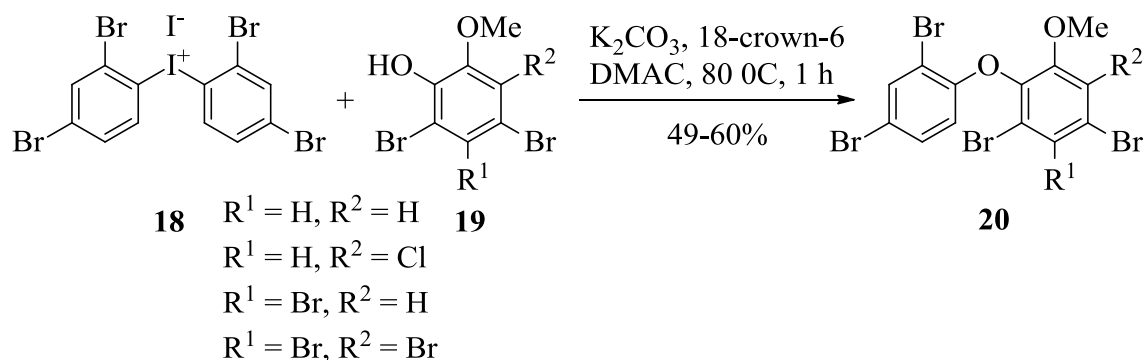


Схема 8.

Олофссон и сотрудники сообщили о важном и высокоэффективном синтезе различных диарильных эфиров с использованием реакции диарилиодониевых солей с фенолами в аналогичных условиях (схема 9).

Полученные продукты включают в себя громоздкие орто-замещенные диарилловые эфиры, которые трудно получить в реакциях с металлами [34].

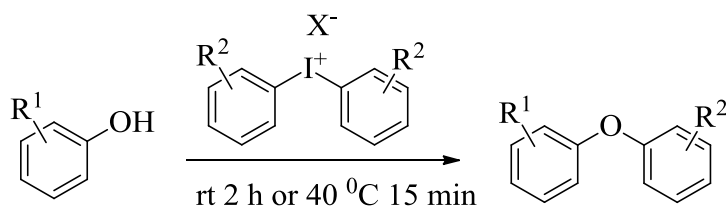


Схема 9.

Арилиодониевые соли применяются для арилирования поверхности углерода [35]. Различные иодониевые соли могут быть использованы в качестве носителей функциональных групп, которые обеспечивают покрытие поверхности углерода с широким спектром функциональных групп, от электроноакцепторных до электронодонорных. Свойства модифицированного материала также широко варьируются.

Арилирование арилиодониевыми солями может быть эффективно катализовано переходными металлами [36]. Арилиодониевые соли могут служить в качестве эффективных реагентов, в медь катализируемом арилировании енолятов лития [37], тиофенов [38], 5-арил-2Н-тетразола [39], производных анилина и фенола [40]. Соли и комплексы палладия являются эффективными катализаторами в реакциях кросс-сочетания диарилиодониевых солей с различными субстратами, такими, как: борорганические соединения [41], оловоорганические [42], силаны [43], свинецорганические триацетаты [44], висмуторганические (V) производные [45], окись углерода [46], аллиловые спирты [47], реактивы Гриньяра, алкены [48], терминальные алкины [49].

Особенно интересным является катализируемое палладием направленное СН активирование / фенилирование замещенных 2-фенилпиридинов и индолов с арилиодониевыми солями, представленных Стенфордом совместно с сотрудниками [50]. В представленном примере, 2-пиридил замещенный субстрат **21** селективно фенилируют в орто-положение, получая продукт **22** с хорошими выходами (схема 10). Предварительные

практические эксперименты предоставили доказательства в поддержку редкого Pd (II) / (IV) каталитического цикла для этого преобразования [51].

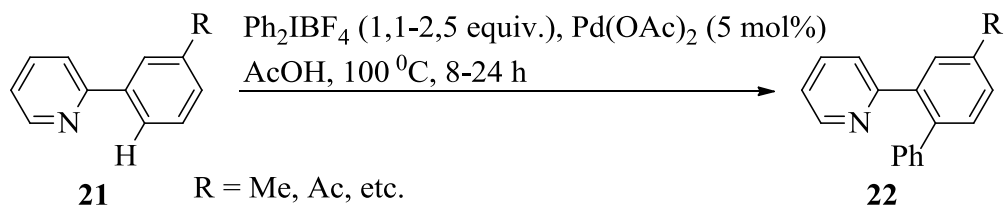


Схема 10.

1.3.2. Введение фтора и применение в ПЭТ

^{18}F -меченные отображающие агенты для позитронно-эмиссионной томографии имеют малое время жизни (из-за короткого периода полураспада радиоактивного ^{18}F) и требуют быстрых и удобных способов введения ^{18}F в органические молекулы субстрата. Реакции с диарилиодониевыми солями обеспечивают такие методы (схема 11) [52].

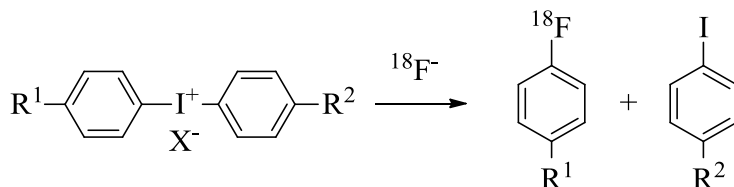


Схема 11.

В случае реакций симметричных солей диарилиодония нет никаких проблем с селективностью, тем не менее, в результате реакции образуется 50% -ый выход целевого продукта, в качестве побочного продукта образуется арилиодид, что приводит к низкой эффективности реакции. Кроме того, в этом случае разделение продуктов реакции - арилиодида и арилфторида затруднено из-за схожести их структур.

Один из способов устранения этой проблемы является соответствующий выбор R^1 и R^2 групп в несимметричных солях диарилиодония, чтобы сделать ароматическое кольцо с R^2 более обогащенным электронами, чем у другого арила (схема 11). Жанг и соавторы сообщили об успешном синтезе [^{18}F] DAA1106 (соединение 24) из диарилиодониевой соли **23** с радиоактивным ^{18}F -анионом (схема 12) [53]. Соединение **24** используют в позитронно-эмиссионной

томографии (ПЭТ) в качестве лиганда для получения изображения, периферического типа, рецептора бензодиазепина.

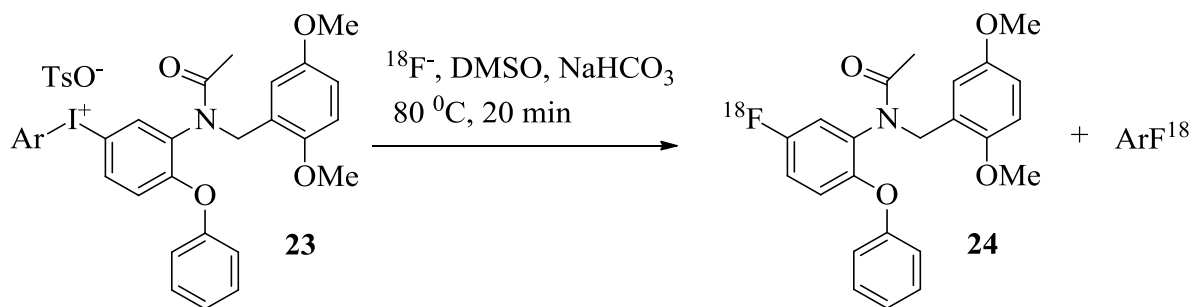


Схема 12.

Коэнен и сотрудники разработали высокоэффективный метод фторирования с использованием арил-(2-тиенил)иодониевых солей, используя способности ароматического кольца, обогащенного электронами, проявлять свойства легко уходящей группы. Группа 2-иодтиенил богатая электронами, позволяет ^{18}F легко входить непосредственно в обогащенный электронами арен как анизолы (схема 13) [54].

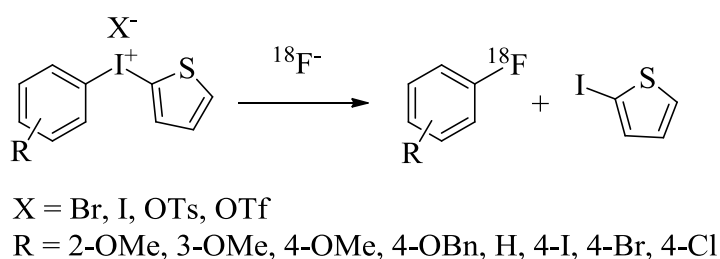


Схема 13.

ДиМагно и сотрудники показали, что в исключительных случаях электронно-насыщенные ареновые кольца могут быть фторированы исключительно в ходе реакции восстановительного элиминирования 5-метокси [2,2]парацicloфан-4-ил диарилиодониевой соли **25** (схема 14) [55]. Применение стерически затрудненных циклофанов обеспечивают высокую степень контроля в реакции фторирования диарилиодониевых солей.

Пайк и сотрудники разработали микрореактор для фторирования с использованием диарилиодониевых солей. Этот аппарат позволяет проводить

реакцию между фторид-анионом и иодониевой солью быстро и продуктивно [56].

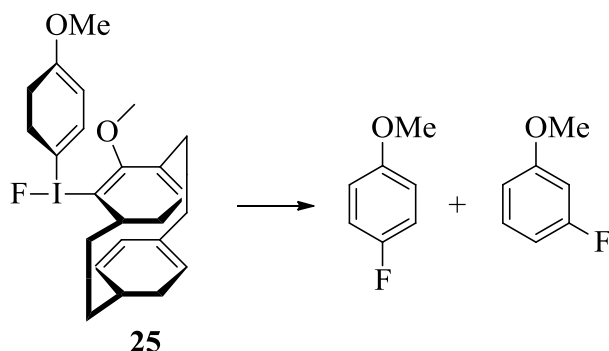


Схема 14.

1.3.3. Фотохимические реакции

Сочетание ДИБ с некоторыми субстратами и последующий фотолиз образующихся промежуточных продуктов, представляют собой хороший путь для создания простых или функционализированных свободных радикалов, которые могут привести к интересным продуктам.

1.3.4. Окисление спиртов с помощью алкоксирадикалов

Большое значение имеет синтетическое генерирование алкоксильных радикалов из спиртов: ДИБ реагирует сначала с элементарным иодом, с образованием ацетил-гипоиодида, который в присутствии спирта превращается в алкильный гипоиодид; при облучении видимым светом генерируется алкоксильный радикал:

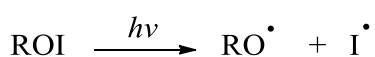
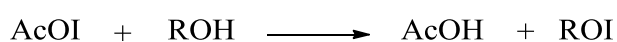
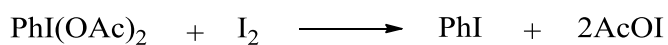


Схема 15.

Окисление спиртов с этой системой, считается лучшим доступным методом для генерации алкокси-модифицированных свободных радикалов, и не только для хороших выходов конечных продуктов, но и для предотвращения использования токсичных металлов, таких как свинец (в тетраацетате свинца) и

ртути (в оксиде ртути). Большое количество субстратов претерпевают полезные, а иногда неожиданные преобразование, которые могут включать в себя циклизацию, функционализацию и фрагментацию (что часто приводит к расширению кольца). В зависимости от субстрата, продукты могут содержать иод.

1.3.5. Окисление кислот

В растворе, ДИБ и карбоновые кислоты вступают в равновесие с образованием уксусной кислоты и [бис(ацилокси)иод]бензолов. В некоторых случаях они не должны быть изолированы; при облучении смеси ДИБ и кислоты, происходит гомолитическое отщепление иод - кислородной связи, при декарбоксилировании образуются очень неустойчивые ацилокси-радикалы, по сравнению с менее нестабильными алкильными радикалами:

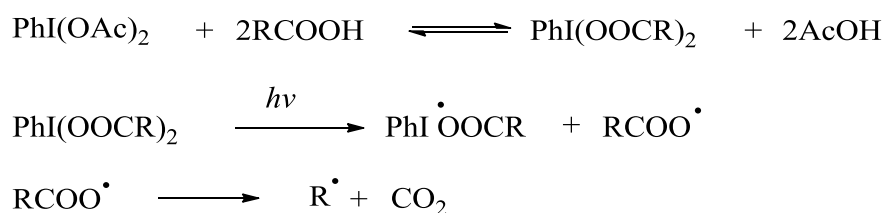


Схема 16.

Эти радикалы были вовлечены в нескольких методах синтеза. Так как, для таких реакции стабильные [бис(ацетокси)иод]бензолы являются предпочтительными.

2. Экспериментальная часть

2.1. Объекты и методы исследования

Трифторметансульфокислота, п-толуолсульфокислота и азид натрия являются товарными продуктами (фирмы Aldrich) соответствующей чистоты и использовались без предварительной очистки, остальные субстраты и реагенты проходили предварительную очистку и подготовку. Органические растворители чистили по известным методикам.

Исследования полученных соединений проводили методом хроматографии в тонком слое сорбента (ТСХ) на «Sorbfil» с закрепленным слоем SiO_2 и «Merck» (SiO_2 , 60 F254, 0.25 мм). Для хроматографирования в тонком слое сорбента использовали системы растворителей:

- 1) гексан – этилацетат (7:1),
- 2) гексан – этилацетат (3:1).

Хроматографирование осуществляли восходящим методом в выбранной системе растворителей, в герметически закрытой камере. Пробы наносили при помощи капилляров. Соотношение растворителей брали в объёмных частях. Детектирование пятен производили под УФ-светом с длиной волны 254 нм.

Температуру плавления веществ определяли на столике Кофлера.

Спектры ЯМР записаны на спектрометре Фурье AVANCE AV 300 фирмы Bruker (Германия), рабочая частота – 300 МГц, растворитель – дейтерированный хлороформ. В качестве внутреннего стандарта использовали тетраметилсилан (ТМС). Все значения химических сдвигов выражены в м.д. (δ - шкала) по отношению к ТМС.

Отгонку растворителей осуществляли на роторном испарителе BUCHI Rotavapor R-3 с использованием в качестве вакуумного насоса Vacuubrand CVC 3000.

2.1.1. Характеристика используемых веществ.

Таблица 2.1 – Характеристика используемых веществ

Вещество	Внешний вид	T _{пл} , °C	T _{кип} , °C	M, г/моль	ρ, г/см ³	Примечание
1	2	3	4	5	6	7
Ацетон	Бесцветная воспламеняющаяся жидкость	- 95	56	58,08	0,79	Растворим в воде, этаноле, эфире, хлороформе. Наркотик, раздражает слизистые оболочки носа, горла, глаз.
Этилацетат	Бесцветная летучая жидкость с резким запахом	- 84	77	88,11	0,902	Растворяется в воде 12 % (по массе), в этаноле, диэтиловым эфире, бензоле, хлороформе.
Гексан	Бесцветная жидкость со слабым запахом	- 95	68	86,18	0,66	Хорошо растворим в органических растворителях, не растворяется в <u>воде</u> . Вызывает сухость при контакте с кожей.
Метилен хлористый	Прозрачная легкоподвижная и легколетучая жидкость с характерным запахом	- 96,7	40	84,90	1,326	Смешивается с большинством органических растворителей. Легколетуч. Работы следует проводить при работающей вытяжной вентиляции.
Ацетонитрил	Бесцветная жидкость со слабым эфирным запахом	- 44,0	81,6	41,05	0,788	Смешивается с водой, этиловым спиртом, диэтиловым эфиром, ацетоном и другими органическими растворителями. Токсичен.
Сульфат натрия б/в	Бесцветные или белые кристаллы	883,0	1429	142,04	2,68	Гигроскопичен. Растворим в воде.
Толуол	Бесцветная жидкость с характерным запахом	-95,0	110,6	92,14	0,867	Смешивается в неограниченных пределах с углеводородами, многими спиртами, эфирами, не смешивается с водой.
Иодбензол	Бесцветная жидкость с эфирным запахом	-31,3	188,4	204,02	1,831	Плохо растворим в воде, хорошо растворим в органических растворителях.

Продолжение таблицы 2.1

1	2	3	4	5	6	7
Мезитилен	Бесцветная жидкость с ароматическим запахом	-44,72	164,7	120,86	0,865	Легко растворим в этаноле, диэтиловом эфире, ацетоне, бензоле, хлороформе.
Трет-бутилбензол	Бесцветная прозрачная жидкость со специфическим запахом	-58	169	134,22	0,867	Легко растворим в этаноле, диэтиловом эфире, ацетоне, бензоле, хлороформе.
Трифторметансульфокислота	Бесцветная, прозрачная, гигроскопичная, негорючая жидкость, дымит во влажном воздухе	-40,0	166	150,08	1,696	Смешивается в любых соотношениях с водой, хорошо растворима в полярных органических растворителях.
П-толуолсульфокислота	Бесцветный очень гигроскопичный и расплывающийся на воздухе порошок	104,0	140	172,2	0,510	Растворим в воде, спиртах, ацетоне, не растворим в диэтиловом эфире.
Серная кислота	Бесцветная, маслянистая жидкость.	-10	330	98,08	1,834	Раздражает и прижигает слизистые оболочки верхних дыхательных путей, поражает легкие. При попадании на кожу вызывает тяжелые ожоги. Гигроскопична.
Уксусная кислота	Бесцветная жидкость с характерным резким запахом и кислым вкусом	16,75	118,1	60,05	1,049	Гигроскопична. Неограниченно растворима в воде. Смешивается со многими растворителями
Перекись водорода	Бесцветная жидкость с «металлическим» вкусом	-0,432	150,2	34,01	1,4	Неограниченно растворима в воде, спирте и эфире. Концентрированные водные растворы взрывоопасны.

Продолжение таблицы 2.1

1	2	3	4	5	6	7
Азид натрия	Бесцветная соль	275	-	65,0	1,846	Легко растворима в воде.
Медь	Золотисто-красный порошок	1085	2562	63,546	8,92	На воздухе покрывается оксидной пленкой
Димедон	Белый порошок	148	-	140,2	-	Легко растворимый в спирте, хлороформе, бензоле, и трудно растворим в петролейном эфире и воде.
Гидроксид калия	Бесцветные, очень гигроскопичные кристаллы	380	1327	56,1	2,1	Водные растворы КОН имеют сильнощелочную реакцию.
Метанол	Бесцветная ядовитая жидкость	-97	64,7	32,04	0,792	Метанол смешивается в любых соотношениях с водой и большинством органических растворителей.
Стирол	Бесцветная жидкость со специфическим запахом	-30,0	145,0	104,15	0,909	Стирол практически нерастворим в воде, хорошо растворим в органических растворителях, хороший растворитель полимеров.

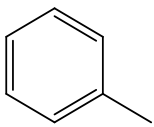
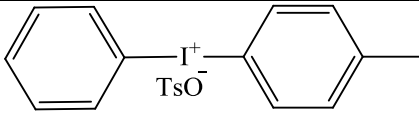
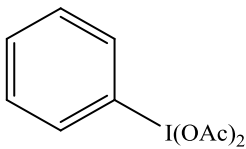
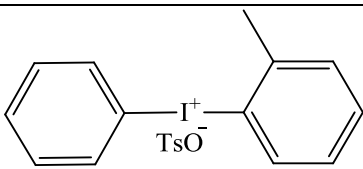
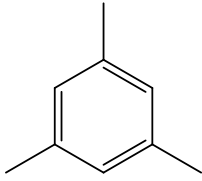
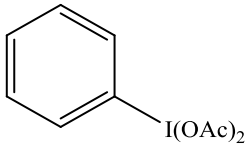
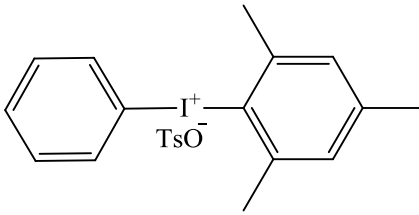
2.1.2. Методика синтеза диацетоксиидбензола

В двугорлую колбу (1 л), снабженную магнитной мешалкой, обратным холодильником, термометром и погруженную в водяную баню, осторожно приливают 305 мл уксусного ангидрида и 70 мл 30%-ой перекиси водорода, доводят температуру бани до 40 С⁰ и перемешивают в течение 4 часов, поддерживая температуру. Затем добавляют 50 г иодбензола, перемешивают 1,5 часа и оставляют на ночь при комнатной температуре. Реакционную смесь разбавляют большим объемом холодной воды со льдом, выпавший осадок отфильтровывают и сушат на воздухе, перекристаллизовывают из минимального количества уксусной кислоты. Выход ДИБ составил 110 г (56 %), т.пл. 158-159 С⁰. Хранили при комнатной температуре в темном месте.

2.1.3. Методика синтеза диарилиодоний тозилатов

К монозамещенному арену (2 ммоль) и ДИБ (1,1 ммоль) и 2 мл уксусной кислоты при охлаждении до 0 С⁰ при интенсивном перемешивании добавили по каплям 0,3 мл концентрированной серной кислоты. Перемешивание продолжали при комнатной температуре в течение 5 часов. Далее реакционную массу охладили до 0 С⁰ и прибавили п-толуолсульфокислоту (2 ммоль). Перемешивание продолжали в течение часа при комнатной температуре, далее прибавляли 10 мл холодной воды, выпавшие кристаллы фильтровали и промывали водой, маточник экстрагировали метиленом хлористым, растворитель отгоняли на вакуумном роторном испарителе. Полученные кристаллы высушивали при комнатной температуре, хранили в темном месте.

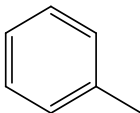
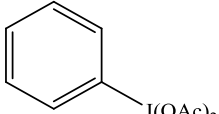
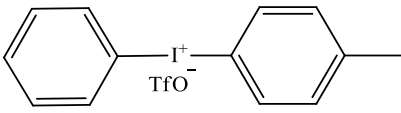
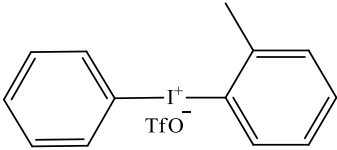
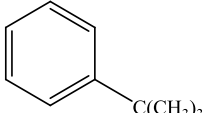
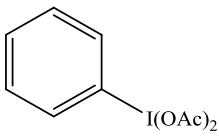
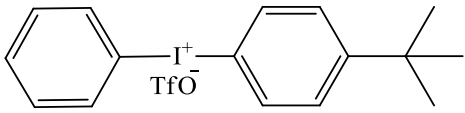
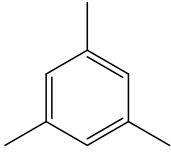
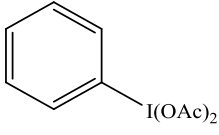
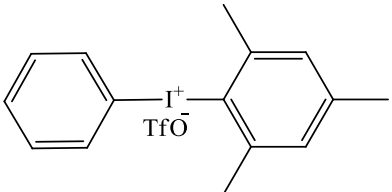
Таблица 2.2 – Продукты синтеза диарилиодоний тозилатов

	Субстраты		Продукты	Выход, %
	1		2	3
1				85% (смесь)
				
2	 			80 %

2.1.4. Методика синтеза диарилиодоний трифлатов

К монозамещенному арену (2 ммоль) и ДИБ (1,1 ммоль) и 2 мл метилена хлористого при охлаждении до $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$ при интенсивном перемешивании добавили по каплям 0,01 мл трифторметансульфокислоты. Перемешивание продолжали в течение часа при комнатной температуре, далее прибавляли 10 мл холодной воды, выпавшие кристаллы фильтровали и промывали гексаном, маточник экстрагировали метиленом хлористым, растворитель отгоняли на вакуумном роторном испарителе. Полученные кристаллы высушивали при комнатной температуре, хранили в темном месте.

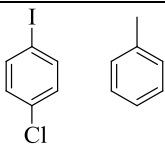
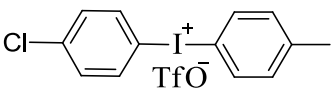
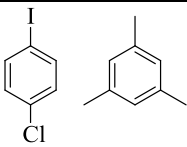
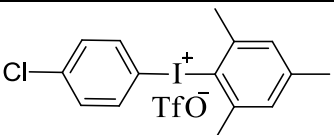
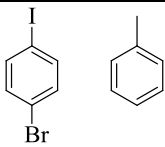
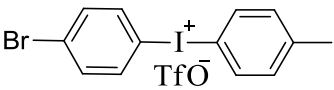
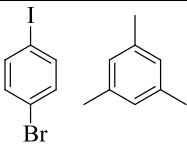
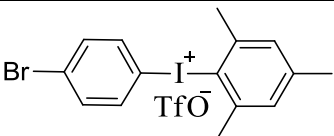
Таблица 2.3 – Продукты синтеза диарилиодоний трифлатов

Субстраты	Продукты	Выход, %
1	2	3
 	 	90 % (смесь)
 		90 %
 		90 %

2.1.5. Методика синтеза хлор и бром замещенных диарилиодоний трифлатов

К п-хлориодбензолу (или п-бромидбензолу) (1 ммоль) и Oxone[®] (1,46 ммоль) при охлаждении и интенсивном перемешивании добавили по каплям 0,8 мл концентрированной серной кислоты. Перемешивание продолжали при комнатной температуре в течение 5 часов. Добавили замещенное производное бензола (1,1 ммоль), далее реакционную массу охладили и прибавили трифторметансульфокислоту (2 ммоль). Перемешивание продолжали в течение пары минут при комнатной температуре, далее прибавляли 10 мл холодной воды, выпавшие кристаллы фильтровали и промывали гексаном и водой, маточник экстрагировали метиленом хлористым, растворитель отгоняли на вакуумном роторном испарителе. Полученные кристаллы высушивали при комнатной температуре, хранили в темном месте.

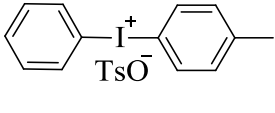
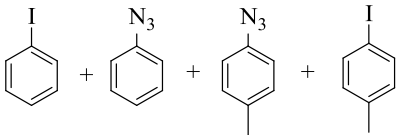
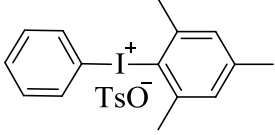
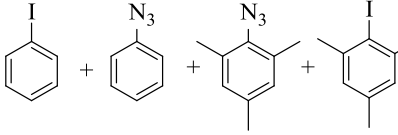
Таблица 2.4 – Продукты синтеза замещенных диарилиодоний трифлатов

Субстраты	Продукты	Выход, %
1	2	3
		61 % (смесь)
		53 %
		60 % (смесь)
		61 %

2.1.6. Реакция азид натрия с диарилиодоний тозилатами в присутствии нано-размерных частиц меди

К диарилиодониевой соли (0,1 ммоль) добавили азид натрия (0,5 ммоль) и частицы нано-размерной меди (5 % масс. от реакционной массы), прилили смесь ацетонитрила и воды в соотношении 3 к 1 (1,2 мл и 0,4 мл соответственно). Перемешивали в течение 10 минут, ход реакции контролировался методами ТСХ и ГХ-МС. К реакционной массе приливалось небольшое количество воды, проводилась экстракция метиленом хлористым, растворитель с растворенными в нем продуктами сушили от остатков воды безводным сульфатом натрия. Растворитель отгонялся на вакуумном роторном испарителе. Продукты реакции хранили в холодильнике.

Таблица 2.5 – Продукты реакции с азидом натрия и наномедью

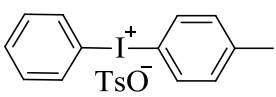
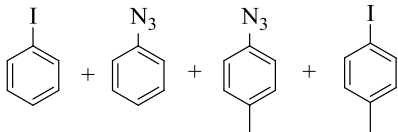
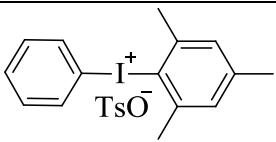
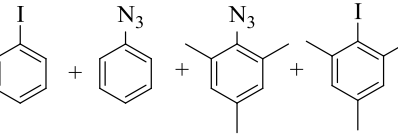
Субстраты	Продукты	Выход, % (смеси)
1	2	3
		44,5 %
		33 %

2.1.7. Реакция азид натрия с диарилиодоний тозилатами в присутствии порошка меди

К диарилиодониевой соли (0,1 ммоль) добавили азид натрия (0,5 ммоль) и порошок меди (5 % масс. от реакционной массы), прилили смесь ацетонитрила и воды в соотношении 3 к 1 (1,2 мл и 0,4 мл соответственно). Перемешивали в течение 10 минут, ход реакции контролировался методами ТСХ и ГХ-МС. К реакционной массе приливалось небольшое количество воды, проводилась экстракция метиленом хлористым, растворитель с растворенными

в нем продуктами сушили от остатков воды безводным сульфатом натрия. Растворитель отгонялся на вакуумном роторном испарителе. Продукты реакции хранили в холодильнике. Структура полученных веществ устанавливалась методом ^1H спектроскопии.

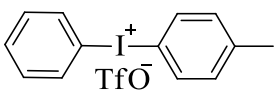
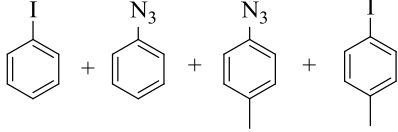
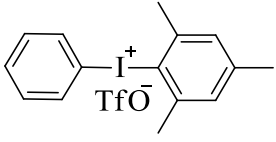
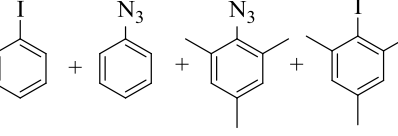
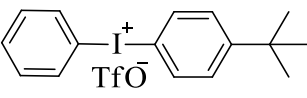
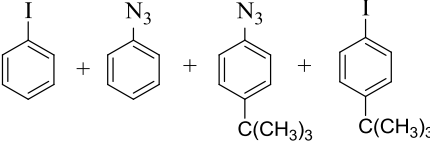
Таблица 2.6 – Продукты реакции с азидом натрия и порошком меди

Субстраты	Продукты	Выход, % (смеси)
1	2	3
		45 %
		35 %

2.1.8. Реакция азиды натрия с диарилиодоний трифлатами в присутствии нано-размерных частиц меди

См. Пункт 2.1.6

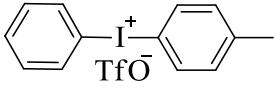
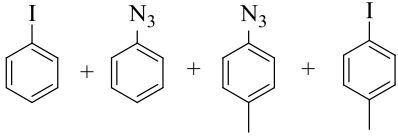
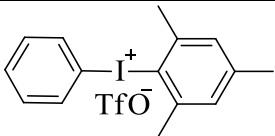
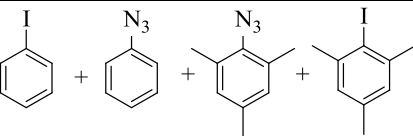
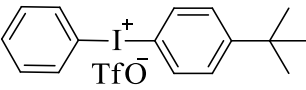
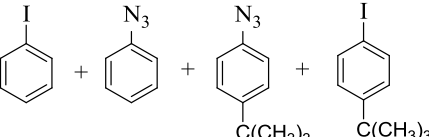
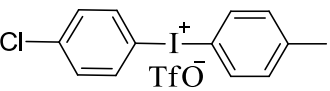
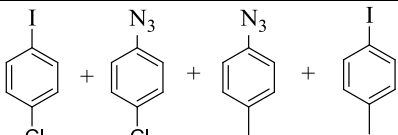
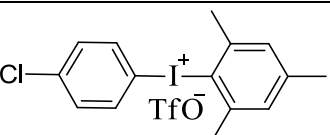
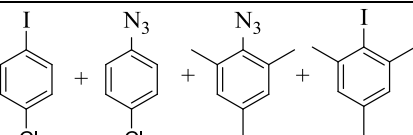
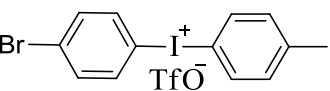
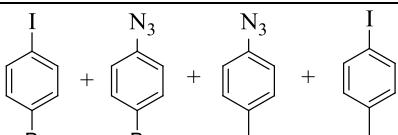
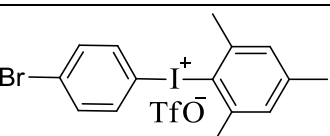
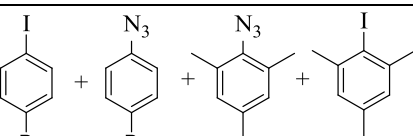
Таблица 2.7 – Продукты реакции с азидом натрия и наномедью

Субстраты	Продукты	Выход, % (смеси)
1	2	3
		44 %
		35 %
		38 %

2.1.9. Реакция азиды натрия с диарилиодоний трифлатами в присутствии порошка меди

См. Пункт 2.1.7

Таблица 2.8 – Продукты реакции с азидом натрия и порошком меди

Субстраты	Продукты	Выход, % (смеси)
1	2	3
		44 %
		39 %
		41 %
		45 %
		39 %
		47 %
		38 %

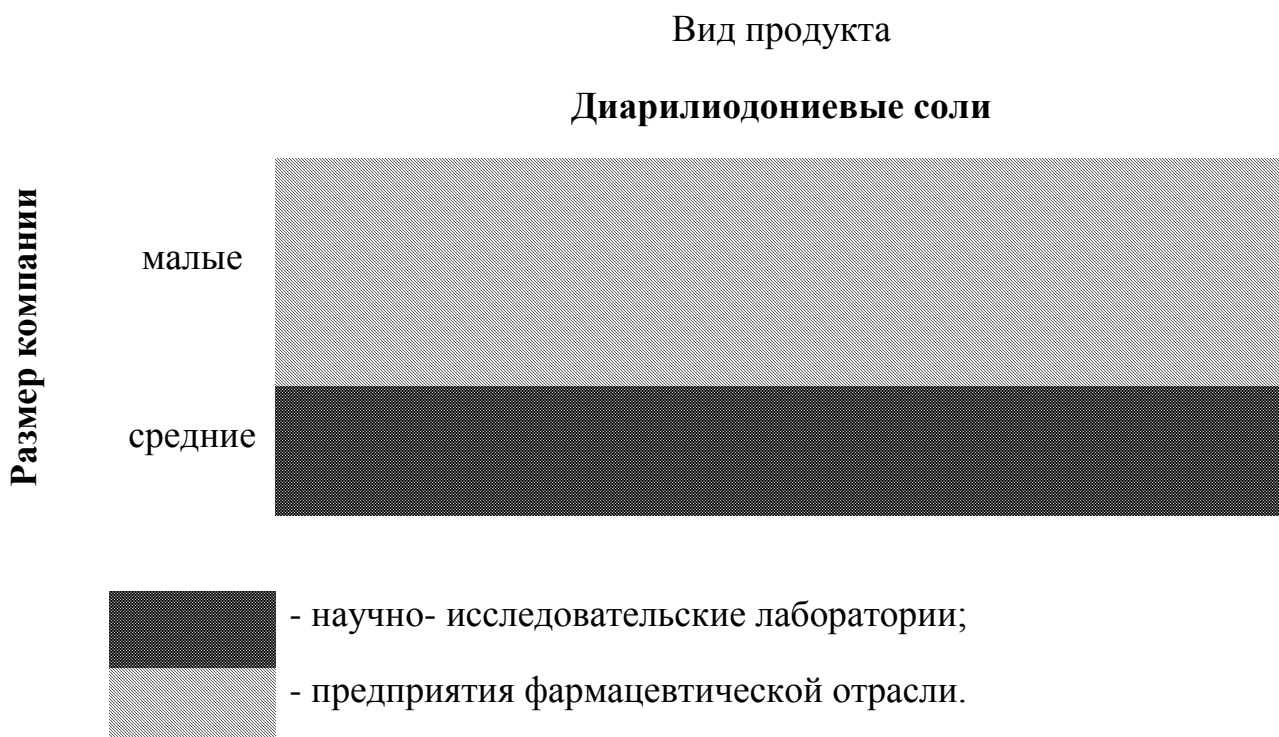
3. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.

3.1. Предпроектный анализ

3.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Продукт: диарилиодониевые соли.

Целевой рынок: предприятия фармацевтической отрасли, научно-исследовательские лаборатории.



Основными сегментами рынка диарилиодониевых солей являются научно-исследовательские лаборатории (средние) и предприятия фармацевтической отрасли (малые). Цель будущего развития – расширение рынка потребителей и увеличение ассортимента продукции.

3.1.2. Анализ конкурентных технических решений

Таблица 1

Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Таблица 3.1

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Повышение выхода целевого продукта	0,15	5	4	4	0,75	0,6	0,6
2. Удобство подбора надлежащего оборудования для производства	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
3. Улучшение качества продукта	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
4. Безопасность	0,12	4	4	4	0,48	0,48	0,48
5. Воспроизводимость	0,15	5	3	4	0,75	0,45	0,60
6. Простота в производстве	0,10	5	4	4	0,5	0,4	0,4
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,1	5	4	3	0,5	0,4	0,3
2. Цена	0,12	4	4	4	0,48	0,48	0,48
3. Финансирование научной разработки	0,06	4	4	4	0,24	0,24	0,24
Итого	1	42	35	35	4,7	3,85	3,9

К_ф – исследование на основе перевода вещества в трифлатную форму

К₁ – исследование на основе перевода вещества в тозилатную форму

К₂ – исследование на основе перевода вещества в галогенидную форму

Исходя из данной оценочной карты сравнения, можно сделать вывод о том, что диарилиодоний трифлаты является конкурентоспособными на рынке. Их преимуществами выступают хорошая растворимость в основных органических растворителях, воспроизводимость, более того, данный реагент

может быть легко получен без какого-либо сложного аппаратного оформления и специфических условий.

3.1.3. SWOT-анализ

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

Таблица 3.2

SWOT-анализ

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Снижение длительности процесса. С2. Снижение температуры процесса С3. Наличие бюджетного финансирования.	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Трудность выделение чистого продукта Сл2. Отсутствие чистого субстрата Сл3. Высокая цена реактивов Сл4. Большие затраты времени на исследование
Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Использование оборудования кафедры БИОХ В3. Сотрудничество с Институтом Химии Нефти СО РАН	СиВ Разработка методик по получению различных производных диарилиодониевых солей Расширение ряда препаратов	СЛиВ Очистка субстратов Сокращение затрат на исследование за счет консультаций сотрудников СО РАН
Угрозы: У1. Отсутствие спроса на новые технологии у производства У2. Развитая конкуренция технологий производства У4. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции У5. Отсутствие предприятия в Томске, которое могло бы провести масштабирование и опробовать методику.	СиУ Создание спроса на новые технологии в производства Доработка методики по ее конкурентным преимуществам Сертификация продукции Продвижение методики	СЛиУ Выполнение некоторых видов работ (спектроскопия ЯМР) на базе Института Химии Нефти СО РАН позволяет решить вопрос с отсутствием дорогостоящего оборудования Создание спроса на новые технологии в производства Доработка методики по ее конкурентным преимуществам Сертификация продукции

1.4. Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

Таблица 3.3

Морфологическая матрица для методов получения диариодониевых солей

	1	2	3
А. Субстрат	Трифлаты	Тозилаты	Галогениды
Б. Выход продукта	90%	80%	80%
В. Длительность процесса	1 ч.	7 ч.	7 ч.

Из всех возможных вариантов исполнение **1** наиболее оптимальное.

1.5. Оценка готовности проекта к коммерциализации

Таблица 3.4

Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	4	3
2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	3	3
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	3	3
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	3
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	3

6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	4	3
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	3	2
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	2
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	2
10.	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	3	3
11.	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	4	2
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	4	2
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	2
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	4
15.	Проработан механизм реализации научного проекта	4	3
	ИТОГО БАЛЛОВ	53	40

По результатам оценки можно сделать вывод о том, что в текущую разработку нужно направлять инвестиции в связи с ее довольно высокой готовностью к коммерциализации. Также необходимо привлечь в команду проекта специалистов в сфере маркетинга и финансов.

1.6. Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Инжиниринг, как метод коммерциализации, является самым подходящим для продвижения данного исследования и молодых специалистов в нем задействованных. Инжиниринг дает возможность наработать навыки масштабирования процесса и найти инвесторов заинтересованных в развитии данного проекта.

3.2. Инициация проекта

3.2.1. Цели и результат проекта.

В данном разделе представлена информация о заинтересованных сторонах проекта, иерархии целей проекта и критериях достижения целей.

Информацию по заинтересованным сторонам проекта представлена в таблице 3.5.

Таблица 3.5

Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Магистр	Получение теоретических и практических знаний, написание диплома
Руководитель	Отработка известных и ранее не изученных методик, получение и исследование

Таблица 3.6

Цели и результат проекта

Цели проекта:	Разработка методов получения замещенных иодониевых солей и исследование их свойств
Ожидаемые результаты проекта:	Получение ряда замещенных арилиодониевых солей Обнаружение биологической активности веществ
Критерии приемки результата проекта:	Ряд полученных соединений и анализы (ГХ-МС, ^{13}C и ^1H) подтверждающие их структуру и свойства

Требования к результату проекта:	Требование:
	Получение продуктов с требуемыми свойствами
	Воспроизводимость
	Высокий выход полученных продуктов
	Оптимизированные условия синтеза

Таблица 3.7

Перечень этапов работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
Выбор направления исследований	2	Выбор направления исследований	Руководитель, дипломник
	3	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, дипломник
Теоретические и экспериментальные исследования	4	Проведение теоретических исследований, изучение литературы	Дипломник
	5	Проведение экспериментов	Дипломник, руководитель
	6	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Дипломник

Обобщение и оценка результатов	7	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель
	8	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель
<i>Проведение ОКР</i>			
Разработка технической документации и проектирование	9	Сбор информации по охране труда	Дипломник
	10	Оформление результатов по охране труда	Дипломник, консультант по охране труда
	11	Подбор данных для выполнения экономической части работы	Дипломник
	12	Оформление экономической части работы	Дипломник консультант по эконом.
Оформление отчета по НИР (комплекта документации по ОКР)	13	Составление пояснительной записки	Дипломник, руководитель
	14	Сдача работы на рецензию	Дипломник
	15	Предзащита	Дипломник, руководитель
	16	Подготовка к защите дипломной работы	Дипломник
	17	Защита дипломной работы	Дипломник, руководитель

3.2.2. Определение трудоемкости выполнения работ

Ожидаемое (среднее) значение трудоемкости :

$$t_{ож\ i} = \frac{3t_{\min\ i} + 2t_{\max\ i}}{5},$$

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

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

$t_{\max i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка; предположительно), чел.-дн.

Продолжительность каждой работы в рабочих днях:

$$T_{pi} = \frac{t_{ож i}}{ч_i}$$

3.2.3. Разработка графика проведения научного исследования

Для удобства построения **диаграммы Ганта** необходимо длительность каждого из этапов работ из рабочих дней перевести в календарные дни:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях;

T_{pi} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях;

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:










$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 104 - 14} = 1,48$$









где $T_{\text{кал}}$ – количество календарных дней в году;

$T_{\text{вых}}$ – количество выходных дней в году;

$T_{\text{пр}}$ – количество праздничных дней в году.

Календарный план-график проведения НИОКР по теме

№ работ	Вид работ	Исполнители	Т _к ^к кал. Дн.	Продолжительность выполнения работ																
				январь			февраль			март			апрель			май			июнь	
				3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2		
1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель	4																	
2	Выбор направления исследований	Руководитель, дипломник	3																	
3	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, дипломник	3																	
4	Проведение теоретических исследований, изучение литературы	Дипломник	51																	
5	Проведение экспериментов	Дипломник Руководитель	65 20																	
6	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Дипломник	30																	
7	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель	11																	
8	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель	2																	
9	Сбор информации по охране труда	Дипломник	6																	

10	Оформление результатов по охране труда	Дипломник, консультант по охране труда	6																			
11	Подбор данных для выполнения экономической части работы	Дипломник	7																			
12	Оформление экономической части работы	Дипломник консультант по экономике	7																			
13	Составление пояснительной записки	Дипломник, Руководитель	15 6																			
14	Сдача работы на рецензию	Дипломник	7																			
15	Предзащита	Дипломник, руководитель	1																			
16	Подготовка к защите дипломной работы	Дипломник	8																			
17	Защита дипломной работы	Дипломник, руководитель	1																			

 Руководитель

 Консультант по охране труда

 Дипломник

 Консультант по экономике

3.3. Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

3.3.1. Материальные затраты

Таблица 3.8

Наименование	Единица измерения	Количество			Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, (З _м), руб.		
		Исп.1	Исп.2	Исп.3		Исп.1	Исп.2	Исп.3
Гексан	л	0,004	0,004	0,004	380	1,52	1,52	1,52
Этилацетат	л	0,002	0,002	0,002	226	0,45	0,45	0,45
Ацетон	л	0,005	0,005	0,005	145	0,72	0,72	0,72
Толуол	л	0,001	0,001	0,001	119	0,12	0,12	0,12
Мезитилен	л	0,001	0,001	0,001	410	0,41	0,41	0,41
Метилен хлористый	кг	0,002	0,002	0,002	198	0,4	0,4	0,4
Ацетонитрил	л	0,001	0,001	0,001	410	0,41	0,41	0,41
Трифторметан-сульфо кислота	л	0,0001	-	-	35 776	3,58	-	-
п-толуол-сульфо кислота	кг	-	0,001	-	3000	-	3	-
Серная кислота	л	-	0,0003	0,0003	85	-	0,03	0,03
Калий бромистый	кг	-	-	0,001	268	-	-	0,27
Сульфат натрия б/в	кг	0,01	0,01	0,01	125	1,25	1,25	1,25
Итого:						8,86	8,31	5,58

Исп.1 – трифаты

Исп.2 – тозилаты

Исп.3 – галогениды

3.3.2. Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования. Определение стоимости спецоборудования

производится по действующим прейскурантам. Стоимость оборудования имеющегося в научно-технической организации, учитываем в калькуляции в виде амортизационных отчислений.

Все расчеты по оборудованию, имеющегося в организации, но используемого для каждого исполнения конкретной темы, сводятся в таблицу 3.9.

Таблица 3.9

Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования,руб.
1.	Магнитная мешалка	3	290	870
2.	Фильтры	1	33	33
3.	Пластинки для тонкослойной хроматографии	1	2565	2565
4.	Цилиндр	3	120	360
5.	Штатив	1	1800	1800
6.	Колба коническая	1	50	50
7.	Стакан	3	91	273
8.	Колба круглодонная	3	120	360
9.	Палочки стеклянные	3	13	39
10.	Колба Бунзена	1	1168	1168
11.	Воронка Шотта	1	245	245
12.	Флакон пеницилиновый	15	1,5	22,5
13.	Термометр	1	200	200
14.	Бумага индикаторная «LACHEMA»	1	157	157
15.	Обратный холодильник	1	430	430

16.	Делительная воронка	1	721	721
17.	Воронка стеклянная	2	20	40
16.	Итого			9333,5

Расчет амортизационных отчислений

Затраты определяются в виде амортизации по формуле:

$$E_{ам} = (\sum K_{обі} * H_{амі} * T_{обі}) / (365 * 100) ,$$

где $K_{обі}$ – стоимость ед. прибора или оборудования, руб.;

$H_{амі}$ – норма амортизации прибора или оборудования, %;

$T_{обі}$ – время использования оборудования, дни.

Расчет затрат на электроэнергию определяется по формуле:

$$E_э = \sum N_i * T_э * Ц_э ,$$

где N_i – мощность электроприборов по паспорту, кВт;

$T_э$ – время использования электрооборудования, час;

$Ц_э$ – цена одного кВт*ч, руб.

$Ц_э$ – 5,1 руб/ кВт*ч

Таблица 3.10

Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования

№	Наименование оборудования	Цена единицы оборудования, $K_{обі}$, руб	Время использования, $T_{обі}$, дни	Норма амортизации, $H_{амі}$, %	Мощность прибора, N_i , Вт	Сумма амортизационных отчислений, $E_{ам}$, руб.	Сумма затрат на электроэнергию, $E_э$, руб
1	ГХ/МС Agilent 5975C	4700000	3	11	2,45	4249,3	37,49
2	Уф лампа EN-280L	23500	10	11	0,008	70,8	0,41
3	Электроплитка с магнитной мешалкой HP-20D-Unit	18500	20	-	0,6	-	61,2
4	Электронные весы E-200	25200	10	8,8	0,03	60,8	1,53

5	Аквадистилля-тор ДЭ-4-2М	19467	30	-	0,003	-	0,46
6	Ротационный испаритель Rotavapor® R-300	180000	10	10	1	493,2	51
Итого:						4874,1	152,09

3.3.3. Основная заработная плата исполнителей темы

В статью включается основная заработная плата научных работников и непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Величина расходов по заработной плате определяем исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок. В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20 –30 % от тарифа или оклада.

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп},$$

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

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

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p,$$

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

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

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d},$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 48 раб. дней $M=10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 3.11).

Таблица 3.11

Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Консультант эк	Консультант бжд
Календарное число дней	365	365	365
Количество нерабочих дней			
- выходные дни	59	59	59
- праздничные дни	14	14	14
Потери рабочего времени			
- отпуск	48	48	48
- невыходы по болезни	0	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	244	244	244

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{tc} \cdot (1 + k_{пр} + k_d) \cdot k_p,$$

где Z_{tc} – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_{пр}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от Z_{tc});

k_d – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2;

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

Произведем расчет фонда заработной платы производственных рабочих и занесем результаты в таблицу 3.12.

Таблица 3.12

Исполнители	Z_{tc} , руб	$k_{пр}$	k_d	k_p	Z_m , руб	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб.дн	$Z_{осн.руб}$
Руководитель	23000	0,3	0,2	1,3	44850	1911,6	51	97491,6
Дипломник	2590	0,3	0,2	1,3	5050	215,25	160	34440

Консультант по экономике	23000	0,3	0,2	1,3	44850	1911,6	7	13381,2
Консультант по охране труда	23000	0,3	0,2	1,3	44850	1911,6	6	11469,6
Итого								156782,4

3.3.4. Дополнительная заработная плата исполнителей темы

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

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей

формуле: $Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}}$,

$Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата (12% от $Z_{\text{осн}}$).

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы.

$Z_{\text{доп. руководителя}} = 0,12 \cdot 97491,6 = 11698,99$ руб.

$Z_{\text{доп. консультанта эк.}} = 0,12 \cdot 13381,2 = 1605,75$ руб.

$Z_{\text{доп. консультанта бжд}} = 0,12 \cdot 11469,6 = 1376,35$ руб.

3.3.5. Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

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

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

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

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

На 2014 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. На основании пункта 1

ст.58 закона №212-ФЗ для учреждений осуществляющих образовательную и научную деятельность в 2014 году водится пониженная ставка – 27,1%.

Таблица 3.13

Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.	З _{внеб}
Руководитель проекта	97491,6	11698,99	29590,65
Консультант по экономике	13381,2	1605,75	4061,46
Консультант по охране труда	11469,6	1376,35	3481,25

3.3.6. Контрагентные расходы

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

В нашем научно-исследовательском проекте контрагентные расходы составляют 3000 руб. на проведение спектроскопического анализа ЯМР ¹Н и ЯМР ¹³С.

3.3.7 Накладные расходы

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, почтовые и телеграфные расходы, размножение материалов и т.д. Их величина определяется по следующей формуле:

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

где $k_{накл}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

3.3.8. Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

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

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект приведен в таблице 3.14.

Таблица 3.14

Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.			Примечание
	Исп.1	Исп.2	Исп.3	
1. Материальные затраты НТИ	8,86	8,31	5,58	
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	14359,69	14359,69	14359,69	
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	156782,4	156782,4	156782,4	
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	14681,09	14681,09	14681,09	
5. Отчисления во внебюджетные фонды	37103,36	37103,36	37103,36	
6. Затраты на научные и производственные командировки	0	0	0	
7. Контрагентские расходы	3000	3000	3000	
8. Накладные расходы	36149,67	36149,58	36149,14	16 % от суммы ст. 1-7
9. Бюджет затрат НТИ	262085,07	262084,43	262081,26	Сумма ст. 1-8

3.9 Реестр рисков проекта

На пути реализации проекта могут возникнуть разного рода риски, представляющие опасность того, что поставленные цели проекта могут быть не достигнуты полностью или частично. Полностью избежать риска практически невозможно, но снизить их угрозу можно, уменьшая действие неблагоприятных факторов. Возможные риски представлены в таблице 3.15.

Таблица 3.15

№	Риск	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска	Способы смягчения риска
1	Перегрев реакционной массы	2	5	высокий	Отслеживание температуры реакции
4	Чистота конечного продукта	3	5	высокий	Экстракция

3.3.10 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), 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 финансовый показатель разработки определяется как:

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

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).

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в разгах (значение больше единицы), либо соответствующее

численное удешевление стоимости разработки в разгах (значение меньше единицы, но больше нуля).

Таблица 3.16

Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Способствует росту производительности труда	0,1	4	4	4
2. Удобство в эксплуатации	0,15	4	3	4
3. Энергосбережение	0,15	5	3	3
4. Надежность	0,20	4	3	4
5. Воспроизводимость	0,25	4	3	4
6. Материалоемкость	0,15	4	4	4
ИТОГО	1	4,15	3,35	3,85

Таблица 3.17

Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,83	1	0,84
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,15	3,35	3,85
3	Интегральный показатель эффективности	5	3,35	4,58
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,67	0,92

Вывод: Сравнение значений интегральных показателей эффективности вариантов исполнения разработки показало, что более эффективным вариантом решения технической задачи, поставленной в магистерской работе с позиции финансовой и ресурсной эффективности, является исполнение 1, получение диарилиодоний трифлатов.