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

Институт природных ресурсов
Направление подготовки: 18.04.01 «Химическая технология»
Кафедра: Технологии органических веществ и полимерных материалов

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Синтез эфиров молочной кислоты с карбоновыми кислотами

УДК: 661.746.3 - 047.84:547.478:664

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5А	Ермакова Екатерина Александровна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Новиков В.Т.	к.х.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Криницына З.В.	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

Томск – 2017 г.

ПЛАНИРУЕМЫ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ПРОГРАММЕ

Код результата	**Результат обучения (выпускник должен быть готов)**
	Профессиональные компетенции
Р1	Применять *глубокие* естественно-научные, математические и инженерные *знания* для создания *новых* материалов
Р2	Применять *глубокие знания* в области современных технологий химического производства для решения *междисциплинарных* инженерных задач
Р3	Ставить и решать *инновационные* задачи *инженерного анализа*, связанные с созданием материалов и изделий, с использованием системного анализа и моделирования объектов и процессов химической технологии
Р4	Разрабатывать химико-технологические процессы, *проектировать* и использовать *новое* оборудование для создания материалов, конкурентоспособных на *мировом* рынке
Р5	Проводить теоретические и экспериментальные *исследования* в области создания *новых* материалов, современных химических технологий, нанотехнологий
Р6	Внедрять, *эксплуатировать* современные высокотехнологичные линии автоматизированного производства, обеспечивать их *высокую эффективность*, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды
	Универсальные компетенции
Р7	Использовать *глубокие знания* по *проектному менеджменту* для ведения *инновационной* инженерной деятельности с учетом юридических аспектов защиты интеллектуальной собственности
Р8	*Активно* владеть *иностранным языком* на уровне, позволяющем работать в иноязычной среде, разрабатывать документацию, презентовать и защищать результаты инновационной инженерной деятельности
Р9	Эффективно работать индивидуально, в качестве *члена и руководителя группы*, состоящей из специалистов различных направлений и квалификаций, демонстрировать ответственность за результаты работы и готовность *следовать корпоративной культуре* организации
Р10	Демонстрировать *глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов* инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах *устойчивого развития*
Р11	*Самостоятельно учиться* и непрерывно *повышать квалификацию* в течение всего периода профессиональной деятельности

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

Институт природных ресурсов
Направление подготовки: 18.04.01 «Химическая технология»
Кафедра технологии органических веществ и полимерных материалов

УТВЕРЖДАЮ:
Зав. кафедрой
_____ _____ Юсубов М.С.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерской диссертации

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ5А	Ермаковой Екатерине Александровне

Тема работы:

Синтез эфиров молочной кислоты с карбоновыми кислотами	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	09.01.2017; № 1/од

Срок сдачи студентом выполненной работы:	7.06.2017

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 – синтез эфиров молочной кислоты с карбоновыми кислотами
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов *(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*	Аналитический обзор литературы Объекты и методы исследования Экспериментальные результаты и их обсуждение Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение Социальная ответственность

работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).	Заключение по работе
Перечень графического материала *(с точным указанием обязательных чертежей)*	Презентация

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы

Раздел	Консультант
	к.х.н., доцент Новиков В.Т.
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	д.т.н., доцент Криницына З.В
Социальная ответственность	ассистент Ратденков Т.А.

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

На русском: 1. Общие сведения об эфирах; 2. Методы синтеза эфиров на основе молочной кислоты и полимеров; 3. Характеристика сырья и вспомогательного оборудования; 4. Методики синтеза и исследования сложных эфиров; 5. Синтез эфиров; 6. Очистка эфиров; 7. Исследование физико – химических характеристик;

На английском: 1. Esters in the global market; 2. General information about esters; 3. Catalysts and the mechanism for obtaining esters; 4. The use of esters; 5. Properies esters; 6. The study of physical and chemical characteristics; 7. Purification of esters; 8. Characterization of raw materials; 9. Product characteristic;

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	1.09.2016

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Новиков В.Т.	к.х.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5А	Ермакова Е.А.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ5А	Ермаковой Екатерине Александровне

Институт	Природных ресурсов	Кафедра	ТОВ ПМ
Уровень образования	Магистрант	Направление/специальность	18.04.01 «Химическая технология»

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:	1. *Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих*
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	1. *Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения* 2. *Планирование и формирование бюджета научных исследований* 3. *Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования*
Перечень графического материала:	
1. *Оценка конкурентоспособности технических решений* 2. *Диаграмма Исикавы* 3. *График проведения и бюджет НИ* 4. *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	Криницына З.В.	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5А	Ермакова Е.А.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ5А	Ермаковой Екатерине Александровне

Институт	ИПР	Кафедра	ТОВПМ
Уровень образования	Магистрант	Направление/специальность	18.04.01 «Химическая технология»

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения: – *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)*	*Работа выполнялась в лаборатории ИПР на кафедре ТОВПМ. Рабочей зоной являлось помещение учебной лаборатории. На производительность труда студента, находящегося на рабочем месте, могут влиять следующие вредные производственные факторы: отклонение температуры и влажности воздуха от нормы, недостаточная освещенность рабочего места. Кроме того, студент может подвергаться действию опасных факторов: отравлению химическими парами, возникновение химических ожогов. Наиболее вероятно возникновение чрезвычайных ситуаций техногенного характера в результате производственных аварий и пожаров.*
2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме	*Федеральный закон № 426-ФЗ от 28 декабря 2013 года «О специальной оценке условий труда»* *Федеральный закон №184-ФЗ «о техническом регулировании от 27 декабря 2002 года.* *Федеральный закон № 123-ФЗ от22.07.2008 г (ред от 10.07 2012г) «Технический регламент о требовании к пожарной безопасности»*
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности: – *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)*	1. *Отклонения температуры и влажности воздуха от нормы могут возникнуть при неблагоприятных метеоусловиях. Оптимальные и допустимые метеорологические условия температуры и влажности устанавливаются согласно ГОСТ 12.1.005-88. Недостаточная освещенность способствует возрастанию нагрузки на органы зрения и приводит к утомляемости организма. В соответствии с характером выполняемых работ освещенность рабочего места по СНиП II-4-79 должна быть 200 Лк – общая освещенность и 300 лк — комбинированное*

	освещение.
2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой произведённой среды в следующей последовательности – *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)*	*Для того, что избежать получения ожога мягких тканей, ожога слизистой, отравления необходимо соблюдать следующие меры индивидуальной защиты согласно ПНД Ф 12.13.1-03:* *1. При работе в хим. лаборатории необходимо надевать халат из хлопчатобумажной ткани.* *2. При выполнении работ, связанных с выделением ядовитых газов и пыли, для защиты органов дыхания следует применять респираторы.* *3. При работе с едкими и ядовитыми веществами дополнительно применяют фартуки, средства индивидуальной защиты глаз и рук.* *4. Для защиты рук от действия кислот, щелочей, солей, растворителей применяют резиновые перчатки.* *5. Для защиты глаз применяют очки различных типов, щитки, маски.*
3. Охрана окружающей среды: – *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.*	*В лабораториях кафедры ТОВПМ используются вредные вещества, по этой причине применяются следующие меры по охране окружающей среды:* *– в канализацию сливаются только нейтральные вещества;* *– жидкости, которые в обычных условиях нельзя нейтрализовать собираются в специальных емкостях – «слив»;* *– твердые вещества собираются в специальные емкости и затем отправляются на утилизацию;* *– отчистка воздуха в помещениях осуществляется с помощью вентиляции.*
4. Защита в чрезвычайных ситуациях: – *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*	*Наиболее типичной ЧС являются производственные аварии и пожары. В целях предотвращения возгорания необходимо соблюдать правила техники безопасности при работе с электрооборудованием, а легковоспламеняемые материалы хранить по возможности в подземных складах. Предусмотренные средства пожаротушения (согласно требованиям противопожарной безопасности СНиП 2.01.02-85): огнетушитель ручной углекислотный ОУ-5, пожарный кран с рукавом и ящик с песком (в коридоре). Кроме того, каждое помещение оборудовано системой противопожарной сигнализации.*
5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – *специальные (характерные для проектируемой*	*В системе обеспечения безопасности жизни и здоровья работников в процессе их трудовой деятельности основная роль*

рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – *организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны*	*принадлежит нормативным правовым актам по охране труда.*
Перечень графического материала:	
При необходимости представить эскизные графические материалы к расчётному заданию (обязательно для специалистов и магистров)	

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ5А	Ермакова Екатерина Александровна		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 120 с., 21 рис., 36 табл., 60 источников, 1 прил.

Ключевые слова: **молочная кислота, этиловый эфир молочной кислоты, полилактид, карбоновые кислоты, полимер, биоразлогаемый, этерификация.**

Объектом исследования является этиловый эфир молочной кислоты.

Цель работы – Исследовать процесс получения этилового эфира молочной кислоты с изменением различных параметров процесса.

В процессе исследования проводились серии научно – исследовательских работ.

В результате исследования была отработана методика по синтезу этилового эфира молочной кислоты.

Основные конструктивные, технологические и технико – эксплуатационные характеристики: лабораторная установка, оснащенная термометром.

Степень внедрения: на данном этапе методика синтеза эфиров на основе молочной и гликолевой кислот используется при оформлении патента РФ.

Область применения: этиловый эфир молочной кислоты планируется в дальнейшем использовать для синтеза биополимеров для изделий медицинского назначения.

Экономическая эффективность/значимость работы: данная работа имеет важное значение, так как полимеры и сополимеры на основе этиловых эфиров применяются в медицине для производства бирезорбируемых синтетических медицинских изделий.

В будущем планируется дальнейшее изучение процесса синтеза этиловых эфиров с целью повышения выхода целевых продуктов.

Нормативные ссылки

В настоящей работе использованы ссылки на следующие стандарты:

1. ГОСТ 5962-2013. Спирт этиловый ректификованный из пищевого сырья. Технические условия. 2014. 5с.
2. ГОСТ 20015-88. Хлороформ. Технические условия. 1990. 5 с.
3. ГОСТ 4204-77 (СТ СЭВ 3856-82) Реактивы. Кислота серная. Технические условия. 1998. 3 с
4. ГОСТ 12.1.003–83. Шум. Общие требования безопасности. -введ. 01.07.1984.- М.: Стандартинформ, 2008. – 13 с.
5. ГОСТ 12.1.002–84. Электрические поля промышленной частоты. Допустимые уровни и требования к проведению контроля на рабочем месте. введ. 01.01.1986.- М.: Стандартинформ, 2009. – 7 с.
6. ГОСТ 12.1.045–84 Электростатические поля. Допустимые уровни на рабочем месте и требования к проведению контроля. -введ. 01.07.1985.- М.: Стандартинформ, 2006. – 3 с.
7. ГОСТ Р 22.0.01-94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положения [Текст]. - введ. 01.01.1995.- М.: Издательство стандартов, 1994. – 11 с
8. ГОСТ 12.2.032-78. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования. -введ. 01.01.1979.- М.: Стандартинформ, 2003. – 9 с.
9. ГОСТ 12.2.033-78. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования. - введ. 01.01.1979.- М.: Стандартинформ, 2003. – 9 с.
10. ГОСТ 12.1.005 - 88. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны. - введ. 01.01.1989.- М.: Стандартинформ, 2008. – 49 с.
11. ГОСТ Р 22.0.01 - 94. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Основные положени. - введ. 01.01.1995.- М.: Издательство стандартов, 1994. – 11 с

Сокращения

Этиллактат – этиловый эфир молочной кислоты

ПЛА – полилактид

МК – молочная кислота

ИК – инфракрасная спектроскопия

Оглавление

Введение……14

1. Технико – экономическое обоснование……..16

1.1. Сегментация мирового рынка……...17

1.2.Рынок пластификаторов для медицинских изделий и растворителей…...18

1.2.1 Рынок пластификаторов для медицинских изделий…….……19

1.2.2 Рынок растворителей……...…20

1.2 Основные производители…….....21

2. Теоретическая часть ……22

2.1. Общие сведения об эфирах……....22

2.1.1 Простые эфиры……22

2.1.2 Сложные эфиры……22

2.1.3 Кинетика процесса……...25

2.1.4 Термодинамика процесса синтеза эфиров карбоновых кислот……...26

2.2 Синтез сложных эфиров молочной кислоты……28

2.3 Способы синтеза сложных эфиров из полимеров молочной кислоты различной молекулярной массой……30

2.4 Катализаторы и механизм получения эфиров……..31

2.5 Применение сложных эфиров……33

2.6 Свойства эфиров оксикарбоновых кислот……36

2.7 Характеристика сырья и вспомогательного оборудования……38

2.7.1 Полилактид……..38

2.7.2 Молочная кислота……40

2.7.3 Этиловый спирт (C2H5OH)……41

2.7.4 Хлороформ (CHCl3)……....43

2.7.5 Бензол (C6H6)……...43

2.7.6 Серная кислота (катализатор H2SO4)……45

2.7.7 Бикарбонат натрия (NaHCO3) ……46

2.8 Характеристика вспомогательного оборудования……46

2.9 Характеристика продукта……...46

2.9.1 Этиловый эфир молочной кислоты (этиллактат)……..46
3. Экспериментальная часть……49
3.1 Методики синтеза и исследования сложных эфиров……...49
3.1.1 Синтез эфиров……...49
3.1.2 Исследование физико-химических характеристик……...57
4. Результаты и их обсуждение……58
Выводы……...64
5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение..66
5.1 Предпроектный анализ……...66
5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования…….66
5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения……66
5.2 Диаграмма Исикавы……68
5.3 Оценка готовности проекта к коммерциализации ……..70
5.4 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования……..71
5.5 Инициация проекта ……71
5.5.1 Цели и результаты проекта……..71
5.6 Организационная структура проекта……72
5.7 Ограничения и допущения проекта……...73
5.8 Планирование управления научно - техническим проектом……..74
5.8.1 План проекта……74
5.9 Бюджет научного исследования……76
5.10 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования…..79
5.10.1 Оценка сравнительной эффективности исследования……79
6. Социальная ответственность……...83
6.1 Оценка условий производственной среды……84
6.2 Защита от опасных и вредных факторов……...84
6.3 Уровень шума и вибрации……..86

6.4 Освещенность рабочих мест……...87
6.5 Электробезопасность……..88
6.6 Пожарная безопасность……..88
6.7 Требования к микроклимату рабочих помещений……..91
6.8 Безопасность в чрезвычайных ситуациях…….92
6.9 Производственная авария……...92
6.10 Стихийные бедствия……..……93
6.11 Социально – военные конфликты……93
Список публикаций……...98
Приложение А……..105

Введение

В современном мире эфиры являются очень важным классом химических веществ, которые применяются в различных областях, таких как парфюмерия, фармацевтика, медицинская отрасль, а так же для получения пластификаторов, растворителей и многое другое.

Одной из важнейших проблем, с которой столкнулась мировая цивилизация сегодня, является проблема загрязнения окружающей среды продуктами нефтехимии. К таким отходам относятся органические растворители (хлоралифатические, ароматические и хлорароматические углеводороды, кетоны, эфиры и др.), представляющие собой легколетучие и токсичные вещества, способные при захоронении или сжигании образовывать высокотоксичные вещества. Таким образом возникла необходимость разработки производства «зеленых» растворителей, способных заменить токсичные. В настоящее время в странах с большими ресурсами растительной биомассы ведутся интенсивные работы по поиску эффективных способов ее переработки, и уже сейчас осуществляется опытно-промышленная реализация некоторых процессов термохимической и микробиологической переработки биомассы в спирты, кислоты, жидкие и газообразные топлива. Так, одним из основных продуктов, получаемых из биомассы, является молочная кислота.

До недавнего времени относительно высокая стоимость молочной кислоты являлась основным фактором, ограничивающим ее широкое применение в качестве исходного сырья для синтеза других продуктов. Разрабатываемые в последнее время новые технологии микробиологического синтеза молочной кислоты позволяют получать относительно чистые растворы молочной кислоты при низкой себестоимости и применять их в качестве сырья для синтеза новых биоразлагаемых растворителей и полимеров, способных вытеснять многие из ныне используемых, прежде всего благодаря их не токсичности, подверженности био- и фотодеградации,

совместимости с природной средой и возможности их выработки из возобновляемого сырья.

Нельзя не отметить существующую на сегодняшний день проблему пластификации в медицинской отрасли, которую решают с помощью этилового эфира молочной кислоты. Этиллактат является ценным химическим продуктом, который отвечает требованиям медицинских изделий, например, нетоксичность, биоразлагаемость, биорезорбируемость.

В связи с вышеизложенным, весьма актуальными являются разработки, направленные на поиск эффективных способов переработки продуктов биосинтеза в ценные биоразлагаемые товары народного потребления.

Объектом исследования является технология получения этилового эфира молочной кислоты.

Новизна работы заключается в изменении различных параметров синтеза этилового эфира молочной кислоты, которые способствуют увеличению выхода конечного продукта.

Цель работы – исследовать процесс получения этилового эфира молочной кислоты с изменением различных параметров процесса.

Задачи:

1. Провести литературный обзор по теме диссертации;
2. Подобрать оптимальные условия для проведения синтеза этиллактата;
3. Отработать контроль реакции и произвести идентификацию продуктов.

Практическая значимость заключается в том, что результаты данной работы позволяют использовать карбоновые кислоты для увеличения чистоты и выхода эфира, являющегося исходным сырьем для получения пластификаторов, используемых для изготовления медицинских изделий.

1. Технико-экономическое обоснование

В современном мире большими темпами растет спрос на молочную кислоту (МК), ее соли и сложные эфиры в промышленности. Это обусловлено тем, данное сырье является экологически безопасным для окружающей среды.

Экологическое преимущество заключается в биоразлагаемости продукта, способности к компостированию отходов полимеров МК, которые уменьшают наличие углекислого газа в атмосфере [1].

В Соединенных Штатах Америки, спрос на эфиры молочной кислоты продолжит увеличиваться [2]. Кроме того, значительно возрастет спрос и в Западной Европе.

Фармацевтические препараты и средства личной гигиены являются важной частью рынка молочной кислоты, ее солей и эфиров. Этот рынок будет продолжать неуклонно расти в Соединенных Штатах и Западной Европе, в то время, как и Китай будет испытывать интенсивный рост в этой области. Применения включают в себя внутривенные растворы, шампуни, мыло анти-старения, α-гидрокси крема и увлажнители[3].

В таблице 1 представлены данные по импорту солей и сложных эфиров молочной кислоты в 2016 году.

Таблица 1 – Импорт солей и сложных эфиров молочной кислоты на мировом рынке [3].

Страна	**Темп роста,%**	**Доля в мире,%**	**Место в мире**
Нидерланды	26,50	21,21	1
Испания	25,11	10,58	2
Германия	10,65	6,58	3
Южная Корея	32,97	5,86	4
Япония	2,78	5,43	5
Бельгия	21,46	3,66	6
Франция	6,96	3,52	7
Италия	4,99	3,32	8

Китай	8,59	2,85	9
Мексика	3,63	1,85	10
Великобритания	12,15	1,33	12
Швейцария	12,50	1,60	13
Индия	-12,48	1,49	14
Польша	1,10	1,35	15
Израиль	16,28	1,25	16
Россия	-26,53	1,19	17
Малайзия	-1,22	1,17	18

1.1. Сегментация мирового рынка

Рынок эфиров в мире в 2016 году оценивался в 635,7 миллионов долларов. Рост обусловлен высоким спросом на смазочные материалы из эфиров, применяющихся в некоторых отраслях промышленности, в том числе автомобильной, авиационной и морской.

Так же основными причинами роста спроса на сложные эфиры являются: высокий спрос на полиэфиры в текстильной и упаковочной промышленности. Быстрый экономический рост индустриализация в автомобильной промышленности развивающихся странах(Китай и Индия).

Сложные эфиры, по оценкам, на конец 2016 составляют основную долю доходов мирового рынка эфиров года и, как ожидается [3]., продолжат доминировать на рынке до 2026 года

Эфиры широко используются в разных регионах, включая Северную Америку, Западную Европу, Азиатско – Тихоокеанский регион, Японию, Восточную Европу, Латинскую Америку и Африку.

Из всех регионов, Северная Америка к концу 2016 года доминирует на рынке с 26,8% .

По мнению исследователей рынка, ожидается [4], что в Северной Америке рынки эфиров в совокупности составляют 49,6% выручки от общего объема рынка эфиров к 2026 году.

Ключевые игроки на глобальном рынке эфиров включают «BASFSE», корпорацию «ExxonMobil», «NYCOSA», «Hatco», специализированные продукты партнеров L.P, PMCBiogenix, Inc., Cargill, Inc. And CrodaInternational, Plc.

В настоящее время в мире ведется широкое внедрения синтеза экологически приемлемых веществ и растет спрос на сложные эфиры оксикарбоновых кислот.

Примерно 85% (около 50 000 тонн) этиллактата производится во всем мире для пищевых продуктов, а остальная часть используется в других отраслях промышленности, таких как текстильной, косметической, кожевенной, фармацевтической промышленности и при производстве пластификаторов [4].

1.2. Рынок пластификаторов для медицинских изделий и растворителей

Пластификатор-это вещество, придающее полимеру гибкостные, прочностные характеристики, делая их простыми в обращении за счет внутренних модификаций молекул полимера. Существует более 300 различных типов пластификаторов.

Спрос на большинство пластификаторов в значительной степени зависит от общих экономических условий. Строительство, ремонт, автомобильное производство, и производство оригинального оборудования, коммуникации, пленки и листы (каландрированные и прессованные), ткани с покрытием, и дисперсии (полы и другие) являются крупнейшими рынками для пластификаторов.

Эфиры фталевой кислоты, известные как фталаты, являются преобладающим типом пластификаторов, производимых и потребляемых в мире.

70 % мирового потребления пластификаторов приходится на фталаты в 2014, а 65 % мирового потребления к 2019 году. Сокращение доли рынка произошло в значительной степени благодаря стремительному росту потребления пластификаторов.

Китай является крупнейшим по величине рынком пластификаторов в мире, что составляет 43% мирового потребления в 2014 году; он также имеет самый высокий прогноз темпов роста потребления в 2016…2019 гг., вызванный повышенным расходом пластификаторов на товары во внутреннем и внешнем рынке. Другие страны Азии, включая Японию, становятся вторыми по потреблению пластификаторов, что составляет 16 % в 2016 году, за ней следуют Западная Европа (14 %) и Северная Америка (12 %)[5].

Спрос на пластификаторы в Северной Америке будет расти умеренными темпами (2,4% в год) в период 2016…2019 гг [5]. Рост европейского спроса прогнозируется в среднем на уровне 0,7 % в 2014…2019 гг.; рынки в Центральной и Восточной Европы, как ожидается, будут расти более высокими темпами от 2,7% годовых. В целом, мировое потребление пластификаторов будет умеренно расти на уровне около 4% в год в ближайшие несколько лет.

1.2.1 Рынок пластификаторов для медицинских изделий

Большинство медицинских приборов для энтерального питания изготовлены из пластифицированного поливинилхлорида (ПВХ).

Наиболее часто используемые пластификаторы – это фталаты. В Западной Европе около одного миллиона тонн фталатов производится ежегодно, из которых около 900000 тонн используются для пластифицирования поливинилхлорида.

Пластификаторы из ПВХ используются также для производства медицинских изделий, таких как медицинские трубки и мешки для крови.

Применение пластификаторов в медицинской отрасли растет и рынок медицинских изделий, как и ожидалось, вырос более чем на 3 % к 2015 году.

На гибкий поливинилхлорид приходится 80…90% мирового потребления пластификаторов. С 2011 года Китай обеспечил большую часть прироста мощности и потребления пластификаторов.

Большим спросом на рынке сегодня пользуются композитные материалы, в которых в качестве связующей (полимерной) основы используются биоразлагаемые полимеры.

Так же большой интерес на рынке эфиров уделяется эфирам молочной кислоты. На сегодняшний день в медицинской отрасли существует проблема пластификации для имплантов различных медицинских изделий. Сырьем для получения пластификаторов для таких полимеров служат эфиры молочной кислоты [5]. Компания «Bioglass®» вывела на рынок несколько имплантов, принесшие пользу тысячам людей.

1.2.2 Рынок растворителей

Как известно, эфиры широко используются для производства различных растворителей. Ситуация производства растворителей на мировом рынке следующая:

Азиатско-Тихоокеанский регион доминирует на мировом рынке растворителей и составляют более 40% от общего объема рынка в 2013 году. Азиатско-Тихоокеанский регион, как ожидается, будет самым быстрорастущим региональным рынком для растворителей, по оценкам, среднегодовой темп роста 3,7% с 2014 до 2020 года. Рост расходов на строительство в Китае и Индии в сочетании с нарастающими темпами индустриализации в этих странах ожидается рост производства растворителей.

Нельзя не отметить, что Северная Америка и Европа тоже являются весьма зрелыми рынками для производства растворителей.

Примером таких растворителей могут служить этиловые эфиры молочной кислоты.

Этиллактат является биоразлагаемым растворителем. Его свойства и производительность оказались удовлетворяющими и превзошли свойства традиционных растворителей, таких как толуол, метилпирролидон.

Спрос на все растворители составляет около 5 млн. тонн ежегодно.

1.2 Основные производители

Азиатско-Тихоокеанский регион является крупнейшим рынком не только потребления, но и производства эфиров. Это связано с такими факторами, как доступность сырья, быстрый рост промышленности и производственных мощностей в развивающихся странах.

Основные производители эфиров на мировом рынке: «BASF SE», «CargillIncorporated», корпорация «Эксон Мобаил», ООО «DAK Americas LLC», компания «TheDowChemical», «КемтураКорпорейшн» и «НАЙКО» [6].

2. Теоретическая часть

2.1. Общие сведения об эфирах

2.1.1 Простые эфиры

Простые эфиры – это вещества, в которых атом водорода гидроксильной группы спирта замещен на углеводородный радикал.

Внешне представляют собой бесцветную, прозрачную и подвижную жидкость со специфическим запахом и жгучим вкусом [7].

Простые эфиры имеют химическую формулу:

$$R - O - R',$$

где R и R' являются углеводородными радикалами.

Простые эфиры выделяют только синтетическим путем. Существуют следующие способы получения простых эфиров следующие:

1. По синтезу Вильямсона при взаимодействием галогеналкилов с алкоголятами:

$$RONa + R'Cl \rightarrow ROR' + NaCl$$

2. Дегидратация спиртов в присутствии минеральных кислот

$$2\ CH_3CH_2OH \rightarrow CH_3CH_2OCH_2CH_3 + H_2O$$

3. Алкилированием спиртов алкенами:

$$RCH = CH_2 + R'OH \rightarrow R – CH(CH_3) - OR'$$

2.1.2 Сложные эфиры

Сложными эфирами называют производные кислот, где водород замещается на алкильные, либо углеводородные радикалы.

Общая формула сложных эфиров:

$$- R\text{-}C(O)\text{-}O\text{-}R',$$

где R и R' – углеводородные радикалы.

Сложные эфиры делятся в зависимости от производной кислоты, вступившей в реакцию. Они могут быть как неорганическими, так и карбоновыми кислотами.

Сложные эфиры получают путем взаимодействия карбоновой кислоты с соответствующим спиртом в присутствии кислотного катализатора. Данная реакция называется реакцией этерификации. Равновесие можно смещать в сторону продукта реакции, используя избыток спирта или карбоновой кислоты.

Эфиры могут быть получены из производных карбоновых кислот, особенно ацилгалогенидов и ангидридов, путем их взаимодействия с соответствующим спиртом в присутствии слабого основания [8].

Название эфира зависит от комбинации карбоновой кислоты и спирта, используемых для получения сложного эфира. Например, этилацетат может быть получен из уксусной кислоты и этанола.

Карбоновая кислота содержит группу -COOH, а в сложном эфире водород в этой группе замещен углеводородной группой. Это может быть алкильная группа, такая как метил или этил, или одна, содержащая бензольное кольцо, такие как фенильная или бензильная группа. Так же эфиры могут быть получены из карбоновых кислот и спиртов [8]:

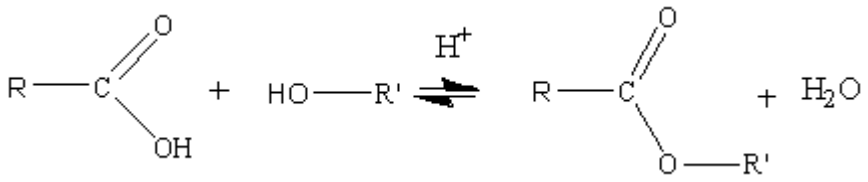


Рисунок 1 – взаимодействие кислоты и спирта.

Среди сложных эфиров особое место занимают природные эфиры. В качестве таких эфиров выступают жиры и масла, образованные трехатомными спиртами и высшими жирными кислотами, которые содержат четное число углеродных атомов.

Чтобы узнать является ли вещество жиром или маслом определяют точки плавления. Жиры обычно содержат насыщенные цепи, которые обеспечивают более эффективные дисперсионные силы Ван-дер-Ваальса между молекулами: для отделения цепей требуется больше энергии, в связи с этим увеличивается температура плавления.

Эфиры являются неполярными из-за присутствия алкильной группы по обе стороны от центрального кислорода. Наличие крупных алкильных групп, находящихся рядом с атомом кислорода, в значительной степени уменьшаю его участия в создании водородной связи. Поэтому, эфиры имеют более низкие температуры кипения по сравнению со спиртами с аналогичной молекулярной массой. Однако, с увеличением алкильной цепи разница в точках кипения становится меньше. Это связано с тем, что при увеличении числа атомов углерода, увеличивается влияние Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий, поэтому число электронов также увеличивается. Две одинокие пары электронов, присутствующие на атомах кислорода, позволяют эфирам образовывать водородные связи с водой. Эфиры более полярны, чем алкены, но не так полярны, как сложные эфиры, спирты или амиды сопоставимых структур.

Эфиры имеют относительно низкую химическую реактивность, но они более реакционноспособны, чем алканы. При сопротивлению гидролизу, эфиры часто расщепляются кислотами с образованием алкилгалогенида или спирта. Эфиры имеют тенденцию образовывать пероксиды в присутствии кислорода или воздуха.

Эфиры могут быть получены в лабораторным путем – дегидратации спиртов, нуклеофильным замещением алкилгалогенидов алкоксидами или электрофильным присоединением спиртов к алкенам.

Характерной чертой эфиров карбоновых кислот является гидролитическое расщепление сложноэфирной связи, происходящее под воздействием воды. В нейтральной среде расщепление будет протекать медленно. Процесс увеличивается в присутствии кислот или оснований, так

как ионы водорода и гидроксогруппы катализируют данный процесс. Действие гидроксильных ионов будет более эффективно.

В присутствии щелочей протекает процесс омыления. Полное омыление сложного эфира происходит при количестве щелочи, способной нейтрализовать образующуюся кислоту. Данным способом в промышленности получают высшие карбоновые кислоты в виде солей щелочных металлов, которые представляют собой мыло. Ферменты, содержащиеся в растительных маслах могут быть прогидрированы (водород присоединяется к двойным связям) с образованием соединений по составу близких к животным жирам.

2.1.3 Кинетика процесса

Реакция этерификации чаще всего идет по бимолекулярному механизму, где происходит разрыв ацил - кислородной связи.

Стадии равновесные, их обратное протекание приводит к образованию сложного эфира, либо к алкоголизу при использовании спирта.

Кинетическое уравнение данного механизма будет выглядеть следующим образом:

$$r = k_1 [H^+]([RCOOH][R'OH] – [RCOOR'][H_2O]/K,$$

где k_1 – константа скорости, K – константа равновесия.

При удалении из смеси летучих продуктов реакции снижается их концентрация и в дальнейшем ее расчет возможен с учетом кинетики массообена.

Механизм реакции этерификации спиртов с ангидридами в условиях кислотного катализа делится на несколько стадий стадии:

- быстрая реакция спирта с ангидридом, описанная следующим кинетическим уравнением:

$$r = k_1 [H^+]_{([RCO)^2O)[R'OH]}$$

- медленная этерификация, где происходит образование карбоновой кислоты.

Процесс реакции этерификации хлорангидрдов протекает в отсутствии кислотного катализа.

На равновесие и скорость реакции влияет строение спирта. С увеличением и разветвлением алкильной группы будет снижаться скорость реакции. Медленнее всех в реакцию этерификации вступают фенолы и третичные спирты. Скорость их реакции, в сравнении с первичными спиртами, ниже в 100 раз, для вторичных спиртов медленнее в 6 - 10 раз.

Если в молекуле карбоновой кислоты происходят какие – либо структурные изменения, то эти изменения влияют на скорость реакции, не изменяя равновесия. Поэтому при удлинение или разветвление углеводородной цепи кислоты происходит увеличение константы равновесия и снижается скорость этерификации.

Скорость реакции тризамещенной уксусной и ароматических кислот значительно меньше, чем для уксусной кислоты примерно в 40 – 100 раз. Муравьиная кислота имеет самую высокую реакционную способность.

2.1.4 Термодинамика процесса синтеза эфиров карбоновых кислот

Реакция спиртов и карбоновых кислот в жидкой фазе имеет тепловой эффект близкий к нулю. В связи с этим реакции переэтерификации, алкоголиза и ацидолиза протекают без выделения или поглощения тепла. Следовательно, константы равновесия этих реакций не зависят от температуры.

Взаимодействии спирта с хлорангидридом кислоты и ангидридами спиртов сопровождается экзотермическими процессами.

Реакция этерификации карбоновых кислот и спирта являются обратимыми, и равновесие данной реакции выражается константой равновесия, в следующем виде:

$$Кс = \frac{[RCOOR'][H2O]}{[RCOOH][R'OH]}$$

Константа равновесия будет зависеть от того, какое строение имеет кислота и спирт. У первичных ненасыщенных спиртов, имеющие в своем строении прямую цепь константа равновесия будет равной 4,0 – 4,5. Уменьшается константа равновесия в том случае, если в молекуле спирта происходить удлинение углеводородной цепи. У вторичных насыщенных спиртов, константа равновесия варьирует в пределах от 2,0 до 2,5, что значительно ниже константы первичных ненасыщенных спиртов.

Самые низкие константы равновесия имеют реакции этерификации фенолов и третичных спиртов, находящиеся в пределах от 0,005 до 0,001. Степень конверсии в данном процессах будет рана 6 – 10 %.

Строение карбоновой кислоты не влияет на равновесие реакции этерификации. На данный процесс влияет строения спирта. Чем длиннее и разветвлённей цепь в молекуле спирта, тем выше константа равновесия. При взаимодействии тризамещенных уксусных и ароматических кислот с первичными насыщенными спиртами в жидкой фазе константа равновесия достигает 8 – 10.

Более высокой константой равновесия обладает газофазная этерификация карбоновых кислот и спирта. Данная реакция экзотермическая, зависящая от температуры. Получение этилового эфира уксусной кислоты в газовой фазе константа равновесия при температуре 150 ºС равна 39, а при температуре 300 ºС составляет 9.

Для того чтобы повысить конверсию исходных реагентов в сложном эфире существуют разные подходы. Если реакция является жидкофазной, то из реакционной массы отгоняют воду. Если отгонка невозможна или процесс газофазный, то для повышения степени конверсии берется избытке один из реагентов, как правило, самый дешевый. Ели это гидролиз сложных эфиров, то для увеличения степени конверсии реакцию проводят с избытком воды.

При алкоголизе и синтезе сложных эфиров реакцией этерификации получаем следующие константы:

$$RCOOR' + R''OH \leftrightarrow RCOOR' + R'OH$$

$$К_{алк} = \frac{[RCOOR'][R'OH]}{[RCOOR'][R''OH]}$$

$$RCOOH + R'OH \leftrightarrow RCOOR' + H_2O \qquad K_1 = \frac{[RCOOR'][H2O]}{[RCOOH][R'OH]}$$

$$RCOOH + R''OH \leftrightarrow RCOOR'' + H_2O \qquad K_2 = \frac{[RCOOR''][H2O]}{[RCOOH][R''OH]}$$

Разделив $К_1$ на $К_2$ получим:

$$\frac{K1}{K2} = \frac{[RCOOR'][R'OH]}{[RCOOR'][R''OH]} = К_{алк}$$

В связи с этим равновесие реакции алкоголиза находится в зависимости от строения спиртового остатка сложного эфира и спирта, который с ним реагирует.

При реакции алкоголиза сложных эфиров повышение степени конверсии достигают различными методами, которые используются в реакции этерификации. При удалении образующегося спирт из реакции достигается наилучший эффект, поэтому чаще всего реакцию алкоголиза проводят в присутствии более высококипящих спиртов с целью получения эфира [8]:

$$CO(OCH_3)_2 + 2C_4H_9OH \leftrightarrow CO(OC_4H_9)_2 + 2CH_3OH.$$

2.2 Синтез сложных эфиров молочной кислоты

Синтез сложных эфиров молочной кислоты обычно осуществляется при взаимодействии молочной кислоты и спирта в жидкой фазе с использованием кислотных катализаторов. В большинстве случаев, катализаторы представлены жидкими кислотами, которые остаются в

конечном продукте. Поэтому появляется большое количество нежелательных побочных реакций [9], которые необходимо нейтрализовать.

В результате реакции образуется реакционная вода. Наличие небольшого количества воды снижает скорость этерификации в значительной степени. При удалении воды из реакционной смеси, могут быть получены средние выходы конечного продукта [10].

Этерификация молочной кислоты со спиртами может быть проведена различными способами.

Классический метод представляет собой нагрев смеси молочной кислоты, спирта, растворителя и катализатора в температурном интервале 60 – 150 ºС. Метод применим для получения метиллактата и этиллактата [11].

Реакции получения метилового и этилового эфира молочной кислоты представлены ниже:

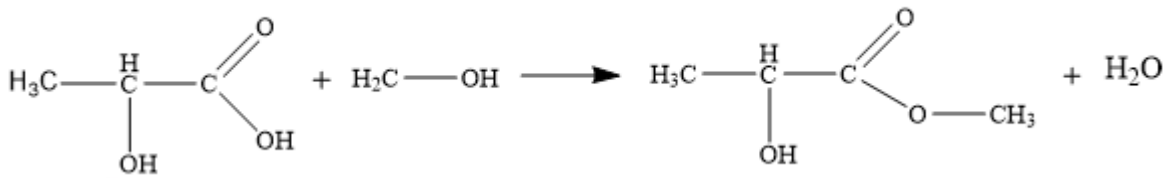


Рисунок 2 – Получение метилового эфира молочной кислоты.

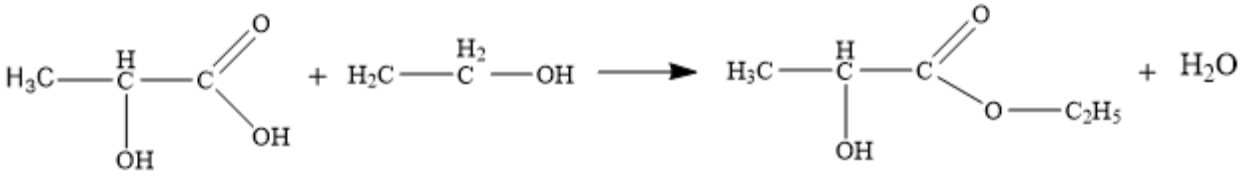


Рисунок 3 – Получение этилового эфира молочной кислоты.

Аллиловый эфир молочной кислоты получают взаимодействием молочной кислоты и аллилового спирта, в присутствии растворителя и катализатора:

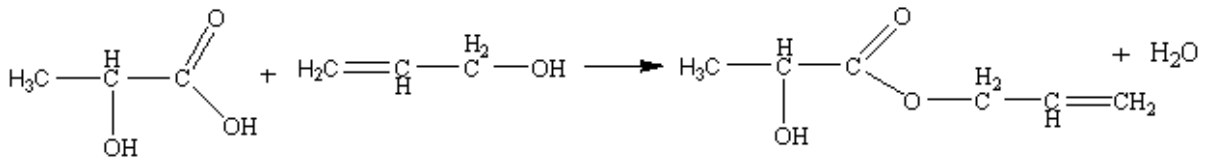


Рисунок 4 – Получение аллилового эфира молочной кислоты.

Циклические эфиры – производные алкандиолов, в которых эфирная связь образована внутримолекулярно. По химическим свойствам лактиды подобны сложным эфирам.

В результате межмолекулярной этерификации молочная кислота образует димерный продукт, который легко превращается в более устойчивый шестичленный циклический диэфир – лактид:

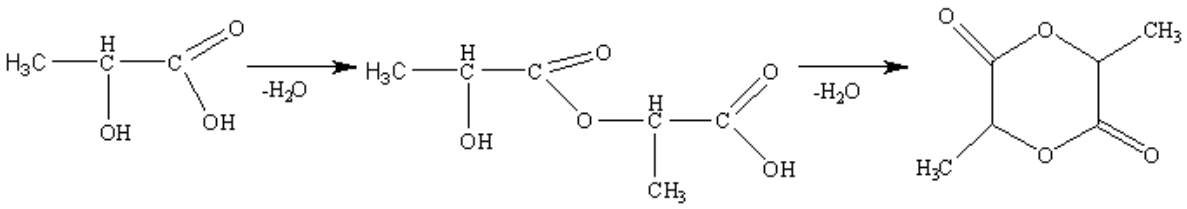


Рисунок 5 – Получение лактида.

2.3 Способы синтеза сложных эфиров из полимеров молочной кислоты различной молекулярной массой

Сложные эфиры молочной кислоты можно получать не только из оксикарбоновой кислоты, но и из ее олигомеров и полимеров.

Для получения этиллактата используют полилактид различной молекулярной массы.

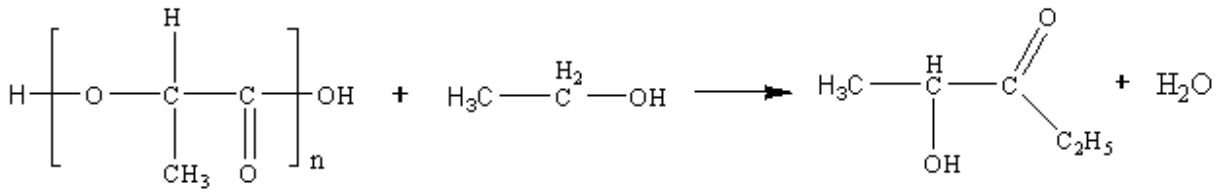


Рисунок 6 – Получение этиллактата из полилактида.

Получение сложного эфира из полилактида гораздо эффективнее, чем из молочной кислоты. Это объясняется тем, что молочная кислота содержит большее количество воды, которая оказывает негативное влияние на равновесие реакции. Поэтому выход конечного продукта при использовании полилактида выше, чем с применением молочной кислоты.

2.4 Катализаторы и механизм получения эфиров

Выбор катализатора реакции этерификации зависит от нескольких факторов. Наиболее часто используемые катализаторы - сильные минеральные кислоты (серная и соляная кислоты), кислоты Льюиса (трифторид бора и олова, соли цинка и алюминия, галогениды), органо–титанатовые катализаторы и безводный хлористый водород [12]. Часто используются катионообменные смолы и цеолиты.

Классическим катализатором реакции этерификации в лаборатории считается серная и соляная кислоты. Применение данных катализаторов приводит к образованию солей кислот или с протеканием изомеризации, полимеризации и побочных реакций [13].

Сульфоновые кислоты (бензенсульфонивая кислота, п – толуолсульфокислота, метансульфоновая кислота) широко используется на заводах.

В редких случаях возможно использование фосфорной кислоты, но она приводит к замедлению реакции [14].

Интерес к разработке эффективных и экологически безопасных катализаторов для синтеза эфиров значительно возрос за счет спроса на биодизельное топливо. Это топливо состоит из метилового или этилового эфира жирных кислот [15].

В качестве гетерогенных катализаторов при получении эфиров в производстве топлива используют различные твердые кислотные катализаторы (смолы, сульфатированные оксиды вольфрама и циркония,

гетерополикислоты, сульфированный полианилин, комплексы металлов и цеолитов) [16]. Эти катализаторы могут быть легко выделены из реакционной смеси. Также они могут быть использованы повторно в течение длительного периода без каких – либо осложнений при их переработке и хранении.

Катализ с твердой ионообменной смолой имеет следующие преимущества по сравнению с использование гомогенных катализаторов, таких как серная кислота:

1. Катализатор легко удаляется фильтрацией из продукта реакции;

2. Возможна непрерывная работа;

3. Чистота конечных продуктов выше, так как побочные реакции почти полностью исключены или остаются в незначительном количестве;

4. Возможность выделения полупродуктов;

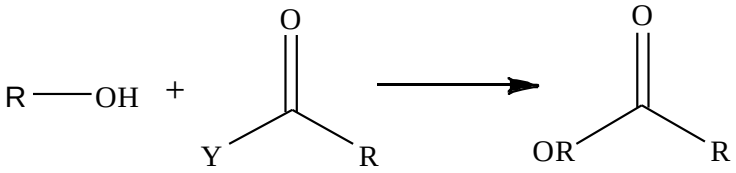
5. Экологически безопасная работоспособность.

6. Катализатор не вызывает коррозии;

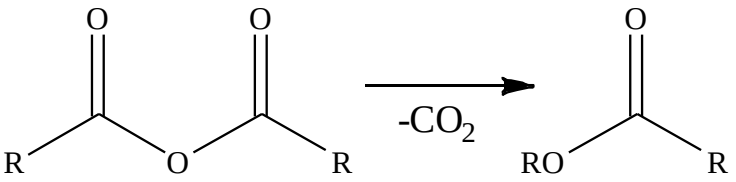
7. Имеет более высокие локальные концентрации H^+/OH^- ионов;

Существуют следующие механизмы получения эфиров:

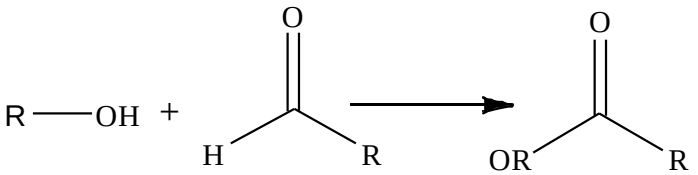
1. Этерификация, переэтерификация, ацилирование:



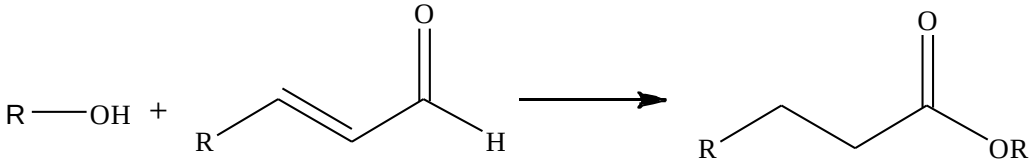
2. Декарбоксилированная этерификация:



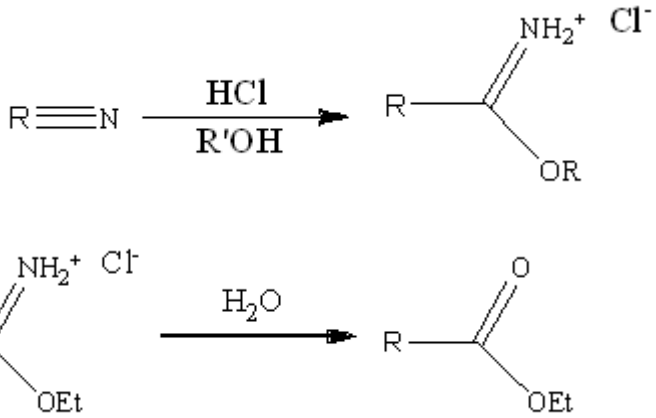
3. Окислительная этерификация:



4. Окислительно – восстановительная этерификация:



5. Реакция Пиннера (2 этапа):



Низшие эфиры получают путем прямой этерификации. Эфиры молочной кислоты и высших спиртов получают из метил- или этиллактата, путем переэтерификации с соответствующим спиртом [17].

Различают несколько методов получения эфиров молочной кислоты:

1. Прямая этерификация молочной кислоты и спирта;
2. Переэтерификация одного эфира в другой посредством реакции со спиртом;
3. Преобразование лактата металла и лактата аммония в эфир;
4. Реакция металла лактата с галоидным алкилом.

2.5 Применение сложных эфиров

Из-за хорошей совместимости с хладагентами сложные эфиры широко используются в качестве смазочных материалов холодильного оборудования [18].

Эфиры фосфорной кислоты используются в качестве смазок, гидравлических жидкостей или в качестве присадок к смазочным маслам.

Фосфатные эфиры применяются для получения огнестойких масел для тяжело нагружённых промышленных газовых турбин и вспомогательного оборудования, и гидравлических жидкостей в литейных цехах металлургических заводах.

Высоковязкие синтетические эфиры используются в качестве базовых масел при высокотемпературной смазке. Эти смазочные материалы могут быть эффективно использованы для работы в непрерывном режиме при 260 ºС и проходят очень малую окислительную деструкцию и испарение по сравнению с другими материалами.

Эфиры, которые обладают душистым запахом, используются в парфюмерии и косметике, как эфирные масла, пищевой промышленности - ароматизаторы, и т. д. Также эфиры используются в качестве органического растворителя. Полиэфиры применяются в производстве пластмасс.

Эфиры используются для приготовления поверхностно-активных веществ в мыле и различных моющих средств.

На сегодняшний день в медицине существует проблема прочностных характеристик материалов на основе биоразлагаемых полимеров. Эта проблема находит свое решение в применении пластификаторов. Эфиры на основе молочной кислоты, благодаря своей низкой токсичности, нашли свое применение в этой отрасли. Из них изготавливают пластификаторы, улучшающие пластичные, эластичные, гибкостные свойствабиоразлагаемых полимров.

Этиллактат является биоразлагаемым и нетоксичным материалом с отличными растворяющими свойствами, которые потенциально могут заменить галогенированные и токсичные растворители для широкого спектра потребительского и промышленного использования [18].

В пищевой промышленности этиллактат используется, как пищевая добавка. Данный эфир нашел свое применение и косметической промышленности, как растворитель. Благодаря своему приятному запаху - в парфюмерной промышленности.

Из-за низкой токсичности этиллактат используется при производстве фармацевтических препаратов, пищевых добавок и ароматизаторов [19].

2.6 Свойства эфиров оксикарбоновых кислот

Соли и эфиры молочной кислоты носят название – лактаты. Существует такие эфиры молочной кислоты, как метиловый эфир молочной кислоты, этиловый эфир молочной кислоты, бутиловый эфир молочной кислоты и др.

Наиболее привлекающими свое внимание считаются метиловый, этиловый и н-бутиловый эфиры. Они используются в фармацевтической и косметической промышленности и как растворители для лаков [20]. Метиловый, этиловый и пропиловый эфиры водорастворимые, а бутиловый эфир молочной кислоты малорастворим.

Эфиры молочной кислоты считается «зеленым растворителем». «Зеленые» химические вещества способны свести к минимуму воздействие на окружающую среду при использования их в химическом производстве. Идеальный зеленый растворитель должен иметь низкое давление паров, высокую температуру кипения, должен быть нетоксичным и подлежать биологическому разложению, иметь возможность растворения во многих химических соединениях и быть получен из возобновляемых источников [21].

В таблице 2 приведены свойства метиллактата, этиллактата и бутиллактата.

Таблица 2 – Свойства лактатов

Показатель	Метиллактат	Этиллактат	Бутиллактат
$T_{пл}$, °C	-66	-	-28
$T_{кип}$, °C	144,8	154	187
d_4^{20}	1,0939	1,0348	0,9837
n^{20}_D	1,4139	1,4132	1,4217
$T_{самовоспл}$, °C	385	400	380
Растворимость в 100 г воды	смешивается	смешивается	4,36% (по массе)

Этиллактат является особенно привлекательным для промышленности из-за его физико-химических свойств: высокая температура кипения, низкое поверхностное натяжение и низкое давление паров.

Кроме того, этиллактат можно рассматривать как альтернативную замену промышленных растворителей, таким как толуол, ацетон и ксилол, в ряде химических процессов [22,23].

2.7 Характеристика сырья и вспомогательного оборудования

2.7.1 Полилактид

Полилактид (полимолочная кислота, PLA) – это твердый термопластичный полимер, обладающий как кристаллическим, так и полностью аморфным состоянием, в зависимости от чистоты полимерной структуры [24].

Полилактид является полимером с широким спектром применения, имеет хорошие органолептические характеристики, отлично подходит для контакта с пищевыми продуктами, в качестве упаковки.

В современном мире зеленой химии полилактид имеет ряд свойств, которые делают его уникальным на рынке. Полимер быстро разлагается и естественным образом перерабатывается микроорганизмами, не нанося вреда окружающей среде. В результате его разложения образуется гумус (перегной), вода и углекислый газ.

Существует несколько основных методов получения PLA:

Прямая полимеризация [25].

Поскольку мономер обладает необходимых для полимеризации группами, как гидроксильной (– OH), так и карбоксильной (– COOH), то реакция может происходить путем прямой полимеризации:

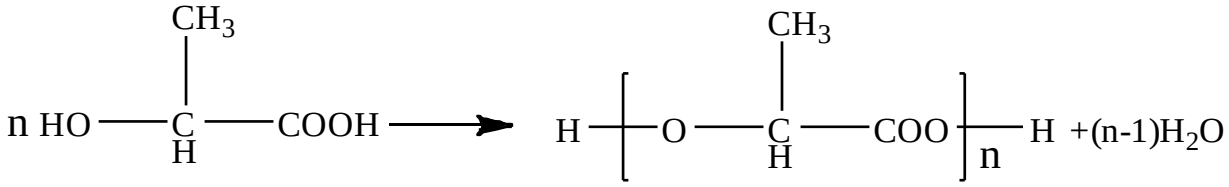


Рисунок 7 – Реакция полимеризация МК.

Полимеризация может проходить в растворе и расплаве.

Поликонденсация с азеотропной отгонкой воды [2]:

В результате поликонденсации в смеси образуется реакционная вода, которую необходимо выводить из процесса, для достижения высокой молекулярной массы.

Реакция протекает стабильно, но имеются следующие недостатки: наличие примесей в растворителях (которые являются потенциальными загрязнителями окружающей среды) и различные побочные реакции.

Полимеризация с раскрытием кольца [25]:

Принимая во внимание недостатки прямой полимеризации, полилактид обычно синтезируют полимеризацией с раскрытием кольца. Это наиболее важный и эффективный метод для производства высокомолекулярного полилактида. Для данной реакции требует мономер высокой чистоты [26].

Основным сырьем для получения полилактида является лактид, который получают путем димеризации молочной кислот [26].

Полилактид можно получать в вакууме или инертной среде. В качестве катализаторов используют оксид цинка, октоат олова, алкоголят олова и др. Контролируя время пребывания и температуру процесса в сочетании с концентрацией катализатора, можно регулировать соотношение и последовательность D - и L- молочной кислоты.

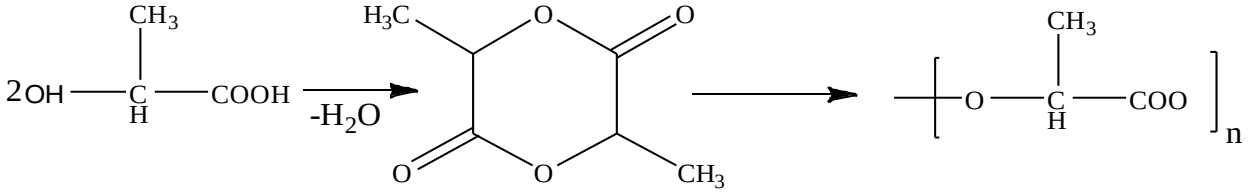


Рисунок 8 – Полимеризация с раскрытием кольца.

Благодаря биорезорбируемости и биосовместимости в человеческом теле, полилактид нашел свое применение в медицине. Из данного полимера изготавливаются хирургические шовные нити, не требующие извлечения, рассасывающиеся и выделяющиеся из организма через определенный промежуток времени. Также полилактид применяется при изготовлении различных саморассасывающихся медицинских имплантатов. Обладая такими свойствами как прозрачность и термопластичность он активно используется в дерматологии и косметологии [26].

Из-за своей способности к биоразложению полимер может быть использован для изготовления разлагающихся упаковок, мешков, пищевых пленок и одноразовой посуды [26].

Еще не так давно на рынке PLA имел высокую стоимость на рынке. На сегодняшний день достигнуто значительное снижение его стоимости, благодаря оптимизации производства молочной и полимолочной кислот [27].

2.7.2 Молочная кислота

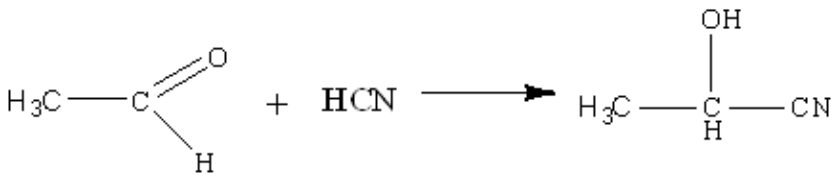
Молочная кислота (α-оксипропионовая кислота) является органической кислотой, которая может быть использована в широком спектре промышленного применения. В пищевой промышленности она использована в качестве консервантов и антимикробных агентов [28].

Существует два изомера молочной кислоты, такие как D(–) - и L(+) - формы. Они различаются по своим оптическим свойствам, но одинаковы по своим физическим и химическим характеристикам. L (+)- молочная кислота является биоразлагаемой и метаболизируется в человеческом теле. Благодаря этому уникальному свойству, молочная кислота применяется в медицине [28].

В производстве молочную кислоту получают микробиологическим и химического методами [29].

При микробиологическом методе молочнокислые бактерии производят молочную кислоту из сахаров, данный процесс называется заквашивание [29].

Самый рентабельный процесс синтетической молочной кислоты представлен следующими реакциями:



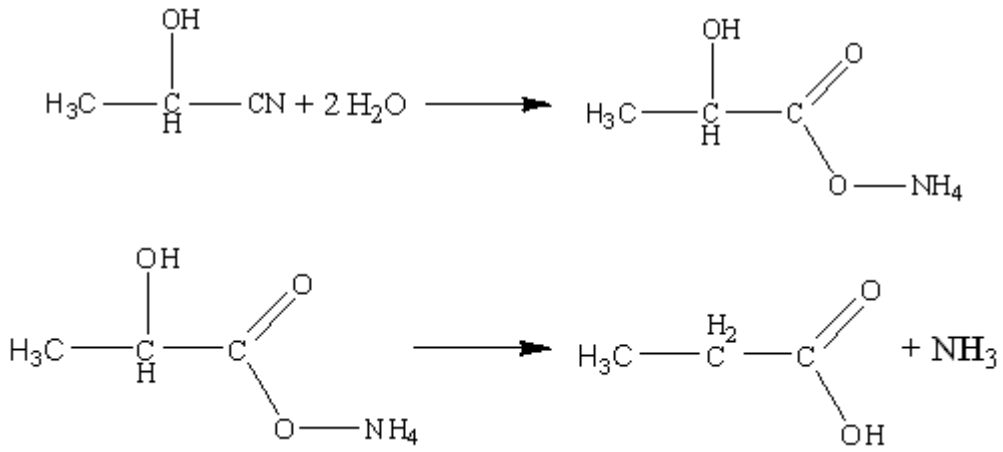


Рисунок 9 – Реакции синтеза молочной кислоты в промышленности.

Для применения в фармацевтической промышленности, молочная кислота может быть используема в качестве электролитов и минеральных источников. В технических приложениях молочная кислота может быть использована в качестве нейтрализаторов, растворителей, моющих средств, разделительных кислот и металл–комплексообразующих агентов.

Также оксикарбоновая кислота используется в косметической промышленности, в качестве буфера pH, для омоложения и осветления кожи. Непосредственное применение молочной кислоты в детском питании, хлебобулочных изделиях, пиве, сырах, кондитерских изделиях, молочных продуктах, фруктовых соках, мясе, консервантах, морепродуктах, приправах, безалкогольных напитках, овощах и винах [30].

2.7.3 Этиловый спирт (C_2H_5OH)

Этиловый спирт представляет собой бесцветную прозрачную жидкость с характерным запахом и жгучим вкусом. Этиловый спирт очень гигроскопичен; легко поглощает влагу из воздуха, а также из растительных и животных тканей. Употребление неразбавленного спирта может вызвать ожог слизистой оболочки пищевода [31].

Таблица 3 – Физико – химические показатели этилового спирта

Наименование показателя	**Норма для марки**	
	А	**Б**
	ОКП 91 8213 1100	ОКП 91 8213 1200
Внешний вид	Прозрачная бесцветная жидкость без посторонних примесей	
Концентрация этилового спирта, % (по объему), не менее	95,0	94,0
Массовая концентрация кислот в пересчете на уксусную кислоту, мг/дм^3, не более	15	30
Массовая концентрация сложных эфиров в пересчете на уксусноэтиловый эфир, мг/дм^3, не более	80	180
Массовая концентрация альдегидов, мг/дм^3, не более	200	350
Концентрация метилового спирта, % (по объему), не более	0,1	0,1
Массовая концентрация сивушного масла, мг/дм^3, не более	500	1000
Массовая концентрация сухого остатка, мг/дм^3, не более	10	20
Массовая концентрация фурфурола, мг/дм^3, не более	Отсутствие	5,0
Массовая концентрация серы, мг/дм^3, не более	Не определяют	10,0

Способы получения спирта

Этиловый спирт принадлежит к числу продуктов, применяемых во многих отраслях народного хозяйства. В настоящее время отечественная промышленность вырабатывает пищевой и технический этиловый спирт.

Пищевой спирт получают из зерна, картофеля, мелассы, сахарной свеклы. Его применяют для приготовления ликероводочных изделий, спиртования виноградных и плодово-ягодных вин, в производстве парфюмерных изделий, в медицине и фармацевтической промышленности и для выработки пищевого уксуса [31].

Технический спирт получают из этиленсодержащих газов (синтетический спирт), древесины (гидролизный спирт) и сульфитных щелоков – отхода производства целлюлозы из древесины по сульфитному способу (сульфитный спирт). Технический спирт применяют как растворитель в производстве синтетического каучука, синтетического

волокна, искусственных шелка и кожи, пластических масс, органического стекла, лаков и красок и для других целей [32].

2.7.4 Хлороформ ($CHCl_3$)

Вещество представляет собой бесцветную летучую жидкость с резким запахом и сладким жгучим вкусом. Хлороформ является активным средством для ингаляционного наркоза и обладает сильным наркотическим действием [33].

Таблица 4 – Физико – химические показатели хлороформа

Наименование показателя	**Норма для хлороформа**	
	Очищенного ОКП 24 1213 0100	**Технического** ОКП 24 1213 0200
Плотность при 20 °С, г/см^3	1,473—1,480	1,471—1,490
Массовая доля нелетучего остатка, %, не более	0,001	0,001
Массовая доля воды, %, не более	0,03	0,1
Массовая доля хлорорганических примесей, %, не более	0,025	1,3
Массовая доля кислот в пересчете на соляную кислоту, %, не более	0,001	0,002
Массовая доля альдегидов в пересчете на уксусный альдегид, %, не более	0,0005	–

Применяется как растворитель жиров, лаков; в производстве некоторых алкалоидов, а так же искусственного шелка.

2.7.5 Бензол (C_6H_6)

Бензол – ароматический углеводород, представляет собой бесцветную жидкость со своеобразным нерезким запахом [34].

Таблица 5 – Физические свойства бензола

Наименование показателя	**Норма**	
	Химически чистый (х.ч.) ОКП 26 3123 0053 09	Чистый для анализа (ч.д.а.) ОКП 26 3123 0052 10
Массовая доля бензола, %, не менее	99,8	99,6
Плотность при 20 °С, г/см	0,878-0,880	0,878-0,880
Температурные пределы перегонки при 101325 Па, °С:	79,6-80,3	79,6-80,4
в интервале, °С	0,4	0,5
объемная доля отгонки, %	95	95
Показатель преломления, n_D^{20}	1,5009-1,5013	1,5009-1,5013
Температура кристаллизации, °С, не ниже	5,4	5,3
Массовая доля тиофена, %, не более	0,0001	0,0001
Показатель цветности серно-кислый вытяжки по бихроматной шкале, не выше	4	4
Массовая доля общей серы, %, не более	0,00005	0,00008
Массовая доля нелетучего остатка, %, не более	0,0005	0,0005
Массовая доля воды, %, не более	0,02	0,03
Реакция водной вытяжки	Нейтральная	Нейтральная

С воздухом образует взрывоопасные смеси, хорошо смешивается с эфирами, бензином и другими органическими растворителями, с водой образует смесь с температурой кипения 69,25 °С. Токсичен, опасен для окружающей среды, огнеопасен [35].

Бензол по составу относится к ненасыщенным углеводородам (гомологический ряд C_nH_{2n-6}), но в отличие от углеводородов ряда этилена, при жёстких условиях проявляет свойства присущие насыщенным углеводородам, более склонен к реакциям замещения. Свойства бензола объясняются наличием в его структуре сопряжённого π-электронного облака.

2.7.6 Серная кислота (катализатор H_2SO_4)

Серная кислота – маслянистая жидкость. Она бесцветна и тяжела, отличается крайней гигроскопичностью [36].

Таблица 6 – Физико – химические показатели серной кислоты

Наименование показателя	**Норма**		
	химически чистый (х.ч.) ОКП 26 1212 0023 02	чистый для анализа (ч.д.а.) ОКП 26 1212 0022 03	чистый (ч.) ОКП 26 1212 0021 04
Массовая доля серной кислоты (H SO), %	93,6-95,6	93,6-95,6	93,6-95,6
Массовая доля остатка после прокаливания, %, не более	0,0006 (0,001)	0,001 (0,002)	0,005
Массовая доля хлоридов (Cl), %, не более	0,00002	0,00005	0,00010
Массовая доля нитратов (NO), %, не более	0,00002 (0,00005)	0,00005	0,00050
Массовая доля аммонийных солей (NH), %, не более	0,0001	0,0002	0,0005
Массовая доля тяжелых металлов (Pb), %, не более	0,0001	0,0002	0,0005
Массовая доля железа (Fe), %, не более	0,00002 (0,00005)	0,00005 (0,00010)	0,00030
Массовая доля мышьяка (As), %, не более	0,000001	0,000003	0,000010
Массовая доля селена (Se), %, не более	0,0001	0,0001	0,0005
Массовая доля веществ, восстанавливающих KMnO , % (в пересчете на SO), не более	0,0002 (0,0003)	0,0003 (0,0004)	0,0004

2.7.7 Бикарбонат натрия ($NaHCO_3$)

Бикарбонат натрия, известный также как пищевая сода, является основой, которая нейтрализует отрицательное воздействие кислоты. Внешне представляет собой белый порошок с кристаллическими зернами.

Бикарбонат натрия является слабощелочным. Он расщепляет белки и применяется для нейтрализации кислот.

2.8 Характеристика вспомогательного оборудования

Синтез эфира проводился на простой установке для фракционной перегонки, содержащей плиту, перегонную колбу, прямой холодильник, приемник и аллонж.

2.9 Характеристика продукта

2.9.1 Этиловый эфир молочной кислоты (этиллактат)

В современном мире большой интерес представляет получение химических веществ из возобновляемого сырья. Одним из перспективных процессов является получение этилового эфира молочной кислоты – продукта взаимодействия кислоты и спирта [37].

Этиллактат представляет собой густую жидкость с умеренной вязкостью и термической стабильностью в широком диапазоне температуры и давления [38]. Этиллактат нашел свое применение в качестве чистящего агента по очистке металлических поверхностей, удаления смазок, масел, клеев, как растворитель для краски и многое другое.

Таблица 7 – Свойства этиллактата

Цвет	бесцветная или желтоватая прозрачная жидкость
Запах	мягкий фруктовый запах
Удельная плотность (25/25 С)	1,029 – 1,032
Температура вспышки, °С	47,2
Температура кипения, °С	154
Плотность пара (воздух = 1)	4,07
Скорость испарения	0,21
Показатель преломления	1,410 – 1,420
Кислотное число (мг КОН/г)	1,0
Содержание эфира, %	98
Тяжелые металлы (Pb), %	0,001

В таблице 8 показаны свойства этиллактата по сравнению с обычными ароматическими растворителями.

Таблица 8 – Свойства этиллактата сравнению с ароматическими растворителями

Свойства	Этиллактат	Ксилол	Толуол	N – метилпирролидон
Температура вспышки, °С	47	28	6	91
Биоразлагаемость	да	нет	нет	нет
Токсичность	нет	да	да	да
Возобновляемые источники	да	нет	нет	нет

Этиловый эфир молочной кислоты является весьма ценным химическим продуктом, который применяется во многих отраслях промышленности. Данный эфир встречается в природе в небольших количествах и в самых разнообразных продуктах: вино, курица, различные фрукты. Еще его называют «зеленым растворителем», так как он является экологически безопасным [39].

В пищевой промышленности этиллактат используется как пищевая добавка. Также данный эфир нашел свое применение в косметической промышленности, как растворитель. Благодаря своему приятному запаху, в парфюмерной промышленности.

Используя эфиры на основе яблочной, лимонной и других кислот получают пластификаторы, Но именно этиловый эфир молочной кислоты находит свое применение в медицине. Это связано с тем, что этиллактат, в отличие от других эфиров, отвечает требованиям, которые применяются к изделиям, использующихся в медицине. Например, имеет такое свойство, как биорезорбируемость, биосовместимость с человеческим организмом. Примером такого пластификатора является этиллактат и его производные [40].

Благодаря своей низкой токсичности, этиллактат так же используется при производстве фармацевтических препаратов, пищевых добавок и ароматизаторов [41].

3. Экспериментальная часть

3.1 Методики синтеза и исследования сложных эфиров

3.1.1 Синтез эфиров

Существует множество методик, с помощью которых можно получать сложные эфиры. Например, этерификация карбоновых кислот, ацилирование спиртов галогенангидридами и ангидридами карбоновых кислот, алкилирование солей карбоновых кислот, этерификация амидов и нитрилов карбоновых кислот и др [41].

Получение этилового эфира молочной кислоты происходит по реакции этерификации.

При получении этиллактата происходит взаимодействие полимолочной кислоты и этилового спирта в присутствии катализатора.

Реакцию проводили в разных временных промежутках от 5 до 20 часов. Температурный интервал азеотропной перегонки от 40 до 60 °С. Отгонка эфира осуществлялась при температуре 150…158 °С.

Получение этиллактата проходит в несколько стадий:

1. Азеотропная отгонка воды и получение эфира;
2. Нейтрализация катализатора в реакционной смеси;
3. Отгонка эфира.

Процесс получения этилового эфира молочной кислоты проводиться с различными растворителями, в разных температурных интервалах, с разным временем синтеза, а также с добавления различного количества катализатора.

1. *Азеотропная отгонка воды и получение эфира;*

Во взвешенную круглодонную колбу загружали полилактид, этиловый спирт, растворитель и катализатор.

Синтез проводили на установке, представленной на рисунке 4. Процесс отгонки азеотропной смеси, и синтез эфира проводили в течение 10 часов в интервале температур 40 – 60 °С.

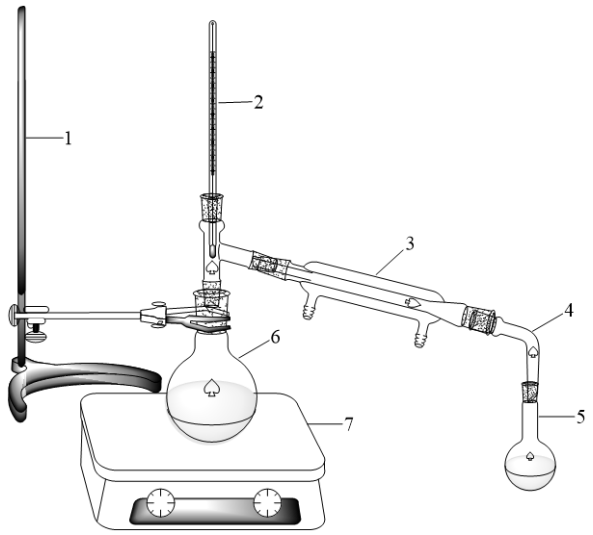


Рисунок 10 – Установка прямой перегонки: 1 – штатив; 2 – термометр; 3 – прямой холодильник; 4 – аллонж; 5 – приемник; 6 – перегонная колба; 7 – плита.

2. Нейтрализация катализатора в реакционной смеси;

После охлаждения реакционную смесь нейтрализовали бикарбонатом натрия. Проверяли среду с помощью РН – индикатора. После этого разделили смесь с помощью делительной воронки. Образовалось 2 слоя: более плотный (водный) и слой, имеющий меньшую плотность (находится над слоем воды).

3. Отгонка эфира.

Очищенный эфир поместили в перегонную колбу. Процесс проводили на установке, представленной на рисунке 4, который длился от 90 до 120 минут. Эфир отгоняли при температуре 150…158 °С.

Синтез 1 (Молочная кислота + этиловый спирт + бензол)

В одногорлую колбу (установка представлена на рисунке 10) загружали 0,83 моль (20 мл) молочной кислоты, 7,07 моль (101 мл) этилового спирта, 6,09 моль (133 мл) бензола и 0,007 моль (0,5 мл) катализатора.

Процесс вели медленно, при температуре, не превышающей 64°С, где начиналась отгонка азеотропной смеси 1 капля в минуту. По истечении времени первой стадии нейтрализовали реакционную смесь бикарбонатом

натрия. Кислотность среды определяли с помощью универсального РН – индикатора. Затем с помощью делительной воронки отделили слой эфира.

Очищенный слой загрузили в перегонную колбу и начали перегонку по фракциям. Первая фракция выделялась при температуре 60…100°С (остатки азеотропной смеси и вода), при температуре 80…100 °С отгонялся растворитель, следующая фракция выделялась при 120…122°С (молочная кислота). Фракция этиллактата отгонялась при температуре паров в интервале 152…154°С.

Данный синтез был проведён еще несколько раз, но в разном временном интервале.

Полученные синтезы с молочной кислотой имели низкие выходы продукта, не превышающие 28%.

Синтез 2 (Полилактид + этиловый спирт + хлороформ)

Загружали в одногорлую колбу (установка представлена на рисунке 10) 0,09 моль (15 г) полилактида, 0,4 моль (24 мл) этилового спирта, 1,12 моль (100 мл) хлороформа и 0,01 моль серной кислоты.

Процесс вели медленно, при температуре, не превышающей 56°С, где начиналась отгонка азеотропной смеси 1 капля в минуту. По истечении времени первой стадии нейтрализовали реакционную смесь бикарбонатом натрия. Добавляли бикарбонат натрия до тех пор, пока среда не стала нейтральной. Кислотность среды определяли с помощью универсального РН – индикатора. Затем с помощью делительной воронки отделили слой эфира.

Очищенный слой загрузили в перегонную колбу и начали перегонку по фракциям. Первая фракция выделялась при температуре 55…100°С (остатки азеотропной смеси и вода), вторая фракция выделялась при 120…122°С (молочная кислота). Затем происходило выделение остатка растворителя при температуре 61°С. Фракция этиллактата отгонялась при температуре паров в интервале 152…154°С.

В таблице 9 представлены результаты серии экспериментов с различным временем процесса.

Таблица 9 – экспериментальные данные синтеза полилактида и этилового спирта

№ синтеза	**Время процесса, ч**	**Количество катализатора, %**	**Выход эфира, %**
2.1	5	2	14
2.2	10	2	34
2.3	15	2	30
2.4	20	2	40

Все последующие синтезы осуществляются со временем – 10 часов, так как выбранное время наиболее приемлемо для данных процессов.

Синтез 3 (Полилактид + этиловый спирт + хлороформ)

Загружали в одногорлую колбу (рисунок 10) 0,09 (15 г) моль полилактида, 0,4 моль (24 мл) этилового спирта, 1,12 моль (100 мл) хлороформа и 0,01 моль серной кислоты.

Процесс вели медленно, при температуре, не превышающей 55°С, где начиналась отгонка азеотропной смеси 1 капля в минуту. По истечении времени первой стадии нейтрализовали реакционную смесь бикарбонатом натрия. Добавляли бикарбонат натрия до тех пор, пока среда не стала нейтральной. Кислотность среды определяли с помощью универсального РН – индикатора. Затем с помощью делительной воронки отделили слой эфира.

Очищенный слой загрузили в перегонную колбу и начали перегонку по фракциям. Первая фракция выделялась при температуре 55…100°С (остатки азеотропной смеси и вода), вторая фракция выделялась при 120…122°С (молочная кислота). Заключительная фракция при температуре паров в интервале 152…154°С – происходило выделение этиллактата.

В качестве растворителя применяли хлороформ. Изменяемый параметр в ряде данных синтезов – количество катализатора. Результаты ряда экспериментов с растворителем – хлороформом представлены в таблице 10.

Таблица 10 – Экспериментальные данные синтеза полилактида и этилового спирта

№ синтеза	**Время процесса**	**Количество катализатора, %**	**Выход эфира, %**
3.1	10	0,002	8
3.2	10	2,3	28
3.3	10	4	33
3.4	10	7	20

Синтез 4 (Осушенный полилактид + абсолютизированный этиловый спирт + осушенный хлороформ)

Для того чтобы добиться увеличения выхода продукта, полилактид, спирт и растворитель осушали.

Осушение полилактида

Чтобы осушить полилактид, помещали нужное количество в вакуумный шкаф на 2 – 3 часа, чтобы избавиться от лишней влаги.

Абсолютизация спирта

Загружали в одногорлую колбу (рисунок 10) 110 мл этанола и 5,5 мл бензола.

При температуре паров 64,8 °С отгоняется тройная смесь (этиловый спирт – бензол – вода), затем двойная смесь (этиловый спирт – бензол) при температуре 67,9°С. При температуре 78,4°С выделяется абсолютизированный этиловый спирт.

Осушение растворителя

130 мл бензола загружали в перегонную колбу. При температуре 69,25°С выделялась двойная смесь (бензол – вода). Затем выделялся осушенный бензол при температуре 80,2 °С.

Синтез осуществлялся идентично методике синтеза 2 и 3, но с использованием осушенных реагентов.

Загружали в перегонную колбу 0,09 моль (15 г) осушенного полилактида, 0,4 моль (24 мл) абсолютизированного этилового спирта, 1,12 моль (100 мл) хлороформа и 0,01 моль серной кислоты.

Процесс вели медленно, при температуре, не превышающей 55°С, где начиналась отгонка азеотропной смеси 1 капля в минуту. По истечении времени первой стадии нейтрализовали реакционную смесь бикарбонатом натрия. Добавляли бикарбонат натрия до тех пор, пока среда не стала нейтральной. Кислотность среды определяли с помощью универсального РН – индикатора. Затем с помощью делительной воронки отделили слой эфира.

Очищенный слой загрузили в перегонную колбу и начали перегонку по фракциям. Первая фракция выделялась при температуре 55…100°С (остатки азеотропной смеси и вода), вторая фракция выделялась при 120…122°С (молочная кислота). Заключительная фракция при температуре паров в интервале 152…154°С – происходило выделение этиллактата.

В качестве растворителя применяли хлороформ. Изменяемый параметр в ряде данных синтезов – количество катализатора. Результаты ряда экспериментов с растворителем – хлороформом представлены в таблице 11.

Таблица 11 – Экспериментальные данные синтеза осушенного полилактида и абсолютизированного этилового спирта

№ синтеза	**Время процесса**	**Количество катализатора, %**	**Выход эфира, %**
4.1	10	0,002	10
4.2	10	2,3	34
4.3	10	4	40
4.4	10	7	26

Синтез 5 (Осушенный полилактид + абсолютизированный этиловый спирт + осушенный бензол)

Осушение полилактида

Чтобы осушить полилактид, помещали нужное количество в вакуумный шкаф на 2 – 3 часа, чтобы избавиться от лишней влаги.

Абсолютизация спирта

Загружали в одногорлую колбу 110 мл этанола и 5,5 мл бензола.

При температуре паров 64,8 °С отгоняется тройная смесь (этиловый спирт – бензол – вода), затем двойная смесь (этиловый спирт – бензол) при температуре 67,9°С. При температуре 78,4°С выделяется абсолютизированный этиловый спирт.

Осушение растворителя

130 мл бензола загружали в перегонную колбу. При температуре 69,25°С выделялась двойная смесь (бензол – вода). Затем выделялся осушенный бензол при температуре 80,2 °С.

Загружали в одногорлую колбу 0,09 моль (15 г) осушенного полилактида, 0,4 моль (24 мл) абсолютизированного этилового спирта, 1,06 моль (100 мл) осушенного бензола и 0,01 моль серной кислоты.

Процесс вели медленно, при температуре, не превышающей 64°С, где начиналась отгонка азеотропной смеси 1 капля в минуту. По истечении времени первой стадии нейтрализовали реакционную смесь бикарбонатом натрия. Добавляли бикарбонат натрия до тех пор, пока среда не стала нейтральной. Кислотность среды определяли с помощью универсального РН – индикатора. Затем с помощью делительной воронки отделили слой эфира.

Очищенный слой загрузили в перегонную колбу и начали перегонку по фракциям. Первая фракция выделялась при температуре 55…100°С (остатки азеотропной смеси и вода), вторая фракция выделялась при 120…122°С (молочная кислота). Фракция этиллактата отгонялась при температуре паров в интервале 152…154°С.

Изменяемый параметр в ряде данных синтезов – количество катализатора. Результаты ряда экспериментов с растворителем – хлороформом представлены в таблице 12.

Таблица 12 – Экспериментальные данные синтеза осушенного полилактида и абсолютизированного этилового спирта.

№ синтеза	Время процесса	Количество катализатора, %	Выход эфира, %
5.1	10	1,2	20
5.2	10	2,3	40
5.3	10	7	46
5.4	10	11	27

Синтез 6 (Полилактид + этиловый спирт + растворитель)

Методика синтеза 7 соответствует методике синтеза 3. Постоянным остается время и количество катализатора. Растворители выбраны разные.

В качестве растворителей использовали хлороформ, бензол и этилацетат.

Результаты экспериментов с разными растворителями отражены в таблице 14.

Синтез 7 (Полилактид + октиловый спирт + + растворитель)

Для сравнения характеристик был проведен синтез с октиловым спиртом, используемого в качестве реагента (таблица 15).

Загружали 0,09 моль (15 г) осушенного полилактида, 0,06 моль (24 мл) октилового спирта, 1,12 моль (100 мл) осушенного бензола и 0,01 моль серной кислоты.

Процесс вели медленно, при температуре, не превышающей 70°С, где начиналась отгонка азеотропной смеси 1 капля в минуту. По истечении времени первой стадии нейтрализовали реакционную смесь бикарбонатом натрия. Добавляли бикарбонат натрия до тех пор, пока среда не стала

нейтральной. Кислотность среды определяли с помощью универсального РН – индикатора. Затем с помощью делительной воронки отделили слой эфира.

Очищенный слой загрузили в перегонную колбу и начали перегонку по фракциям. Первая фракция выделялась при температуре 55…100°С (остатки азеотропной смеси и вода), вторая фракция выделялась при 120…122°С (молочная кислота). Фракция этиллактата отгонялась при температуре паров в интервале 152…154°С.

3.1.2 Исследование физико-химических характеристик

Для идентификации и установления структуры полученного вещества использовался метод инфракрасной спектрометрии.

Метод инфракрасной спектрометрии проводится с помощью прибора инфракрасного спектрометра. В лаборатории используется ИК Фурье – спектрометр ФТ – 801.

Основные технические характеристики прибора:

Спектральный диапазон находится в области 470 – 5700 $см^{-1}$, используется светоделитель ZnSe с неограниченным сроком службы, подходит для работы в условиях повышенной влажности, разрешение – 0,5, 1, 2, 4, 8 $см^{-1}$, Отношение сигнал/шум в диапазоне 2000 – 2200 $см^{-1}$, за 1 мин, при реальном разрешении 4 $см^{-1}$.

Рисунок 11 – ИК Фурье – спектрометр ФТ – 801.

5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

5.1 Предпроектный анализ

5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Для того чтобы провести анализ потребителей и выявить результаты исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование.

Целевой рынок – сегменты рынка, на котором будет продаваться в будущем разработка. В свою очередь, сегмент рынка – это особым образом выделенная часть рынка, группы потребителей, обладающих определенными общими признаками.

Результатом моей научной работы является получение этилового эфира молочной кислоты, который получают из безвредного для окружающей среды сырья: полилактида и молочной кислоты.

Данный эфир находит широкое применение в медицине для получения имплантов, а так же применяется в парфюмерной и косметической промышленности.

5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Анализ конкурирующих разработок следует проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы реалистично оценить сильные и слабые стороны разработок.

Таблица 18 - Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

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. Выход продукта	0,2	5	3	2	0,35	0,21	0,14
2. Время реакции	0,2	5	4	4	0,5	0,4	0,4
3. Качество продукта	0,2	5	4	5	0,35	0,28	0,35
4. Безопасность технологии	0,1	5	5	5	0,35	0,35	0,35
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,1	5	3	3	0,35	0,21	0,21
2. Цена	0,2	5	4	4	0,4	0,36	0,36
Итого	**1**	**30**	**23**	**23**	**2,3**	**1,81**	**2,81**

$$К = \sum В_i \cdot Б_i$$

где К – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

$В_i$ – вес показателя (в долях единицы); $Б_i$ – балл *i*-го показателя.

$Бк_1$ – конкурентная разработка ученых Казахского научно – исследовательского института переработки сельскохозяйственной продукции, которые занимаются получением этиллактата, с целью получения пластификаторов для хирургических шовных материалов, использующихся в медицине и ветеринарии для соединения тканей.

$Бк_2$ – научная разработка ученых Российского химико – технологического университета имени Д.И. Менделеева, занимающиеся разработкой промышленных методов получения эфиров из молочной кислоты.

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку

сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения.

По данным таблицы, можно сделать вывод, о целесообразности проведения опыта, так как показатели превышают данные конкурентов, но для повышения эффективности необходимо увеличить финансирование научных разработок.

5.2 Диаграмма Исикавы

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

Из данной диаграммы (рис. 20) следует, что при улучшении качества сырья, при усовершенствовании оборудования, при увеличении опыта персонала и студентов выход этиллактата будет возрастать.

5.2 Диаграмма Исикавы

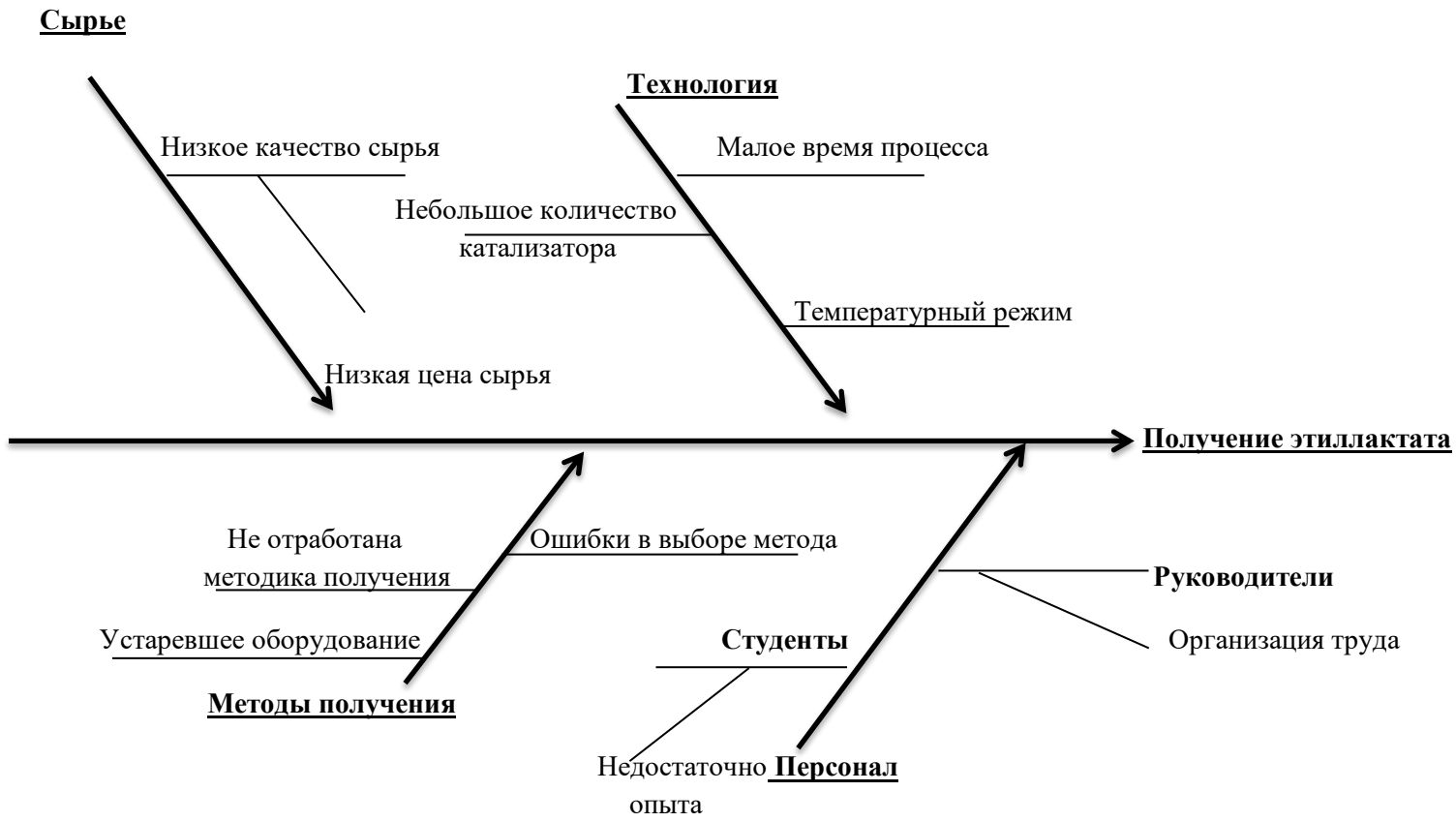


Рисунок 20 – Причинно – следственная диаграмма.

5.3 Оценка готовности проекта к коммерциализации

Таблица 19 – 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	5	5
2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	3	3
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	4
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	4
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	3
6.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	4
	Итого баллов	**25**	**23**

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

$$Б_{сум} = \sum Б_i ,$$

где $Б_{сум}$ – суммарное количество баллов по каждому направлению;

$Б_i$ – балл по *i*-му показателю.

Значение $Б_{сум}$ говорит о мере готовности научной разработки и ее разработчика к коммерциализации. Значение степени проработанности научного проекта составило 25, из 30 возможных, что говорит о перспективной разработке, а знания разработчика достаточны для успешной

ее коммерциализации. Значение уровня имеющихся знаний у разработчика составило 23 – перспективность выше среднего.

По результатам оценки можно сделать вывод об увеличении объемов инвестирования в текущую разработку и направления ее дальнейшего улучшения, об уровне компетенций недостающих разработчику и необходимости привлечения требуемых специалистов в команду проекта.

5.4 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Методом коммерциализации научных разработок был выбран: *торговля патентными лицензиями.* Суть данного метода заключается в передаче третьим лицам прав использования объектов интеллектуальной собственности на лицензионной основе. При этом в патентном законодательстве выделяющие виды лицензий: исключительные (простые), исключительные, полные лицензии, сублицензии, опционы.

5.5 Инициация проекта

5.5.1 Цели и результаты проекта

В таблице 20 приведены лица, которые активно участвуют в проекте и интересы, которых могут быть затронуты как положительно, так и отрицательно.

Таблица 20 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Отечественные производители полимерных имплантатов	Получение эфира медицинской чистоты для производства имплантатов
Научно-исследовательские институты	Получить перспективный материал для использования при создании новых биоразлагаемых технологий

Таблица 21 – Цели и результаты проекта

Цели проекта:	Получение этилового эфира молочной кислоты
Ожидаемые результаты проекта:	Создание отечественного конкурентно - способного материала для производства медицинских изделий
Критерии приемки результата проекта:	Адекватность результатов
Требования к результату проекта:	**Требование:**
	Стандартизация готового продукта

5.6 Организационная структура проекта

Организационная структура проекта - соответствующая проекту временная организационная структура, включающая всех его участников и создаваемая для успешного управления и достижения целей проекта.

Таблица 22 – Рабочая группа проекта

№ п/п	**ФИО, основное место работы, должность**	**Роль в проекте**	**Функции**	**Трудозатраты, час**
1	Новиков Виктор Тимофеевич, НИ ТПУ, доцент кафедры ТОВПМ, руководитель проекта	Координирует деятельность участников проекта	отвечает за реализацию проекта в пределах заданных ограничений по ресурсам, координирует деятельность участников проекта	584

2	Ермакова Е.А., НИИ ТПУ, кафедра ТОВ ПМ, Магистрант	Исполнитель по проекту	Выполнение отдельных работ по проекту	1167
3	Похарукова Ю.Е., НИИ ТПУ, кафедра ТОВ ПМ, аспирант	Исполнитель по проекту	Выполнение отдельных работ по проекту	1112
4	Криницына З.В.	Эксперт проекта	Специалист, обладающий специальными знаниями и опытом в сфере раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	54
5	Раденков Т.А.	Эксперт проекта	Специалист, обладающий специальными знаниями и опытом в разделе «Социальная ответственность»	54
ИТОГО				2971

5.7 Ограничения и допущения проекта

Таблица 23 – Ограничения и допущения проекта

Фактор	**Ограничения / допущения**
3.1. Бюджет проекта	Отсутствует
3.1.1. Источник финансирования	Отсутствует

3.2. Сроки проекта	10. 2016 – 05. 2017 г
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом:	2.10.2016
3.2.2. Дата завершения проекта	31.05. 2017

5.8 Планирование управления научно - техническим проектом

5.8.1 План проекта

Таблица 24 – Календарный план проекта

Код работы	**Название**	**Длительность, дни**	**Дата начала работ**	**Дата окончания работ**	**Состав участников**
1	Составление технического задания	33	12.09.16	17.10.16	Новиков В.Т.
2	Литературный обзор	41	19.10.16	29.11.16	Ермакова Е.А.
3	Теоретический анализ	25	30.11.16	25.12.16	Похарукова Ю.Е..
4	Постановка задачи исследования	6	26.12.16	31.12.16	Новиков В.Т., Ермакова Е.А.
5	Экспериментальная часть	105	06.01.17	24.04.17	Ермакова Е.А., Похарукова Ю.Е.
6	Результаты и обсуждения	17	27.04.17	14.05.17	Новиков В.Т., Ермакова Е.А., Похарукова Ю.Е.
7	Разработка презентации и раздаточного материала	15	14.05.17	29.05.17	Ермакова Е.А., Похарукова Ю.Е.
8	Оформление	13	30.05.17	11.06.17	Ермакова Е.А.
И т о г о:		255			

Таблица 25 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме: «Получение этилового эфира молочной кислоты»

Код работы (из ИСР)	Вид работ	Исполнители	$T_к$, кал, дн.	Продолжительность выполнения работ																														
				Сент.			Окт.			Нояб.			Дек.			Янв.			Фев.			Март			Апр.			Май			Июнь					
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	Проведение литературного и патентного обзора	Магистрант	45																																	
2	Теоретический анализ	Магистрант	25																																	
3	Постановка задачи исследования	Руководитель магистрант	7																																	
4	Экспериментальная часть	магистрант	88																																	
5	Результаты и обсуждения	Руководитель магистрант	10																																	
6	Оформление работы	Магистрант	17																																	
7	Разработка презентации и раздаточного материала	Руководитель магистрант	5																																	

Руководитель Магистрант

5.9 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. Расчет стоимости материальных затрат производится по действующим прейскурантам или договорным ценам.

Таблица 26 – Расчет затрат на сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

№ п/п	Наименование затрат	Единица измерений	Расход	Цена за единицу, руб	Сумма, руб
1	Молочная кислота	кг	10	15624,25	15624,25
2	Полилактид	г	100	2659,03	2659,03
3	Бензол	л	1	8576.92	8576,92
4	Этиловый спирт	г	10	675,25	675,25
5	Этилацетат	г	10	753,00	753,00
6	Хлороформ	л	1	1200,00	1200,00
7	Бумага А4	упаковка	2	320	640
8	Ручка	шт	5	35,00	175,00
9	Тетрадь (96 листов)	шт	1	41,00	41,00
Итого					30326,45
Транспортно-заготовительные расходы (4 %)					1213,058
Итого по статье					31539,508

Таблица 27 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во	Стоимость, руб.
1	Колбонагреватель	1	1450
2	Компьютер	1	35000
3	Колбы	3	2100
Итого			38550

Таблица 28 – Расчет энергетических затрат

Наименование оборудования	Мощность, кВт	Время работы, ч	Энергозатраты за период выполнения проекта, кВт·ч	Затраты на энергию за период выполнения проекта, руб. (2,38 руб./кВт)
Колбонагреватель	0,295	240	70,8	308,69
Компьютер	0,350	240	84,0	366,24

Итого				674,93

Рассчитаем все затраты на выполнение исследовательской работы (таблица 29).

Таблица 29 – Группировка затрат по статьям

Вид работ	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты, руб	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ, руб	Энергозатраты, руб	Основная заработная плата, руб	Отчисления на социальные нужды, руб	Итого плановая себестоимость, руб
	31539,508	20105,85	674,93	138977,36	41971,16	233268,81

Расчет основной заработной платы приведен в таблице 26.

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

$$С_{зп} = З_{осн} + З_{доп},$$

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

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

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot Т_{раб},$$

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{дн} = \frac{З_{м} \cdot М}{F_{д}},$$

где$З_{м}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;М – количество месяцев работы без отпуска в течение года: – при отпуске в 24 раб. дня М

=11,2 месяца, 5-дневная неделя; – при отпуске в 48 раб. дней М=10,4 месяца, 6-дневная неделя;$F_д$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Таблица 30 – Баланс рабочего времени одного исполнителя НИР за 2015-2016 учебный год

Показатели рабочего времени	Исполнитель
Календарное число дней	304
Количество нерабочих дней - выходные дни - праздничные дни	 86 14
Номинальный фонд рабочего времени	204
Потери рабочего времени - отпуск - невыходы по болезни	 48 10
Эффективный фонд рабочего времени	146

Месячный должностной оклад работника:

$$З_м = З_б \cdot (k_{пр} + k_д) \cdot k_р$$

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

$$З_{м(н.рук)} = 20380 \cdot 1,12 \cdot 1,3 = 29673,28$$
$$З_{м(конс)} = 7500 \cdot 1,12 \cdot 1,3 = 10920,00$$
$$З_{м(исп)} = 6590 \cdot 1,12 \cdot 1,3 = 9595,04$$

Среднедневная заработная плата:

$$З_{дн(н.рук)} = \frac{29673,28 \cdot 10,4}{146} = 2113,71 руб.;$$
$$З_{дн(конс)} = \frac{10920,00 \cdot 10,4}{146} = 777,86 руб.;$$
$$З_{дн(исп)} = \frac{6590 \cdot 10,4}{146} = 469,42 руб.$$

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

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

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

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

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 27.

Таблица 31 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$З_б$, руб.	$k_{пр}$	$k_р$	$З_м$, руб	$З_{дн}$, руб.	$Т_р$, раб. дн.	$З_{осн}$, руб.
Руководитель	20380	1,12	1,3	29673,28	1296,65	22	46501,62
Магистрант	6590	1,12	1,3	9595,04	419,28	197	92475,74

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

Таблица 32 – Заработанная плата исполнителей НИР

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

5.10 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

5.10.1 Оценка сравнительной эффективности исследования

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_ф^p = \frac{Ф_{pi}}{Ф_{max}} = \frac{233268,81}{234398,23} = 0,995;$$

$$I_ф^{a1} = \frac{Ф_{pi}}{Ф_{max}} = \frac{233559,74}{234398,23} = 0,996;$$

$$I_{ф}^{a2} = \frac{Ф_{pi}}{Ф_{max}} = \frac{234398{,}23}{234398{,}23} = 1.$$

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

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

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

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

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

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в таблице 33.

Таблица 33 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

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

* Аналог 1 – Метиловый эфир молочной кислоты;

* Аналог 2 – Бутиловый эфир молочной кислоты.

$$I_m^p = 5 \cdot 0{,}1 + 4 \cdot 0{,}15 + 5 \cdot 0{,}20 + 5 \cdot 0{,}15 + 4 \cdot 0{,}25 + 5 \cdot 0{,}15 = 4{,}6$$
$$I_m^{a1} = 4 \cdot 0{,}1 + 4 \cdot 0{,}15 + 4 \cdot 0{,}20 + 5 \cdot 0{,}15 + 4 \cdot 0{,}25 + 4 \cdot 0{,}15 = 4{,}15$$
$$I_m^{a2} = 3 \cdot 0{,}1 + 4 \cdot 0{,}15 + 3 \cdot 0{,}20 + 5 \cdot 0{,}15 + 4 \cdot 0{,}25 + 3 \cdot 0{,}15 = 3{,}7$$

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

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

$$I_ф^p = \frac{4.6}{0.995} = 4{,}62;$$

$$I_ф^{a1} = \frac{I_m^{a1}}{I_ф^{a1}} = \frac{4.15}{0.996} = 4{,}17;$$

$$I_ф^{a1} = \frac{I_m^{a2}}{I_ф^{a2}} = \frac{3.7}{1} = 3{,}7.$$

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

$$Э_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_Ф^{a1}} = \frac{4{,}62}{4{,}17} = 1{,}11;$$

$$Э_{ср} = \frac{I_{финр}^p}{I_Ф^{a2}} = \frac{4{,}62}{3{,}7} = 1{,}25.$$

где $Э_{ср}$ – сравнительная эффективность проекта; I_m^p – интегральный показатель разработки; I_m^a – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 34 – Сравнительная эффективность разработки

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

* Аналог 1 – Метиловый эфир молочной кислоты;

* Аналог 2 – Бутиловый эфир молочной кислоты.

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

Список публикаций

1. Я.С. Боровикова, Ю.Е. Похарукова, **Е.А. Ермакова**, Ю.Б. Луговская, Получение сложных эфиров молочной кислоты со спиртами // Химия и химическая технология в XXI веке: Материалы XVII Международной научно-практической конференции имени профессора Л.П. Кулева студентов и молодых ученых, - Томск: Изд-во ТПУ, 2016. - 312-160 с.

2. **Е.А. Ермакова**, Ю.Е. Похарукова, Получение этилового эфира из полилактида // Химия и химическая технология в XXI веке: Материалы XVIII Международной научно-практической конференции имени профессора Л.П. Кулева студентов и молодых ученых, - Томск: Изд-во ТПУ, 2017. - 312-160 с.