

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



Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
Отделение химической инженерии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Технология синтеза гликолида

УДК 547.472.2.057

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМБА	Фролов Василий Сергеевич		

Руководитель

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

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

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

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОКД	Король И.С.	к.х.н., доцент		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ООП	Бондалетова Л.И.	к.х.н., доцент		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Применять базовые и специальные, математические, естественнонаучные, социально-экономические и профессиональные знания в профессиональной деятельности
P2	Применять знания в области современных химических технологий для решения производственных задач
P3	Ставить и решать задачи производственного анализа, связанные с созданием и переработкой материалов с использованием моделирования объектов и процессов химической технологии
P4	Разрабатывать <i>новые</i> технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии, <i>проектировать объекты химической технологии в контексте предприятия, общества и окружающей среды</i>
P5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий
P6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, <i>выводить на рынок новые материалы</i> , соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химико-технологическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.
<i>Общекультурные компетенции</i>	
P7	Демонстрировать знания социальных, этических и культурных аспектов профессиональной деятельности.
P8	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.
P9	<i>Активно владеть иностранным языком</i> на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности.
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, <i>демонстрировать лидерство в инженерной деятельности и инженерном предпринимательстве</i> , ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации.

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

Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
Бондалетова Л.И.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ6А	Фролову Василию Сергеевичу

Тема работы:

Синтез гликолида из монохлорацетата натрия	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	№ 9666/с от 08.12.2017
Срок сдачи студентом выполненной работы:	5.06.2018

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 – гликолид, полученный путем синтеза из соли монохлорацетата натрия
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 работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).	Аналитический обзор литературы Объекты и методы исследования Экспериментальные результаты и их обсуждение Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение Социальная ответственность Заключение по работе
Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)	Презентация

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы (с указанием разделов)

Раздел	Консультант
Синтез гликолида из монохлорацетата натрия	к.х.н. Новиков В.Т.
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	к.т.н. Криницына З.В.
Социальная ответственность	к.х.н. Король И.С.
Обзор литературы на иностранном языке	ст. преподаватель Рыманова И.Е

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

На русском: Литературный обзор

На английском: Literature review

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

Задание выдал руководитель:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ6А	Фролов В.С.		

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ6А	Фролов Василий Сергеевич

Инженерная школа природных ресурсов	Отделение химической инженерии
Уровень образования Магистр	Направление 18.04.01 Химическая технология

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

<i>1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Оценить стоимость материально-технических ресурсов для получения гликолида путем синтеза из соли монохлорацетата натрия</i>
---	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<i>1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	<i>Оценить коммерческий и инновационный потенциал технологии получения гликолида из соли монохлорацетата натрия с высоким выходом продукта</i>
<i>2. Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	<i>Календарное планирование работ, построение диаграммы Ганта, оценка рисков, связанных с выполнением проекта</i>
<i>3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	<i>Определить ресурсную, финансовую и экономическую эффективность проекта</i>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ6А	Фролов Василий Сергеевич		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 2ДМ6А	ФИО Фролов Василий Сергеевич
-----------------	---------------------------------

Инженерная школа природных ресурсов		Отделение химической инженерии	
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования и области его применения	<i>Объектом исследования является гликолид. Исследуется способ получения его из монохлорацетата натрия. Гликолид находит свое широкое применение в медицине и фармакологии. Рабочей зоной является лаборатория ТПУ.</i>
---	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Производственная безопасность</p> <p>1.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности</p> <p>1.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности</p>	<p><i>Выявлена производственная безопасность разработки.</i></p> <p><i>1.1 В качестве вредных факторов выделены:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • <i>наличие в воздухе вредных химических веществ (ГОСТ 12.1.005-94 ССБТ),</i> • <i>повышенная температура поверхностей оборудования (ГОСТ 12.2.003-91 ССБТ)</i> • <i>недостаточная освещенность рабочей зоны (СНиП 23-05-95).</i> <p><i>Средствами индивидуальной защиты при работе в исследовательской лаборатории являются халат хлопчатобумажный, резиновые перчатки, очки защитные, а также респиратор.</i></p> <p><i>1.2 В качестве опасных факторов выделены:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - <i>электробезопасность (ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ),</i> - <i>пожаробезопасность (Федеральный закон от 22 июля 2008 г. N 123-ФЗ Технический регламент о требованиях пожарной безопасности).</i>
<p>2. Экологическая безопасность:</p> <ul style="list-style-type: none"> - анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); - анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); - анализ воздействия объекта на литосферу (отходы) 	<p><i>Воздействия на жилую зону не выявлено.</i></p> <p><i>В процессе получения гликолида могут образовываться жидкие и твердые отходы, кроме того возможно наличие в воздухе паров растворителей.</i></p> <p><i>Необходимо работать в ламинарном шкафу при включенной вентиляции, а утилизацию отходов осуществлять согласно установленным правилам.</i></p> <p><i>Получаемый продукт (гликолид) относится к классу биоразлагаемых и не оказывает воздействия на окружающую среду.</i></p>
<p>3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях</p>	<p><i>Возможными чрезвычайными ситуациями в исследовательской лаборатории являются производственные аварии и пожары, причинами которых могут стать неисправности в электрооборудовании, а также нарушение техники безопасности при</i></p>

	<i>работе с опасными химическими веществами.</i>
4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	<i>Рассмотрены правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности. Работа производится в соответствии с трудовым законодательством РФ.</i>

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОКД	Король И.С	к.х.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Група	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ6А	Фролов Василий Сергеевич		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 110 страниц, 15 рисунков, 37 таблиц, 52 источников, 1 приложение.

Ключевые слова: гликолид, монохлорацетат натрия, олигомер гликолевой кислоты, биоразлагаемые полимеры, биодegradация.

Объектом исследования являются монохлорацетат натрия и гликолид.

Цель работы – исследование процесса получения эфира гликолевой кислоты из соли монохлорацетата натрия.

В процессе исследования проводилась серия научно–исследовательских работ.

В результате проведенных исследований была отработана методика проведения процесса синтеза гликолида из монохлорацетата натрия, в результате чего был получен и очищен гликолид – циклический сложный эфир гликолевой кислоты.

Основные конструктивные, технологические и технико–эксплуатационные характеристики используемых установок: лабораторная установка для простой перегонки под вакуумом, оснащенная термометром, вакуумная насосная станция, прибор для определения температуры плавления, ИК спектрометр.

Область применения: гликолид используют для получения полигликолида – материала для изготовления изделий медицинского и фармакологического назначения (рассасывающиеся хирургические шовные материалы, матриксы, эндопротезы, в качестве материала оболочек лекарств пролонгированного действия).

Экономическая эффективность/значимость работы: данная работа имеет важное значение, так как полигликолид применяются в медицине для производства медицинских биоразлагаемых изделий.

В будущем планируется дальнейшее изучение процесса синтеза гликолида данным способом и дальнейшее получение из него полигликолида.

Нормативные ссылки

В настоящей работе использованы ссылки на следующие стандарты:

1. ГОСТ 12.0.003-74 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация
2. ТУ 2432-001-53535770-2005 Монохлорацетат натрия.
3. ГОСТ 12.1.011-78 ССБТ. Смеси взрывоопасные. Классификация и методы испытаний.
4. ГН 2.2.5.686-98 Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны. Гигиенические нормативы.
5. ГОСТ 12.4.011–89 ССБТ. Средства защиты работающих. Общие требования и классификация.
6. Федеральный закон от 22 июля 2008 г. N 123-ФЗ Технический регламент о требованиях пожарной безопасности.
7. ПНД Ф 12.13.1-03 Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения).
8. ПНД Ф 12.13.1-03 Методические рекомендации. Техника безопасности при работе в аналитических лабораториях (общие положения).
9. ГОСТ Р 22.0.01-94. Безопасность в ЧС. Основные положения.
10. Российская Федерация. Законы. Трудовой кодекс Российской Федерации: [федер. закон: принят Гос. Думой 30 декабря 2001 г].

Обозначения и сокращения

ПГА – полигликолид

ПЛА – полилактид

NaМХУК – монохлорацетат натрия

Оглавление	С.
Введение	16
1 Литературный обзор	18
1.1 Биоразлагаемые полимеры: современные тенденции	18
1.2 Преимущества и недостатки биоразлагаемых полимеров	20
1.3 Биодegradация: определение	22
1.4 Классификация биоразлагаемых полимеров	24
1.5 Полиэферы	25
1.5.1 Общие сведения	25
1.5.2 Способы синтеза полиэферов	27
1.6 Области применения биоразлагаемых полиэферов	28
1.7 Полигликолид или полигликолевая кислота	33
1.7.1 Характеристика полигликолида	33
1.7.2 Разложение полигликолида	35
2 Объекты и методы исследования	37
2.1 Характеристика сырья	37
2.2 Характеристика объекта исследования	42
1.7.3 Свойства гликолида	42
1.7.4 Способы синтеза гликолида	43
2.2 Методика синтеза гликолида	47
2.3 Методика очистки гликолида	48
2.4 Методы анализа	49
3 Результаты проведенного исследования	50
4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	55
4.1 Предпроектный анализ	55
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	55
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции	55

ресурсоэффективности и ресурсосбережения	
4.1.3 Диаграмма Исикавы	56
4.1.4 SWOT-анализ	57
4.1.5 Оценка готовности проекта к коммерциализации	59
4.1.6 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	60
4.2 Инициация проекта	61
4.2.1 Цели и результат проекта	61
4.2.2 Организационная структура проекта	62
4.2.3 Ограничения и допущения проекта	63
4.3 Планирование управления научно-техническим проектом	63
4.3.1. Иерархическая структура работ проекта	63
4.3.2 Контрольные события проекта	64
4.3.3 План проекта	64
4.3.4 Бюджет научного исследования	66
4.3.5 Организационная структура проекта	72
4.3.6 Матрица ответственности	72
4.3.7 План управления коммуникациями проекта	73
4.3.8 Реестр рисков проекта	74
4.3.9 План управления контрактами и поставками	75
4.3.10 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	75
5 Социальная ответственность	80
5.1 Производственная безопасность	80
5.1.1 Анализ вредных факторов производственной среды	80
5.1.2 Анализ опасных факторов производственной среды	84
5.2 Экологическая безопасность	85

5.3	Безопасность в чрезвычайных ситуациях	86
5.4	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	87
	Заключение	89
	Список публикаций	90
	Список используемых источников	91
	Приложение А	97

Введение

В настоящее время разработка биоразлагаемых полимеров является перспективным направлением исследований. Полимеры, способные самопроизвольно разрушаться в результате естественных микробиологических и химических процессов, нашли свое широкое применение преимущественно в двух сферах жизнедеятельности человека – медицине и защите окружающей среды.

Широко используемым в медицине биоразлагаемым полимером является, например, шовный материал для хирургии на основе водорастворимых полимеров. Перспективно использование биоразлагаемых полимеров в качестве имплантатов, которые могут постепенно заменяться в организме костной, хрящевой или другой живой тканью.

Одними из первых в тканевой инженерии стали применяться биodeградируемые синтетические биоматериалы на основе полимеров органических кислот, например, молочной и гликолевой. Матрицы на основе органических кислот легли в основу создания таких органов и тканей, как кожа, кость, хрящ, сухожилие, мышцы (поперечно-полосатая, гладкая и сердечная), тонкая кишка и др. Биodeградируемые полимеры могут применяться в качестве носителей лекарственных препаратов в системах с их контролируемым высвобождением.

Актуальность данного исследования заключается в определении оптимальных параметров процесса синтеза гликолида из монохлорацетата натрия (NaMXUK), как наиболее перспективного способа синтеза гликолида с экономической точки зрения.

Целью данной работы оценка влияния различных технологических параметров на процесс синтеза гликолида из NaMXUK .

Для достижения цели решались следующие *задачи*:

1. Синтезировать гликолид из натриевой соли монохлоруксусной кислоты;

2. Определить выход полученного гликолида при различных температурах процесса;
3. Оценить зависимость выхода гликолида-сырца при использовании различных катализаторов;
4. Определить зависимость выхода гликолида-сырца от влажности исходного NaMXUK.

Объект исследования: технология получения гликолида из соли NaMXUK.

Научная и практическая новизна:

Определены оптимальные значения технологических параметров для процесса синтеза гликолида из NaMXUK, обеспечивающие наибольший выход гликолида.

Апробация работы. Материалы работы докладывались на XIX Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени Л.П. Кулёва «Химия и химическая технология в XXI веке» (Томск, 2018).

1 Литературный обзор

1.1 Биоразлагаемые полимеры: современные тенденции

В последние два десятилетия двадцатого века особый интерес исследователей сосредоточен на исследовании и создании биodeградируемых (гидролитически и ферментативно разлагаемых) биоматериалов, пригодных для медицинских и смежных применений [1]. Современные темпы разработки данных полимеров позволяют предположить, что в ближайшие пару лет большая часть постоянных протезов, используемых для временных терапевтических нужд, будет заменена на биоразлагаемые. Существует несколько причин для положительного рассмотрения вопроса замены биостойких материалов на биodeградируемые для биомедицинских назначений. Основной причиной является проблема биосовместимости со многими существующими постоянными имплантатами и различные уровни этических и технических проблем, связанные с ревизионными операциями по извлечению их из тела.

Несмотря на то, что применение в биомедицинских целях ферментативно разлагающихся природных полимеров, таких как коллаген, датируются тысячами лет, применение синтетических биоразлагаемых полимеров началось только во второй половине 1960-х годов [2]. Однако за последние два десятилетия было создано множество синтетических биоразлагаемых полимеров нового поколения и аналогичных природных полимеров, специально разработанных для биомедицинских назначений. Причиной этого, в первую очередь, является появление новых биомедицинских технологий, включая: тканевую инженерию, регенеративную медицину, генную терапию, контролируруемую поставку лекарственных средств и бионанотехнологию, для чего потребовалась разработка новых различных биоразлагаемых материалов. Медленную эволюцию в развитии биоразлагаемых биоматериалов по сравнению с развивающимися товарными полимерами можно объяснить особыми

проблемами при разработке рассасывающихся клинических материалов. Биоматериал – это материал, предназначенный для взаимодействия с биологическими системами с целью оценки, лечения, увеличения или замены любой ткани, органа или функции организма. Важнейшей предпосылкой для получения материала в качестве биоматериала является его биосовместимость, т.е. способность материала выполнять ответ организма в конкретном назначении. Реакция ткани на имплантат зависит от множества факторов, от химических, физических и биологических свойств материалов до формы и структуры имплантата. В случае биоразлагаемых биоматериалов их активная биосовместимость должна быть проявляться в течение продолжительного времени.

Обобщим важнейшие свойства, которыми должен обладать биоразлагаемый биоматериал [3]:

1. Материал не должен вызывать устойчивый воспалительный или токсический ответ организм при имплантации.
2. Материал должен иметь соответствующий требованиям срок годности.
3. Время разложения материала должно соответствовать процессу заживления или регенерации.
4. Материал должен иметь соответствующие механические свойства для указанного применения, а изменение механических свойств при деградации должно быть совместимо с процессом заживления или регенерации.
5. Продукты деградации должны быть нетоксичными и способны усваиваться и очищаться от тела.
6. Материал должен иметь соответствующую проницаемость и технологичность для предполагаемого назначения.

На биосовместимость полимерных биоматериалов оказывают влияние ряд факторов: химический состав материала, молекулярная масса, растворимость, форма и структура имплантата, гидрофильность /

гидрофобность, смазывающая способность, поверхностная энергия, водопоглощение, разлагаемость и механизм разрушения.

Учитывая сложность и большую область применения полимерных биоматериалов, существует острая необходимость разработки широкого спектра биоразлагаемых материалов, подходящих для изготовления имплантатов, которые могли бы соответствовать конкретным и уникальным требованиям для каждого отдельного медицинского назначения.

Разработка полимеров с заранее заданными свойствами и определенным сроком службы для широкого спектра их применений является важной задачей для исследователей, и Альбертссон и Карлссон предложили четыре различных стратегии достижения данной цели [4]:

- использование дешевых, синтетических, объемных полимеров с добавлением биodeградируемого или фотоокисляемого компонента;
- химическая модификация основной полимерной цепи синтетических полимеров путем введения гидролизуемых или окисляемых групп;
- создание в соответствии с требованиями новых гидролизуемых структур, например, полиэфиров, полиангидридов и поликарбонатов;
- использование биodeградируемых полимеров и их производных, причем полигидроксиалканоаты являются наиболее изученными в данном направлении.

Однако в настоящее время особый интерес исследователи уделяют разработке третьей стратегии.

1.2 Преимущества и недостатки биоразлагаемых полимеров

Использование биоразлагаемых полимеров имеет как свои достоинства, так и свои недостатки [5]. Рассмотрим их более подробно.

Преимущества биоразлагаемых полимеров:

1. Сокращение выбросов углерода

Одним из преимуществ, связанных с использованием биоразлагаемых полимеров, является минимизация эмиссии углерода в воздух в процессе производства биопластов. В отличие от производства обычных пластмасс, которые выделяют в среднем четыре тонны углерода, биопластики выделяют примерно 0,8 тонны углерода.

2. Снижение потребления энергии

Процесс производства биоразлагаемых пластмасс требует меньшего количества затрат энергии и не нуждается в использовании ископаемого топлива для повторного использования. Поскольку требуется меньше энергии, можно создавать больше биопластов, при этом загрязнений в окружающей среде будет меньше.

3. Уменьшение площадей полигонов

Пластмассы, которые не подвергаются биологическому разложению, вывозятся и сбрасываются на свалки. Следовательно, земельная площадь, которая могла бы использоваться для сельского хозяйства, проживания или промышленных нужд, превращается в свалки. При использовании биопластиков нет необходимости в расширении полигонов, поскольку эти пластмассы могут быть поглощены почвой и превращаться в компост или гумус.

4. Вторичная переработка

Помимо того, что при отбрасывании меньше времени на разрушение, биоразлагаемые пластмассы также могут быть переработаны и нетоксичны, поскольку они не содержат химикатов или токсинов по сравнению с другими типами пластмасс, которые могут выделять вредные химические вещества, особенно если они сжигаются.

Несмотря на все его преимущества, биоразлагаемые полимеры имеют ряд недостатков:

1. Потребность в устройствах для компоста

Использованные биоразлагаемые полимеры должны быть переработаны в компост, однако, не все страны обеспечены необходимыми машинами для получения компоста, и, следовательно, отработанные полимеры не будут переработаны должным образом и будут захоронены на свалках вместе с другими полимерами.

2. Технологическая сложность

Биопластики получают из растительного сырья, такого как соя и кукуруза. Однако эти органические растения обрабатываются пестицидами, которые содержат химические вещества, которые могут загрязнять сельскохозяйственные культуры и переноситься в готовый продукт.

3. Риск заражения

Биоразлагаемые пластмассы не должны смешиваться с небiorазлагаемыми пластмассами при выбросе в мусорные контейнеры. Проблема состоит в том, что не все люди знают, как отличить биопластики от других пластмасс. Когда эти два типа пластмасс смешиваются вместе, биопластики становятся загрязненными и больше не могут быть использованы. Следовательно, эти загрязненные биопластики остаются на мусорных свалках и только увеличивают объем отходов.

1.3 Биодegradация: определение

Официально принято множество различных определений понятия «биодegradация», в зависимости от того, на чем основываются стандарты определяющих ее организаций и их конкретные интересы. Альбертссон и Карлссон [6] определили биодegradацию как событие, происходящее в результате действия ферментов и / или химического разложения, связанного с живыми организмами и их продуктами их секреции. Также необходимо учитывать абиотические реакции, такие как фоторазложение, окисление и

гидролиз, которые могут изменять полимер до, во время или вместо биodeградации под действием факторов окружающей среды.

Так, строго говоря, «биodeградация полимера» определяется как ухудшение его физических и химических свойств и уменьшение его молекулярной массы вплоть до образования CO_2 , H_2O , CH_4 и других низкомолекулярных продуктов под влиянием микроорганизмов как в аэробных, так и в анаэробных условиях под действием абиотических химических реакций, таких как фотodeградация, окисление и гидролиз.

Согласно ASTM D 6400-99 [7] пластик считается биоразлагаемым, если деградация в нем возникает из-за действия микроорганизмов, встречающихся в природе, таких как бактерии, грибы и водоросли. Биоразлагаемый пластик представляет собой пластик, который подвергается деградации под действием биологических процессов во время компостирования с получением CO_2 , воды, неорганических соединений и биомассы со скоростью, совместимой с другими компостируемыми материалами, и не оставляет видимых, различимых или токсичных остатков.

Химизм биodeградации

Биodeградация – это единственный путь разложения, который способствует полному удалению полимера или продуктов его разложения из окружающей среды. Процесс биodeградации протекает в два этапа (рисунок 1): первая стадия – деполимеризация макромолекул в более короткие цепи. Эта стадия обычно происходит вне организма из-за размера полимерной цепи и нерастворимого характера многих полимеров. Расщеплению полимерной цепи способствуют внеклеточные ферменты (эндо или экзо-ферменты) и абиотические реакции. На этой фазе площадь контакта между полимером и микроорганизмом увеличивается.

Второй этап – минерализация. Когда образуются достаточные олигомерные фрагменты небольшого размера, они переносятся в клетки, где они поглощаются микроорганизмами, а затем минерализуются.

Биодеградация может происходить в присутствии кислорода (аэробная биодеградация) и в отсутствие кислорода (анаэробная биодеградация). Полная биодеградация или минерализация происходит тогда, когда остаток отсутствует, т.е. когда исходный продукт полностью превращается в газообразные продукты и соли [24].

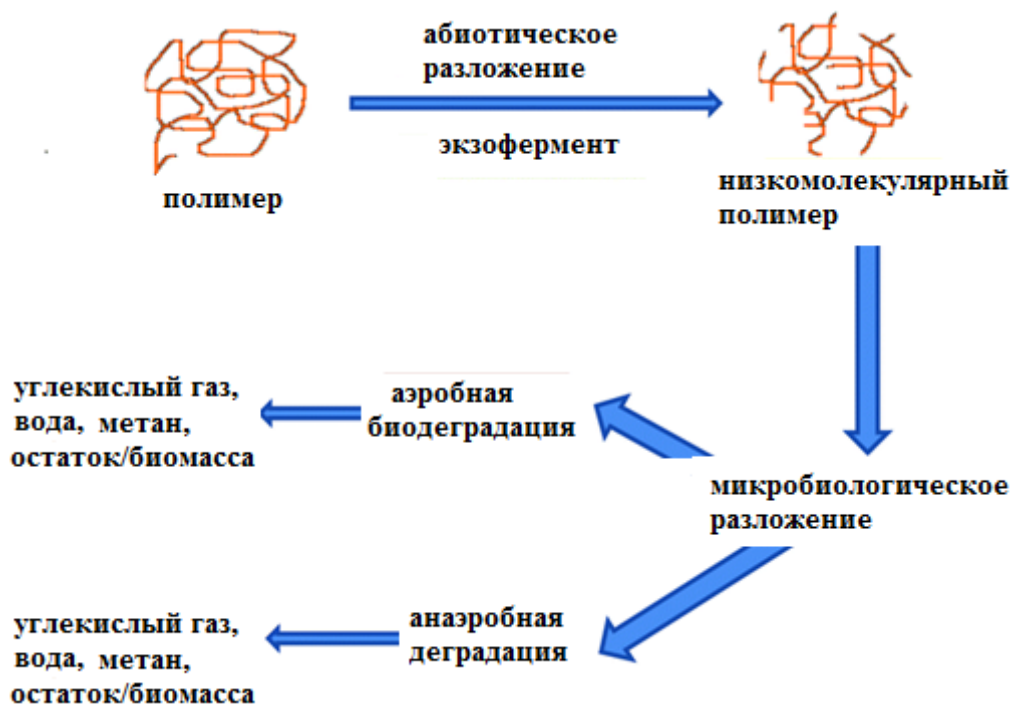


Рисунок 1 – Схематическое изображение химизма процесса биодеградации полимера [6]

1.4 Классификация биоразлагаемых полимеров

Биоразлагаемые полимеры обычно делятся на две группы в зависимости от их происхождения – природные и синтетические. Полимеры, полученные синтетическим путем, имеют преимущества перед природными полимерами, будучи универсальными с широкой областью применения, и имеющими возможность для адаптации механических свойств и изменения скорости разложения в соответствии с потребностью.

С другой стороны, природные полимеры кажутся привлекательными из-за их превосходной биосовместимости, но они не были полностью

исследованы из-за их нежелательных свойств, такие как антигенность и колебания свойств между разными партиями [1-3].

Ниже на рисунке 2 представлена более полная классификация биоразлагаемых полимеров.

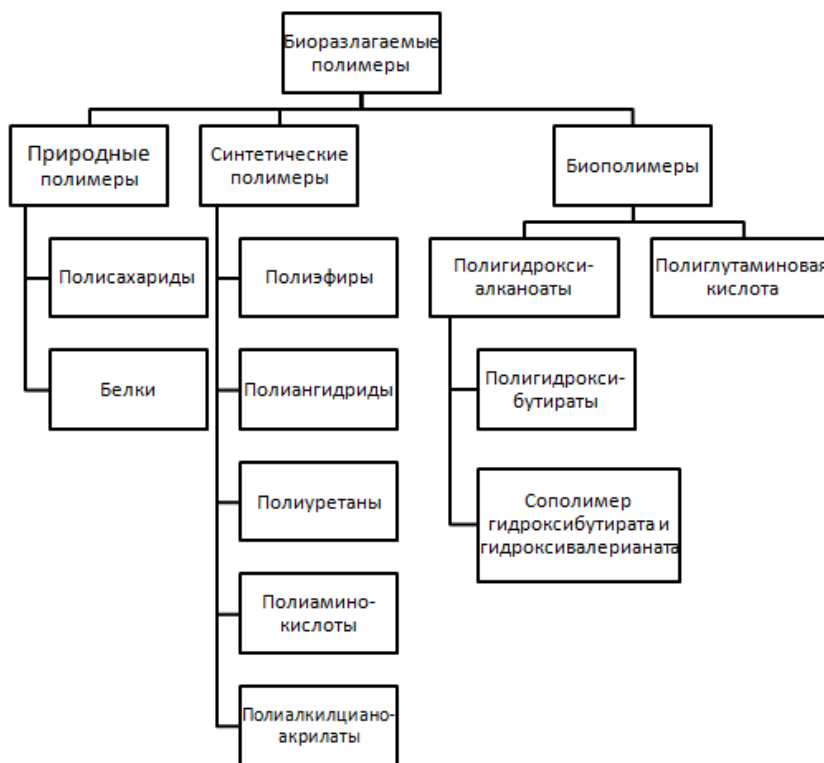


Рисунок 2 – Классификация биоразлагаемых полимеров

Рассмотрим более подробно класс полиэфиров, которые являются объектом исследования в данной работе.

1.5 Полиэферы

1.5.1 Общие сведения

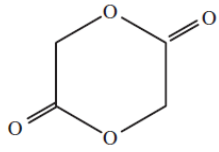
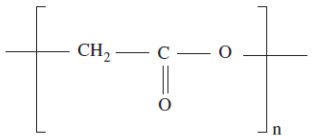
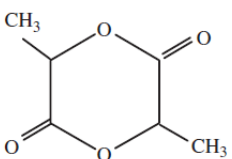
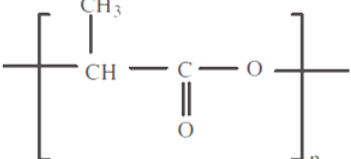
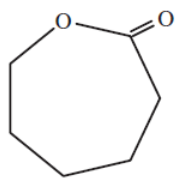
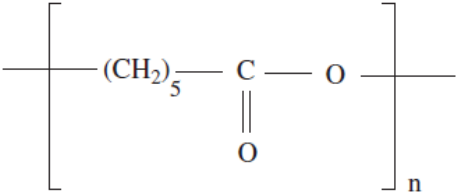
Сложные α -полиэферы представляют собой термопластичные полимеры с гидролитически неустойчивыми алифатическими сложноэфирными связями в их структуре [1]. Хотя все сложные полиэферы теоретически разлагаются, поскольку этерификация является химически обратимым процессом, только алифатические сложные полиэферы с достаточно короткими алифатическими цепями между сложноэфирными

связями могут разлагаться в течение времени, необходимого для большинства биомедицинских применений. Это самый ранний и наиболее изученный класс биоразлагаемых полимеров, уникальность которого заключается в его огромном разнообразии и универсальности. Они могут быть получены из различных мономеров через стадию раскрытия кольца и последующей конденсационной полимеризации в зависимости от мономерных единиц.

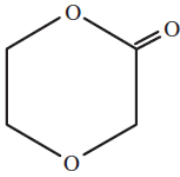
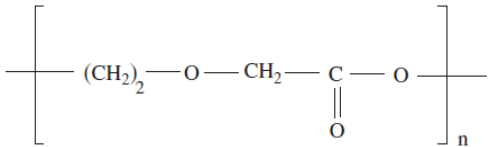
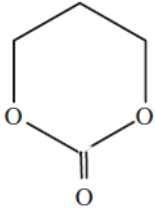
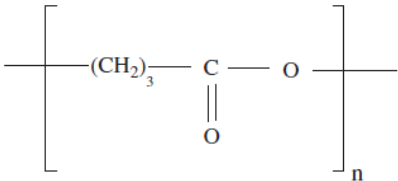
Среди класса сложных полиэфиров наиболее широко исследованными полимерами являются полигидроксикислоты, которые включают полигликолевую кислоту и стереоизомерные формы полимолочной кислоты.

В таблице 1 ниже показана структура различных циклических лактонов и соответствующих им гомополимеров.

Таблица 1 – Типичные циклические лактоны и соответствующие гомополимеры

Циклический лактон	Линейный гомополимер
 <p>гликолид</p>	 <p>полигликолид (ПГА)</p>
 <p>лактид</p>	 <p>полилактид</p>
 <p>капролактон</p>	 <p>поликапролактон</p>

Продолжение таблицы 1

 <p>диоксанон</p>	 <p>полидиоксанон</p>
 <p>триметилкарбонат</p>	 <p>политриметиленкарбонат</p>

Наиболее широко изученными мономерами для синтеза алифатических сложных полиэфиров для биомедицинских целей являются лактид, гликолид и капролактон [15].

1.5.2 Способы синтеза полиэфиров

Синтез ПГА можно осуществить двумя способами: прямой поликонденсацией и полимеризацией с раскрытием цикла циклических лактонов.

Полиэфиры могут быть синтезированы путем поликонденсации бифункциональных мономеров, таких как самоконденсация гидроксикислот, дикислот с диолами, двухосновных хлоридов с диолами или реакцией обмена между сложными диэфирами и диолами. Однако, поскольку трудно получить высокомолекулярные полимеры путем поликонденсации, он не был широко исследован для разработки биоматериалов.

Полимеризация циклических лактонов с раскрытием цикла является наиболее эффективным одnoreакторным способом полимеризации для получения высокомолекулярных гомо- и сополиэфиров. Преимуществами

такого типа полимеризации как коммерчески целесообразного процесса по сравнению с поликонденсацией: более мягкие условия реакции, более короткие реакции, отсутствие побочных продуктов реакции и способность использовать даже шесть или семь членных лактонов [9].

В процессе полимеризации с раскрытием цикла специфические молекулы инициатора, такие как гидроксилсодержащие молекулы, могут контролировать молекулярную массу полимеров. Скорость полимеризации можно регулировать путем применения широкого ряда биосовместимых каталитических систем, таких как октоат олова и 2-этилгексановая кислота. Для дальнейшего улучшения их биосовместимости были разработаны несколько путей полимеризации без растворителей.

1.6 Области применения биоразлагаемых полиэфиров

Основными областями применения биоразлагаемых полимеров, в частности биоразлагаемых полиэфиров, являются предметы экологического и медицинского назначения [10]. Требования к материалам для этих приложений достаточно отличны, к материалам медицинского назначения предъявляются они более строгие. Хотя в большинстве случаев биоразлагаемые полиэферы находят свое применение лишь в одном направлении – либо при решении экологических проблем, либо медицинских целях, однако некоторые из них могут использоваться для обоих применений. На рисунке 3 приведены основные области применения биodeградируемых полиэфиров.

Полиэфир	Область применения		Сфера применения
поли-d,l-лактид ПГА		Медицинская	Хирургические принадлежности Доставка лекарственных средств
поли-l-лактид поликапролактон	Экологическая		Заменители костной ткани Упаковочный материал
полибутиленсукцинат полигидроксимасляная кислота			Изготовление компоста Сельское хозяйство

Рисунок 3 – Возможные области применения биоразлагаемых полиэфиров

Решение экологических проблем

С точки зрения экологии, использование вместо полимеров, устойчивых к условиям окружающей среды, биоразлагаемых полимеров является перспективным способом решения проблемы твердых отходов. Переработка полимерных отходов имеет важное значение для решения данной проблемы, и зачастую именно она является первым способом, который рассматривается. Однако многие полимеры не могут быть легко разделены для повторного использования или в принципе не могут быть переработаны. Кроме того, повторное использование полимерных материалов не может повторяться бесконечно. В таких случаях биоразлагаемые полимеры могут послужить хорошей альтернативой.

В природе биodeградация полиэфиров протекает под действием микроорганизмов, которые выделяют ферменты, способные гидролизировать сложноэфирные связи. Некоторые из полиэфиров, таких как полилактид (ПЛА), напротив, разлагаются главным образом через абиотические маршруты. Когда образуются растворимые фракции, они могут быть дополнительно преобразованы в микробных клетках. Конечными продуктами таких процессов являются CO₂, CH₄, вода и биомасса. Сам полимер вместе с его добавками, а также любой промежуточный продукт

должен быть абсолютно безвреден для окружающей среды. Время разложения должно соответствовать требуемому применению и условиям окружающей среды, в которой полимер будет разлагаться. Кроме того, полиэферы должны обладать удовлетворительными механическими свойствами и технологичностью, подходящими для предполагаемой области применения.

Биоразлагаемые полиэферы, предназначенные для решения экологических проблем, производятся рядом компаний по всему миру и уже находятся на рынке. В таблице 2 представлены марки полиэферов и их производители.

Таблица 2 – Марки полиэферов и их производители

Полиэфир	Торговая марка	Производитель
ПЛА	Ingeot Biopolymer	NatureWorks LLC-Cargill (USA)
	LACEA	Mitsui Chemicals Inc (Япония)
Поликапролактон	САРА	Perstorp UK (Великобритания)
	LACTEL	Durest Corporation
	Biomers by Biomer	(Германия)
	Biocycles	Biocycles (Бразилия)
Полибутиленсукцинаты и их сополимеры с адипиновой кислотой	Bionolles	ShowaDenko (Япония)
	NATUREPLASTs	NaturePlast (Франция)
	PBE	
Алифатико-ароматические полиэферы	Ecoflexs	BASF (Германия)
	Biomaxs PTT	DuPont (США)

Медицинское назначение

Биоразлагаемые полимерные материалы содержат большую группу биоматериалов, т.е. материалов, предназначенных для взаимодействия с биологическими системами. Всякий раз, когда требуется биоматериал в течение ограниченного периода времени, использование полимеров, которые могут биоразлагаться, полезно, поскольку нет необходимости в

хирургическом удалении имплантата после того, как он выполнил свою функцию. Биосовместимость имеет первостепенное значение в таких приложениях. Поскольку биоразлагаемые полимеры действительно не остаются в организме в течение длительного времени, ограничение биосовместимости, которое должно быть доказано в течение длительного периода времени, легче встречается, чем в случае постоянных имплантатов. Также кроме свойства биоразлагаемости в течение определенного периода времени, который обеспечивает желаемый процесс заживления, биоразлагаемые полимеры, используемые в качестве биоматериалов, должны отвечать ряду других требований: полимер и его продукты разложения не должны быть токсичными и не должны вызывать иммунного ответа; механические свойства должны соответствовать требованиям, необходимым для данного применения, с динамикой потери механических свойств в процессе разложения в согласии с процессом заживления; материал также должен выдерживать стерилизацию.

Биоразлагаемые сложные полиэфиры, которые отвечают всем вышеперечисленным критериям, могут найти применение в качестве временных каркасов, в доставке лекарственных средств или в тканевой инженерии. Впервые биоразлагаемые полиэфиры были использованы в качестве хирургического шовного материала в 1960-х годах. Полиэфирами, обычно используемыми для данного применения, являются ПГА торговой марки «Dexons» и сополимер гликолида и L-лактида «Vicryls». Недостатком металлических имплантатов, используемых для фиксации во время заживления поврежденной кости, является необходимость второй операции для его удаления. Также существует опасность того, что кость может быть повторно поломана, поскольку после удаления металлического имплантата может наблюдаться период слабости кости. Биоразлагаемые полимеры, которые постепенно теряют свои механические свойства с одновременным переносом стресса на поврежденную область и способные к полному

поглощению после завершения процесса заживления, считаются хорошими кандидатами для использования в этой области медицины. Ряд коммерческих продуктов, изготовленных в основном из ПЛА и ПГА, уже находят свое применение на рынке.

Также биоразлагаемый материал может использоваться в качестве материала матрицы, в которой растворяется активное вещество, в системах доставки лекарственных средств [11]. Помимо защитной функции такой матрицы, в случае использования биоразлагаемых полимеров, деградация матрицы позволяет контролировать процесс высвобождения лекарственного средства и быть окончательно разложена, что исключает необходимость ее хирургического удаления. Полимерный носитель может быть в разных формах, таких как микросферы, наносферы, шарики, цилиндры или диски. Среди биоразлагаемых полиэфиров, ПЛА, ПГА и их сополимеры являются предметом наиболее интенсивных исследований в этой области. Так уже созданы матрицы для доставки лекарственных средств при кардиотерапии после инфаркта миокарда [12], при лечении спинного мозга [13], болезни Паркинсона [14], легочных заболеваниях (туберкулеза, рака легких, муковисцидоза, пневмонии и др.) [15].

Сополимер лактида с гликолидом используется для повышения биодоступности амфотерицина (эффективного противогрибкового и противолейшманиозного агента) при пероральном приеме, путем включения его в пегилированные наночастицы сополимера [16].

В работе [17] описывается возможность производить мембраны для трансплантации культивируемых лимбальных стволовых клеток к роговице глаза.

В [18] были разработали липидные наночастицы на основе лактида с гликолидом для пероральной доставки вакцин. Данные наночастицы отличаются более высокой несущей способностью и эффективностью образования пузырьков для инкапсулированного овальбумина, по сравнению

с чистыми наночастицами сополимера лактида с гликолидом. Кроме того, они показывают наибольшее сродство с М-клетками (эпителиальными клетками, расположенными в скоплениях лимфоидных узелков в кишечнике).

Для долговременных средств доставки лекарств, поликапролактон был широко исследован из-за его более длительного процесса деградации.

В тканевой инженерии, где клеточный каркас играет роль поддержки растущей ткани во время заживления, также рассматривается использование данных материалов. Технологичность полиэфиров, используемых для этих целей, должна обеспечивать производство конструкций сложных форм и пористости, которые будут поддерживать рост и размножение клеток. Также намечаются тенденции в разработке биodeградируемых полиэфирных конструкций, содержащих биоактивные вещества, для тканевой инженерии, которые будут способствовать росту клеток и восстановлению тканей. Полиэфиры, которые используются для этого биомедицинского применения, включают ПЛА, ПГА, поликапролактон и их различные сополимеры. В [19] описан способ получения композита на основе капролактона / сополимера лактида с гликолидом / нано-гидроксиапатита путем смешивания в расплаве, который находит свое применение в качестве каркасного материала для регенерации костных тканей. Аналогичное применение находит и нанокompозит поли-(лактид-со-гликолид) / гиалуроновая кислота / фибрин / биологически активное стекло [20].

1.7 Полигликолид или полигликолевая кислота

1.7.1 Характеристика полигликолида

Полигликолевая кислота, ПГА, является простейшей поли(α -гидроксикислотой). Мономер для ПГА, гликолевая кислота, обнаруживается в природе в следовых количествах в сахарном тростнике, свекле и винограде, в промышленности в основном производится из хлоруксусной кислоты по

реакции с гидроксидом натрия, также она может быть получена биологическим путем из глюкозы и других сахаров [21]. ПГА может быть получен путем поликонденсации гликолевой кислоты, но он имеет низкую молекулярную массу, по причине равновесной природы ступенчатой реакции поликонденсации. Поэтому для получения полимера с высокой молекулярной массой используют полимеризацию гликолида с раскрытием кольца циклического диэфира, гликолида (рисунок 4).

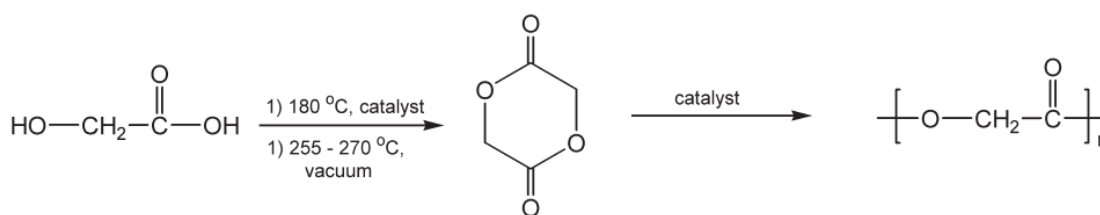


Рисунок 4 – Синтез ПГА из гликолевой кислоты

Предпочтительными катализаторами являются органические соединения олова, сурьмы, цинка, свинца и др. Так, при синтезе сополимера лактида с гликолидом могут быть использованы следующие инициаторы: ацетилацетонат циркония $Zr(Асac)_4$ при температуре от 100 до 150 °С с выходом $\approx 100\%$ [22,23], 2-этилгексаноат олова $Sn(Oct)_2$ при 140-180 °С [24,25], ацетилацетонат железа(III) $Fe(Асac)_3$ и этаноат железа (III) $Fe(OEt)_3$ при температуре 100 °С [26].

ПГА является термопластичным материалом с высокой степенью кристалличности и, следовательно, имеет высокий модуль упругости при растяжении. Температура стеклования этого полимера лежит в диапазоне 35-40 °С и температура плавления очень высока для алифатического полиэфира (200-225 °С) [1]. ПГА не растворяется в большинстве органических растворителей, за исключением высокофторированных соединений, таких как гексафторизопропанол. Благодаря своим волокнообразующим свойствам, вместе с высокой гидролитической нестабильностью, это был первый синтетический сложный полиэфир, который появился на рынке в качестве биоразлагаемого шовного материала.

Также он характеризуется высокой гидрофильностью, что ограничивает его использование в чистом виде, но именно это свойство позволяет использовать его в качестве основы для получения биodeградируемых полимеров и изделий медицинского назначения. Наибольший интерес для исследователей представляют его сополимеры, в частности, с лактидом.

Однако вследствие гидролитической нестабильности он довольно быстро (до 20 сут) теряет около 60 % прочности, что накладывает определенные ограничения на его использование в качестве хирургического материала.

Поэтому значительный интерес представляет синтез сополимеров различного состава на базе молочной и гликолевой кислот (или гликолида и лактида), в которых сочетаются свойства этих двух полимеров и имеется возможность контролировать скорость биодеструкции.

1.7.2 Разложение полигликолида

Термическая деградация ПГА протекает путем случайного расщепления цепи при низких температурах и специфического расщепления концевых групп цепи при более высоких температурах. Однако ПГА демонстрирует лучшую термическую стабильность, чем полимолочная кислота.

ПГА легко гидролизуеться путем случайного расщепления сложноэфирной связи [10]. Щелочные и сильные кислотные среды ускоряют деградацию. Гидролитическое разложение также является основным способом деградации в естественных условиях, что сопровождается быстрым ухудшением механических свойств. В некоторых случаях наблюдаются более высокие скорости разложения в живом организме, чем в лабораторных условиях, причиной этого может быть воздействие некоторых ферментов, таких как неспецифические эстеразы и карбоксипептидазы, хотя некоторые авторы объясняют данное явление различием физических и

физиологических факторов. В процессе деградации ПГА теряет свою прочность через 1-2 месяца и полностью разлагается через 6-12 месяцев. Гликолевая кислота, получаемая при гидролитической деградации ПГА, выводится с мочой. Гликолевая кислота также может быть ферментативно преобразована в глицин, который либо входит в цикл лимонной кислоты, либо выводится с мочой. ПГА считается полностью биосовместимой, хотя более высокие концентрации высвобождаемой гликолевой кислоты при быстрой гидролитической деградации ПГА могут вызвать повреждение внутренних тканей.

2 Объекты и методы исследования

2.1 Характеристика сырья

Монохлорацетат натрия

Монохлоруксусная кислота представляет собой бесцветное гигроскопичное кристаллическое вещество, существующее в трех модификациях: α , β и γ . Среди них α -модификация наиболее стабильна и наиболее важна в практическом отношении. Температура кипения кислоты составляет 189,35 °С, температура плавления α -модификации равна 63 °С, β – 56 °С, γ – 50 °С [34].

Монохлоруксусная кислота смешивается с водой в любых соотношениях, хорошо растворима в метаноле, этаноле и диэтиловом эфире, но ограничено растворима в углеводородах и хлорированных углеводородах.

При смешивании монохлоруксусной кислоты с углекислым натрием или раствором гидроксида натрия (реакция нейтрализации) получают NaMXУК, который является исходным реагентом для получения гликолида. При комнатной температуре NaMXУК – белое гигроскопичное твердое вещество (в форме порошка или гранул).

Основные свойства NaMXУК представлены в таблице 3.

Таблица 3 – Основные свойства NaMXУК

Показатель	Значение
Молекулярный вес, г/моль	116,5
Плотность, кг/м ³	1850
Насыпная плотность, кг/м ³	750-900
Растворимость в воде (г/100 г) при: 20 °С	82
80 °С	110
Массовая доля натрия монохлоруксуснокислого, % не менее	95,0
Массовая доля воды, % не более	5,0

Оксид сурьмы (III)

Трехокись сурьмы представляет собой порошок или кристаллы белого цвета, не растворимые в воде. Температура плавления Sb_2O_3 равна $655\text{ }^\circ\text{C}$, а температура кипения – $1456\text{ }^\circ\text{C}$ [35]. В природе встречается в виде минералов валентинита и сенармонтита. Промышленным способом техническую трехокись сурьмы получают по конверторной технологии, в основе которой лежит использование экзотермичности реакции окисления сурьмы.

Sb_2O_3 применяется главным образом как пигмент для красок, глушитель для эмали, протрава в текстильной промышленности. Также Sb_2O_3 используется в качестве катализатора при производстве полиэтилентерефталата, в качестве флокулянта при производстве двуокиси титана и красок. Широко используется в качестве антипирена для таких пластмасс как поливинилхлорид, полипропилен, полиэтилен, полистирол, полиуретан, различных стирольных пластиков.

Оксид титана(IV)

Чистый диоксид титана представляет собой бесцветные кристаллы (желтеет при нагревании). Для технических целей применяется в раздробленном состоянии, представляя собой белый порошок. Не растворяется в воде и разбавленных минеральных кислотах (за исключением плавиковой). В чистом виде в природе встречается в виде минералов рутила, анатаза и брукита (по строению первые два имеют тетрагональную, а последний — ромбическую сингонию), причём основную часть составляет рутил [36].

Оксид цинка

Оксид цинка представляет собой аморфный порошок белого или слегка желтоватого цвета, нерастворимый в воде, растворимый в минеральных кислотах, уксусной кислоте, в растворах щелочей, аммиака и углекислого аммония [37].

Цеолит синтетический NaA

Цеолит представляет собой минерал с адсорбирующими свойствами, который имеет в своей внутренней структуре пустоты или поры. Именно наличие этих пор и определяет главное свойство цеолитов, а именно адсорбцию. Цеолиты по своей химической структуре представляют собой гидратированные алюмосиликаты щелочных или щелочноземельных микроэлементов. Точнее сказать, что в своей пористой структуре они содержат активные катионы, например, Mg, Ca, K, Na. Наличие активных катионов щелочных металлов наделяет цеолиты адсорбционными, катионообменными и каталитическими свойствами. Стоит отметить, что цеолиты обладают термостабильностью и кислотоустойчивостью, что дает возможность использовать эти минералы в промышленности и во многих других сферах человеческой жизнедеятельности.

Синтетический цеолит NaA применяется для глубокой осушки и тонкой очистки газов и жидкостей, а также для использования на энергетических предприятиях для осушки «сырых» трансформаторных масел; для умягчения жидкостных потоков в процессе водоподготовки энергетических установок.

Основные свойства цеолита NaA представлены в таблице 4.

Таблица 4 – Физико-химические показатели цеолита NaA [38]

Наименование показателя	Значение
Насыпная плотность, г/см ³	≤ 0,8
Диаметр гранул, мм	3,6 ± 0,4
Механическая прочность на раздавливание, кг/мм ²	≥ 2,0
Массовая доля водостойкости, %	≥ 99,0
Динамическая емкость по парам воды, мг/см ³	≥ 144,0
Массовая доля потерь при прокаливании, %	≤ 5,0
Влагоемкость цеолита при сушке воздуха в статических условиях, мг/г	≥ 200
Содержание Fe в пересчете на Fe ₂ O ₃ , %	≤ 0,7

Силикагель

Силикагель представляет собой высушенный гель, образующийся из перенасыщенных растворов кремниевых кислот ($n\text{SiO}_2 \cdot m\text{H}_2\text{O}$). Технический силикагель получают взаимодействием раствора силиката натрия с серной кислотой или сернокислым алюминием, содержащим свободную серную кислоту, с последующей промывкой и сушкой образовавшегося продукта.

Он находит свое применение в качестве адсорбента для осушки и очистки воздуха и других газов или паров, для сушки и осветления некоторых жидкостей, в качестве носителя для катализаторов, для других целей и для экспорта. Основные свойства силикагеля представлены в таблице 5 ниже.

Таблица 5 – Основные свойства силикагеля технического [39]

Наименование показателя	Норма для марки КСМГ первого сорта
1. Внешний вид	Стекловидные прозрачные или матовые зерна овальной, сферической или неправильной формы от бесцветного до темного цвета с черными включениями
2. Массовая доля зерен при размере зерен 2,8-7,0 мм, %	≥ 94
3. Механическая прочность, %	≥ 94
4. Насыпная плотность, г/дм ³	≥ 720
5. Влагоемкость, %, при относительной влажности 20 % / 40 % / 60 % / 100 %	$\geq (9.0 / 16.0 / 25.0 / -)$
6. Массовая доля потери при высушивании, %	≤ 10

Этиловый спирт

Этиловый спирт (этанол, метилкарбинол, винный спирт) – одноатомный алифатический спирт, бесцветная легкоподвижная жидкость с характерным запахом и жгучим вкусом. Плотность этанола составляет 0,7893 г/см³, температура кипения – 78,4 °С, температура плавления – -114,3 °С.

Этиловый спирт смешивается во всех соотношениях с водой, спиртами, диэтиловым эфиром, глицерином, хлороформом, ацетальдегидом, бензином и др. Образует азеотропные смеси с водой, бензолом, толуолом, этилацетатом и др. Основные свойства эталона представлены в таблице 6 [40].

Таблица 6 – Основные физико-химические свойства этилового спирта

Наименование показателя	Значение
1. Объемная доля этилового спирта, %	$\leq 96,0$
2. Проба на чистоту	Должен выдерживать испытание
3. Проба на окисляемость, мин	≤ 10
4. Массовая концентрация альдегидов в безводном спирте, мг/дм ³	≥ 10
5. Массовая концентрация сивушного масла в безводном спирте, мг/дм ³	≥ 10
6. Массовая концентрация кислот в пересчете на уксусную кислоту в безводном спирте, мг/дм ³	≥ 20
7. Массовая концентрация сложных эфиров в безводном спирте, мг/дм ³	≥ 40
8. Массовая концентрация сухого остатка, мг/дм ³	≥ 15
9. Массовая концентрация серы, мг/дм ³	Отсутствует
10. Массовая концентрация щелочи в пересчете на NaOH, мг/дм ³	≥ 15

Этилацетат

Этилацетат – этиловый эфир уксусной кислоты, летучая бесцветная жидкость, имеющая приятный фруктовый запах. Хорошо растворяется в спирте, хлороформе и эфире, в воде растворяется хуже, хорошо горит, предельная взрывоопасность имеет концентрацию в воздухе 2,2 – 9 %. Это растворитель, имеющий небольшую стоимость, малую токсичность,

обладающий приемлемым запахом. Основные физико-химические свойства его приведены в таблице 7 [41].

Таблица 7 – Основные свойства этилацетата

Наименование показателя	Норма	
	Этилацетат	Бутилацетат
1. Массовая доля этилацетата или бутилацетата (C ₄ H ₈ O ₂ или C ₆ H ₁₂ O ₂), %	≤ 99,7	≤ 99,5
2. Температурные пределы перегонки, °С	76,5-77,5	124-126
3. Плотность при 20 °С, г/см ³	0,900-0,902	0,880-0,882
4. Показатель преломления η_D^{20}	1,3724-1,3730	1,3940-1,3950
5. Массовая доля нелетучих веществ, %	≥ 0,0005	≥ 0,001
6. Массовая доля кислот в пересчете на уксусную кислоту, %	≥ 0,003	≥ 0,003
7. Содержание веществ, темнеющих под действием серной кислоты	Должен выдерживать испытание	Не нормируется
8. Массовая доля воды, %	≥ 0,05	≥ 0,05

Бутилацетат

Бутилацетат – бутиловый эфир уксусной кислоты. Это бесцветная жидкость с характерным эфирным запахом. Бутилацетат мало растворим в воде, смешивается с органическими растворителями и растительными маслами, обладает всеми свойствами эфиров сложных. Основные физико-химические свойства его приведены в таблице 8 выше.

2.2 Характеристика объекта исследования

2.2.1 Свойства гликолида

Гликолид – циклический сложный эфир гликолевой кислоты, структура молекулы которого представлена на рисунке 5.

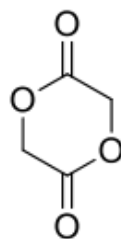


Рисунок 5 – Химическая структура молекулы гликолида.

В таблице 8 приведены основные физические свойства гликолида.

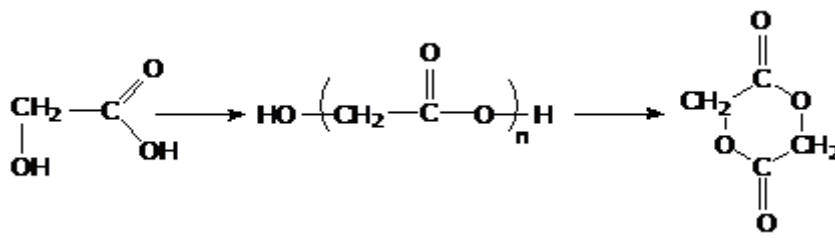
Таблица 8 – Физические свойства гликолида [27]

Показатель	Значение
Молярная масса (г/моль)	116,07
Температура кипения (°С)	240
Температура плавления (°С)	84
Плотность расплава, кг/м ³	1300...1450
Растворимость при 23 °С в (г/100 мл):	
этилацетате	13±2
бутилацетате,	5±1
винилбутиловом эфире,	9±1
хлорбензоле	8±1
Энтальпия при 298,15 К, кДж/моль	620,74
Энтальпия плавления кДж/моль	12,7

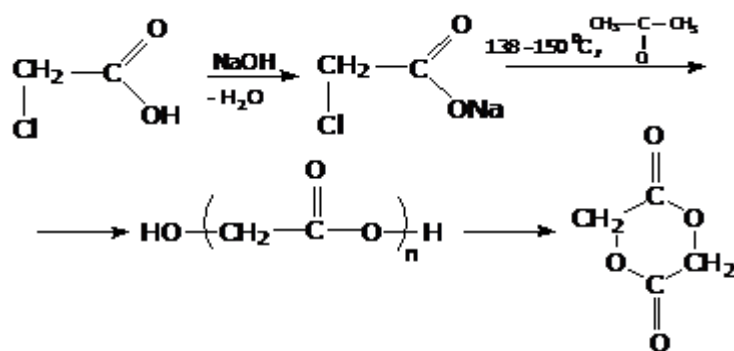
2.2.2 Способы синтеза гликолида

Для получения гликолида существует несколько способов, но наиболее актуальными являются следующие:

– из гликолевой кислоты: поликонденсация гликолевой кислоты, получение олигомера и его деполимеризация



– из монохлоруксусной кислоты



В промышленных условиях гликолид получают в основном из гликолевой кислоты [28]. Способ получения гликолида включает в себя стадию олигомеризации гликолевой кислоты с последующей деполимеризацией полученных олигомеров и отгонкой продуктов.

Очистку полученного гликолида-сырца от олигомеров, гликолевой кислоты и других примесей проводят путем перекристаллизации из этилацетата и промывкой этим же растворителем.

Возможно получение гликолида из монохлоруксусной кислоты. Описывается следующий способ получения: натриевая соль хлоруксусной кислоты загружается в реактор, нагретый до температуры 523 К. По мере оплавления соли включается вакуум-насос и в вакууме происходит перегонка образовавшегося гликолида. Выход гликолида-сырца составляет 75 %. Разложение натриевой соли хлоруксусной кислоты в присутствии трехоксида сурьмы происходит более целенаправленно. В этом случае гликолид-сырец получается более чистым, в результате чего выход чистого гликолида на 10 % выше, чем в отсутствие трехоксида сурьмы [29].

Недостатком описанного метода является большое количество примесей, содержащих хлор и олигомеры гликолевой кислоты, что приводит к большим потерям при доведении гликолида до товарной чистоты методом двойной перекристаллизации в этилацетате. В результате чего, выход чистого гликолида снижается до 40-45 %.

В [30] описан также другой способ получения: с целью интенсификации процесса монохлоруксусную кислоту нейтрализуют

щелочью (NaOH или KOH) с получением соли, затем соль нагревают до 138 – 150 °С с одновременной отгонкой воды, добавляют органический растворитель и отфильтровывают NaCl или KCl; органический растворитель и воду отгоняют при высокой температуре и пониженном давлении, отделяют олигоэфир, который затем деполимеризуют в роторном испарителе с получением гликолида.

Недостатком указанного метода является наличие в получаемом гликолиде-сырце большого количества загрязняющих компонентов, что требует дополнительных стадий очистки для дальнейшего получения гликолида, применяемого в синтезе полимеров медицинского назначения.

Кроме того, гликолид может быть получен в одну стадию из соли щелочного металла монохлоруксусной кислоты путем нагревания слоя реакционной массы толщиной до 6 см без добавления катализатора и перемешивания и отгонкой гликолида в вакууме. При этом отгон осуществляют при температуре реакционной смеси 180-270 °С, пары гликолида конденсируют в вакуумной линии при температуре 90-120 °С и собирают конденсат в вакуумном приемнике при температуре 40-50 °С. В результате получают целевой продукт, который перекристаллизовывают в малополярном растворителе, например этилацетате. Выход гликолида составляет до 85 %, чистота продукта 99,5-99,9 %. Достоинствами данного метода являются значительное упрощение процесса синтеза, высокий выход и чистота целевого продукта [31].

Несмотря на то, что разработан уже ряд методик получения гликолида, до сих пор практически отсутствуют исследования самого механизма образования циклического диэфира гликолевой кислоты. Встречающиеся в патентах и публикациях представления о механизмах превращения олигомеров оксикарбоновых кислот в соответствующие циклические диэфиры не подтверждены экспериментальными доказательствами.

Механизм циклизации олигомера гликолевой кислоты в гликолид практически не описан [32].

В работе [33], например, предложен механизм получения лактида из олигомеров молочной кислоты в присутствии октоата олова. Авторы рассматривают процесс циклизации как внутримолекулярную переэтерификацию, протекающую по механизму нуклеофильной атаки углерода карбонильной группы, имеющего частичный положительный заряд, атомом кислорода концевой гидроксильной группы той же молекулы олигомера (рисунок 6).

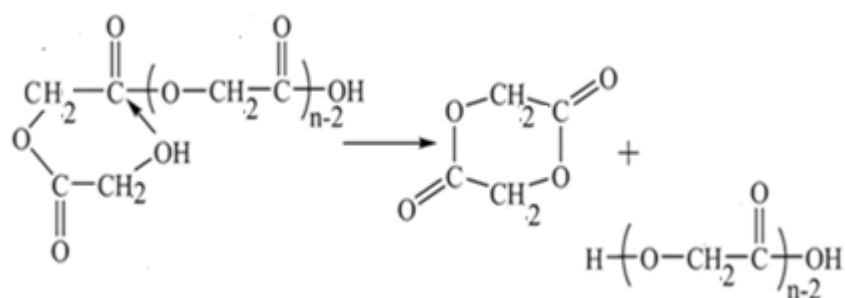


Рисунок 6 – Внутримолекулярный механизм образования циклического диэфира молочной кислоты

Также рассматривается возможность образования эфира гликолевой кислоты (гликолида) по межмолекулярному механизму, который представлен на рисунке 7 [32].

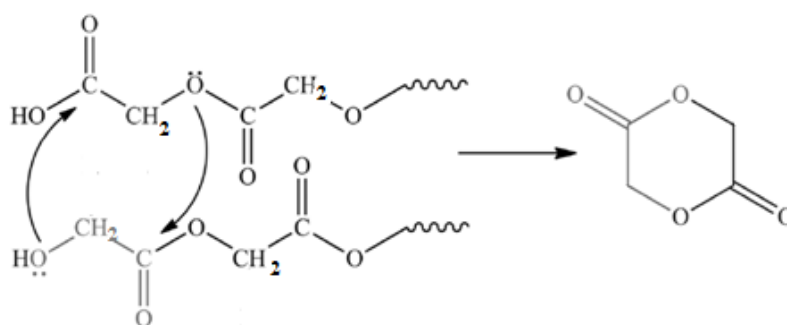


Рисунок 7 – Гомоциклизация олигомера гликолевой кислоты по межмолекулярному механизму

2.3 Методика синтеза гликолида

Аппаратура и посуда: круглодонная колба; штатив; колба-приемник; термометр; весы; вакуумный насос; воздушный холодильник; насадка Вюрца; аллонж.

Подготовительным и необходимым этапом синтеза гликолида является высушивание соли NaMXУК в вакуумном сушильном шкафу при температуре 120-145 °С в течение 24 часов.

Процесс получения гликолида из соли NaMXУК проводится на стандартной установке для перегонки под вакуумом (30...10 mbar), представленной на рисунке 8. Температура процесса варьируется в интервале от 260...300 °С. После образования пека в загрузочной колбе процесс деполимеризации прекращается, а полученный при этом гликолид-сырец подвергается очистке методом перекристаллизации.



Рисунок 8 – Установка для синтеза гликолида: 1 – трехгорлая колба, 2 – подушка с азотом, 3 – термометр, 4 – насадка Вюрца, 5 – прямой холодильник, 6 – колба-приемник, 7 – ловушка, 8 – вакуумный насос

2.4 Методика очистки гликолида

Для очистки гликолида-сырца используется метод перекристаллизации из растворителя. Перекристаллизация проводится на стандартной установке, состоящей из круглодонной колбы и колбонагревателя. Нагрев массы осуществляется до полного растворения гликолида-сырца в течение 10 минут, после этого раствор охлаждается до выпадения кристаллов гликолида. Перекристаллизация проводится три раза. Для фильтрации используется фильтровальная бумага и лабораторная установка для фильтрации в вакууме, включая колбу Бунзена, воронку Бюхнера и вакуумный насос. После фильтрации кристаллы гликолида промываются остатками растворителя и высушиваются. Контроль степени чистоты полученного гликолида осуществляется по его температуре плавления ($T_{пл}$). Для определения $T_{пл}$ используется прибор Melting Point M-560 (рисунок 9).



Рисунок 9 – Прибор Melting Point M-560 для определения температуры плавления

Также $T_{пл}$ гликолида определялась с помощью металлического блока, изготовленного из материала, обладающего высокой теплопроводностью и не взаимодействующего с испытуемым веществом, например, из латуни. Верхняя поверхность блока должна быть плоской и тщательно отполированной. Внутри цилиндрического блока помещается термометр, для фиксирования температуры плавления вещества. На блок помещается

небольшое количество исследуемого образца и нагревается, до момента, когда вещество не начнет плавиться. Температура плавления фиксируется.

2.5 Методы анализа

Инфракрасная спектроскопия

Инфракрасная спектроскопия (ИК-спектроскопия) является одним из основных методов анализа органических соединений. Современная ИК-спектроскопия представляет собой экспресс-метод установления структурных особенностей органических соединений [42]. Этот метод основан на взаимодействии молекул вещества с электромагнитным излучением в ИК-области спектра.

Инфракрасные спектры возникают в результате колебательного (отчасти вращательного) движения молекул, а именно – в результате переходов между колебательными энергетическими состояниями или, в классической интерпретации, с колебаниями атомных ядер относительно равновесных положений. Колебания подразделяются на валентные (когда в ходе колебания изменяются расстояния между атомами) и деформационные (когда в ходе колебания изменяются углы между связями). Переходы между различными колебательными состояниями в молекулах квантованы, благодаря чему поглощение в ИК-области имеет форму спектра, где каждому колебанию соответствует своя определенная длина волны. Для каждой функциональной группы (C=O, O-H, CH₂ и др.) характерны колебания определенной длины волны, точнее говоря даже для каждой группы характерен ряд колебаний (соответственно и полос в ИК-спектре). Именно на этих свойствах ИК-спектров основана идентификация соединений по спектральным данным.

ИК-спектр является тонкой характеристикой вещества и служит критерием для установления идентичности или неидентичности двух

соединений, поскольку каждое соединение имеет присущий только ему набор полос поглощения. Используя данные о характеристичности в совокупности с данными элементного анализа и другими химическими данными, можно определить структуру соединения.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Предпроектный анализ

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Огромный интерес исследователей в настоящее время сконцентрирован на разработке биоразлагаемых полимеров, особенностью которых является способность разрушаться под действием естественных природных (микробиологических и биохимических) процессов. Объектом исследования в данной работе является гликолид, а в частности, процесс его синтеза из NaMXUK.

Основными областями применения гликолида являются медицина (рассасывающиеся хирургические шовные материалы, матриксы, эндопротезы) и фармакология (в качестве оболочки для пролонгированных лекарственных средств).

Цель раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» – определение перспективности и успешности научно-исследовательского проекта, разработка механизма управления и сопровождения конкретных проектных решений на этапе реализации.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

В качестве конкурентных разработок выбраны две альтернативные технологии синтеза гликолида. Оценочная карта исследуемых разработок приведена в таблице 13.

Таблица 13 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы		
		из гликолевой кислоты	из NaMXUK +ацетон	исследуемая разработка
Свойства гликолида				
1. Степень чистоты	0,2	3	4	5
2. Выход гликолида	0,3	4	3	4
3. Длительность	0,1	4	4	4
Экономические критерии оценки эффективности				
1. Уровень проникновения на рынок	0,1	1	1	1
2. Финансирование научной разработки	0,1	3	3	5
3. Стоимость	0,2	5	4	4
Итого	1	20	19	23

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i,$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента; B_i – вес показателя (в долях единицы); B_i – балл i -го показателя. Результаты вычислений показали, что $K_{\text{из кислоты}} = 3,6$, $K_{\text{с ацетоном}} = 3,3$, а $K_{\text{разработка}} = 4$.

4.1.3 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.

Область применения диаграммы:

- Выявление причин возникновения проблемы;
- Анализ и структурирование процессов на предприятии;

- Оценка причинно-следственных связей.

Диаграмма Исикавы для данного проекта на рисунке 13.

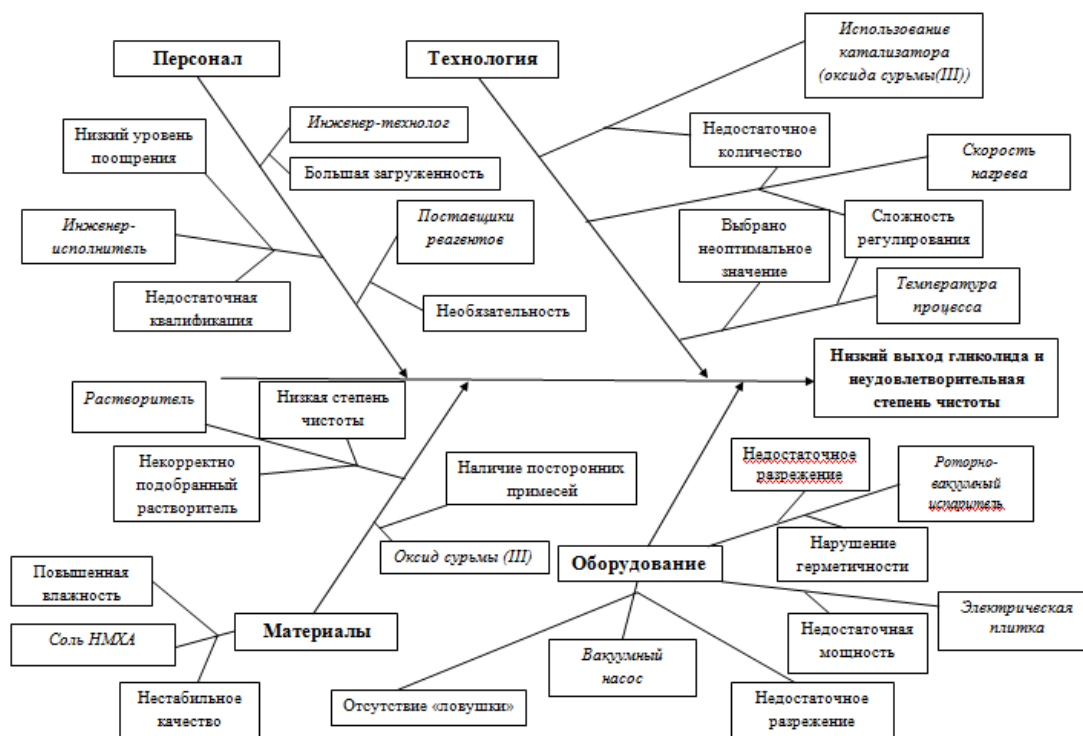


Рисунок 13 – Диаграмма Исикавы

4.1.4 SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта (таблица 14).

Таблица 14 – Матрица SWOT

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>C1 Экологичность технологии</p> <p>C2 Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями</p> <p>C3 Наличие потенциальных потребителей данного продукта</p> <p>C4 Экологичность технологии</p> <p>C5 Наличие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1 Сложность получения в больших объемах</p> <p>Сл2 Отсутствие запатентованных современных технологий</p>
<p>Возможности:</p> <p>B1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>B2. Использование инфраструктуры ОЭЗ ТВТ Томск</p> <p>B3. Проявление спроса на данный продукт</p>	<p><i>Гликолид безусловно является востребованным продуктом как в медицине, так и в фармакологии благодаря его высокой гидрофильности, что позволяет использовать его в качестве основы для получения биodeградируемых полимеров. Необходимо заинтересовать инвесторов, чтобы данная разработка нашла свое практическое применение</i></p>	<p><i>Несмотря на достоинства разработки и на наличие возможностей ее реализации, она не развита на рынке из-за отсутствия промышленных установок на территории России. Соответственно, из-за незаинтересованности потенциальных потребителей отсутствует необходимое финансирование.</i></p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1 Отсутствие спроса на новые технологии производства</p> <p>У2 Ограничение на экспорт технологии</p> <p>У3 Введения дополнительных государственных требований к сертификации продукции</p> <p>У4 Создание конкурентами более привлекательных предложений</p>	<p><i>Производство гликолида слабо развито на территории России, высокая конкуренция на мировом рынке препятствует продвижению отечественного продукта.</i></p>	<p><i>Отсутствие финансирования и незаинтересованность потенциальных потребителей в научной разработке является проблемой для дальнейшего ее развития. Следует выработать маркетинговую стратегию в области продвижения российского гликолида на рынок.</i></p>

4.1.5 Оценка готовности проекта к коммерциализации

В таблице 15 приведены данные оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации, по результатам которой можно сделать вывод об объемах инвестирования в текущую разработку и направления ее дальнейшего улучшения, об уровне компетенций недостающих разработчику и возможности привлечения требуемых специалистов в команду проекта.

Таблица 15 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
Определен имеющийся научно-технический задел	5	5
Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	4	4
Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	5
Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	5
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	3	3
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	2
Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	1	1
Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	1	1
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	3
Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	2	2
Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	1	1
Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	1	1

Продолжение таблицы 15

Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	2	2
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	2	2
Проработан механизм реализации научного проекта	2	2
ИТОГО	39	39

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

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i ,$$

где $B_{\text{сум}}$ – суммарное количество баллов по каждому направлению; B_i – балл по i -му показателю.

По итогам степени готовности научного проекта к коммерциализации $B_{\text{сум}} = 39$. Перспективность данной научной разработки можно считать средней. Для повышения степени эффективности проекта необходимо провести маркетинговые исследования, сформировать соответствующий бизнес-план, проработать вопрос финансирования данной разработки, а также оценить возможность использования услуг инфраструктуры для поддержки проекта.

4.1.6 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

В качестве методов коммерциализации рассматриваемой разработки были выбраны инжиниринг и торговля патентными лицензиями. В рамках осуществления первого метода заказчику будут предоставлены на основе договора инжиниринга все услуги, связанные с разработкой новых технологических процессов на предприятии заказчика или усовершенствованием уже имеющихся производственных процессов для производства разработанного композиционного материала и дальнейшего его

сбыта. Также возможно осуществлять торговлю патентной лицензией на данную разработку, т.е. передавать третьим лицам право на использование данного объекта интеллектуальной собственности на лицензионной основе.

4.2 Инициация проекта

4.2.1 Цели и результат проекта

В таблицах 16 и 17 ниже представлены данные о заинтересованных сторонах проекта и их ожиданиях после окончания его разработки, а также иерархии целей и критериях их достижения.

Таблица 16 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Научно-исследовательские медицинские институты	Разработка технологии получения гликолида из NaMXУК с высоким выходом продукта и удовлетворительной чистотой.
Центры фармакологии и биотехнологии	Разработка технологии получения гликолида из NaMXУК с высокой степенью чистоты и приемлемой ценой.

Таблица 17 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Исследовать процесс получения гликолида из NaMXУК при различных технологических параметрах с целью повышения выхода гликолида
Ожидаемые результаты проекта:	Использование гликолида в качестве заменителей костного трансплантата, как материал для хирургических сеток, нитей, мембран при регенерации костной ткани в стоматологии, оболочек для лекарственных препаратов пролонгированного действия
Критерии приемки результата проекта:	1. Соответствие стандарту 2. Практическое подтверждение теоретическим основам
Требования к результату проекта:	Требования:
	Достижение высокого значения выхода продукта Высокая степень чистоты гликолида Выявление оптимальных технологических параметров осуществления синтеза Использование в практической деятельности

4.2.2 Организационная структура проекта

Все данные о структуре рабочей группы проекта представлены в таблице 18, а также определены функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте.

Таблица 18 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо-затраты час.
1	Новиков В.Т. Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634004, Томск, пр. Ленина, 43; к.х.н., доцент ИШ ХБМТ	Руководитель магистерской диссертации	Отвечает за реализацию проекта в пределах заданных ограничений по ресурсам, координирует деятельность участников проекта.	50
2	Фролов В.С. Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634004, Томск, пр. Ленина, 43; Студент 2-го курса магистратуры ОХИ ИШПР	Магистрант	Выполнение магистерской работы	650
3	Лукьянов А.Е. Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634004, Томск, пр. Ленина, 43; аспирант ИШ ХБМТ ТПУ	Аспирант	Координирует работу магистранта, контролирует процесс синтеза, консультирует по вопросам реализации данной работы	540

Продолжение таблицы 18

4	Креницына З. В. Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634004, Томск, пр. Ленина, 43; к.т.н., доцент ОСГН ШБИП	Консультант	Консультация по разделу «Ресурсоэффективность и финансовый менеджмент»	2
5	Король И.С. Национальный исследовательский Томский политехнический университет, 634004, Томск, пр. Ленина, 43; к.х.н., доцент ОКД ИШНКБ	Консультант	Консультация по разделу «Социальная ответственность»	2

4.2.3 Ограничения и допущения проекта

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить причиной ограничения степени свободы участников команды проекта. Все допущения для разработки данного композита представлены в таблице 19.

Таблица 19 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/ допущения
3.1. Бюджет проекта	Отсутствует
3.1.1. Источник финансирования	Отсутствует
3.2. Сроки проекта:	
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	15.09.2016
3.2.2. Дата завершения проекта	01.06.2018

4.3 Планирование управления научно-техническим проектом

4.3.1. Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. Для данного проекта ИСР представлена на рисунке 14.

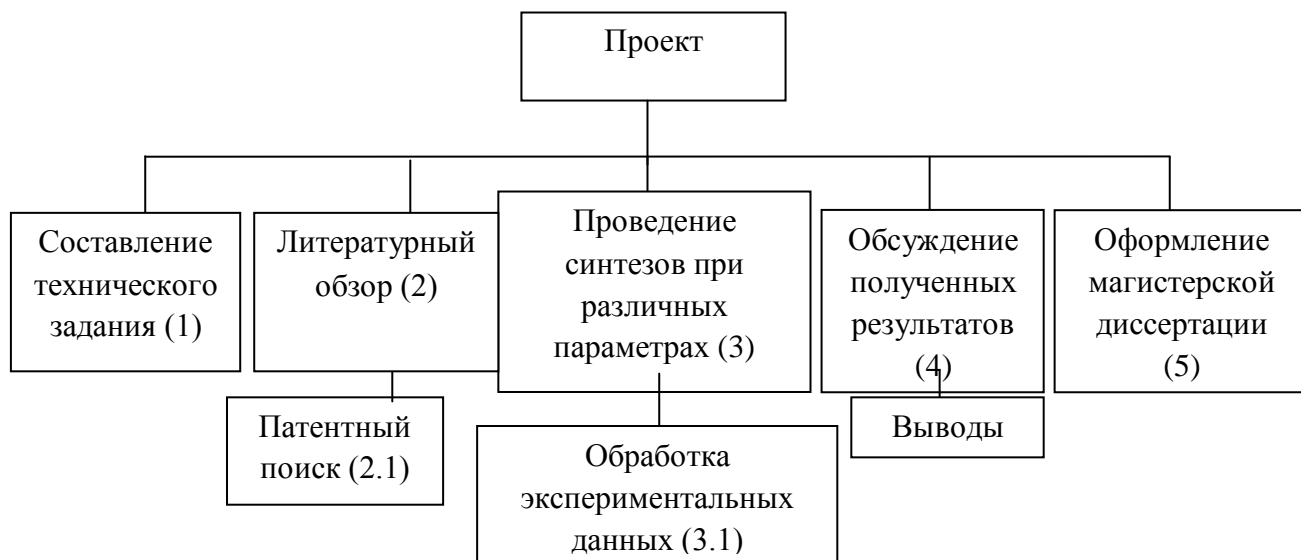


Рисунок 14 – Иерархическая структура работ по проекту

4.3.2 Контрольные события проекта

В данном разделе в таблице 20 приведены ключевые события проекта, определены их даты и результаты, которые должны быть достигнуты.

Таблица 20 – Контрольные события проекта

№ п/п	Контрольное событие	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	Составление технического задания	20.01.2018	Бланк задания
2	Изучение литературы	01.02.2018	Статьи, публикации, патенты и т.д
3	Проведение синтезов	01.03.2018	Графики
4	Обработка экспериментальных данных	20.04.2018	Таблицы
5	Обсуждение полученных результатов	1.05.2018	Отчет по проделанной работе
6	Оформление диссертации	10.05.2018	Магистерская диссертация

4.3.3 План проекта

В таблице 21 представлен календарный план рассматриваемого проекта.

Таблица 21 – Календарный план проекта








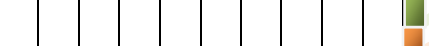
Код работы (из ИСР)	Название	Длит-ть, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников (ФИО ответственных исполнителей)
1.	Составление технического задания	11	20.01.2018	31.01.2018	Новиков В.Т.
2.	Литературный обзор	98	01.02.2018	10.05.2018	Фролов В.С.
2.1	Патентный поиск	78	01.02.2018	20.04.2018	Фролов В.С.
3	Проведение синтезов	50	01.03.2018	20.04.2018	Фролов В.С.
3.1	Обработка экспериментальных данных	10	20.04.2018	30.04.2018	Фролов В.С., Лукьянов А.Е.
4.	Обсуждение полученных результатов	5	1.05.2018	06.05.2018	Фролов В.С., Лукьянов А.Е., Новиков В.Т.
4.1	Выводы	3	06.05.2018	09.05.2018	Фролов В.С., Лукьянов А.Е., Новиков В.Т.
5	Оформление магистерской диссертации	27	10.05.2018	06.06.2014	Фролов В.С.
Итого:		138			

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

Календарный план-график проведения НИР по теме: «Синтез гликолида из NaMXUK» представлен в таблице 22.

-  Руководитель
-  Магистрант
-  Аспирант

Таблица 22 – Календарный план-график выполнения проекта

Код работ ы (из ИСР)	Вид работ	Исполнители	Т _к , кал, дн.	Продолжительность выполнения работ																	
				январь 2018			февраль 2018			март 2018			апрель 2018			май 2018			июнь 2018		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1		
1.	Составление технического задания	Руководитель	11																		
2.	Изучение литературы	Магистрант	98																		
2.1	Патентный поиск	Магистрант	78																		
3	Проведение синтезов	Магистрант, аспирант	50																		
3.1	Обработка экспериментал ьных данных	Аспирант, магистрант	10																		
4.	Обсуждение полученных результатов	Руководитель магистрант, аспирант	5																		
4.1	Выводы	Руководитель магистрант	3																		
5	Оформление диссертации	Магистрант	27																		

4.3.4 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения. В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группируются по статьям.

Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Расчет стоимости материальных затрат производился по действующим прейскурантам или договорным ценам. В стоимость материальных затрат включены транспортно-заготовительные расходы (4 % от цены). Результаты по данной статье представлены в таблице 23.

Таблица 23 – Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Кол-во	Цена за единицу, руб. с НДС	Сумма, руб.
NaMXУК	1 кг	98	98
Оксид сурьмы (III)	0,1 кг	750	75
Этилацетат	2 л	117	234
Этанол	2 л	240	480
Бутилацетат	2 л	99	198
Всего за материалы			1085
Транспортно-заготовительные расходы (4 %)			43,4
Итого по статье C_m			1128,4

Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включены все затраты, связанные с приобретением специального оборудования, необходимого для проведения работ по данному проекту. Результаты по данной статье представлены в таблице 24.

Таблица 24 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс.руб.
1.	Роторно-вакуумный испаритель «Heidolph»	1	121 400
2.	Вакуумный насос	1	75 840
3.	Термофен	1	51 350

Расчет амортизационных отчислений

Расчет проводим по методу равномерного прямолинейного списания - стоимость списывается равномерными долями в течение периода

$$AO_i = \frac{C_{\text{пер}} - C_{\text{ликв}}}{t}$$

где АО - годовые амортизационные отчисления, руб.; t - срок службы оборудования, год.; $C_{\text{пер}}$ - первоначальная стоимость оборудования, руб.; $C_{\text{ликв}}$ - ликвидационная стоимость оборудования, руб. ($C_{\text{ликв}} = 0,03 \cdot C_{\text{пер}}$)

Амортизационные отчисления за весь период выполнения НИР вычисляются по формуле, представленной ниже, а результаты расчетов приведены в таблице 25

$$З_{АО} = \frac{АО \cdot T_{\text{кт}}}{T_{\text{кал}}}$$

где АО - амортизационные отчисления за 1 год, руб; $T_{\text{кт}}$ – количество часов непосредственного использования оборудования, ч; $T_{\text{кал}}$ - число часов в году ($T_{\text{кал}} = 365 \cdot 24 = 8760$ ч).

Таблица 25 – Расчет стоимости лабораторной установки и амортизационные отчисления

Наименование	Кол-во единиц оборудования	Цена за ед., руб.	Срок службы, лет	Время использования оборудования, ч	$З_{АО}$, руб
Роторно-вакуумный испаритель «Heidolph»	1	121 400	15	75	67,2
Вакуумный насос	1	75 840	10	48	40,3
Термофен	1	51 350	10	5	2,8

Основная заработная плата

$$C_{\text{зп}} = З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}$$

$$C_{зп} = 34\,189,9 + 3\,093,72 + 1\,854,22 = 39\,137,84 \text{ руб.}$$

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

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб}$$

$$Z_{осн}^{рук-ль} = 416,95 \cdot 82 = 34\,189,9 \text{ руб.}$$

$$Z_{осн}^{аспирант} = 35,56 \cdot 87 = 3\,093,72 \text{ руб.}$$

$$Z_{осн}^{магистр} = 22,34 \cdot 83 = 1\,854,22 \text{ руб.}$$

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года; F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 26).

Таблица 26 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистр	Аспирант
Календарное число дней	138	138	138
Количество нерабочих дней			
- выходные дни	40	40	40
- праздничные дни	6	6	6
Номинальный фонд рабочего времени	$138 - (40 + 6) = 92$	$138 - (40 + 6) = 92$	$138 - (40 + 6) = 92$
Потери рабочего времени			
- отпуск	-	-	-
- невыходы по болезни	10	8	5
Эффективный фонд рабочего времени	$92 - 10 = 82$	$92 - 8 = 83$	$92 - 5 = 87$

$$Z_{дн}^{аспирант} = 3\,094 / 87 = 35,56 \text{ руб.} \quad Z_{дн}^{рук-ль} = 34\,190 / 82 = 416,95 \text{ руб.}$$

$$Z_{\text{дн}}^{\text{магистр}} = 1\,854 / 83 = 22,34 \text{ руб.}$$

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{б}} \cdot (k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}$$

$$Z_{\text{м}}^{\text{рук-ль}} = 26\,300 \cdot (0,5 + 0,5) \cdot 1,3 = 34\,190 \text{ руб.}$$

где $Z_{\text{б}}$ – базовый оклад, руб.; $k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент, (определяется Положением об оплате труда); $k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок; $k_{\text{р}}$ – районный коэффициент (для Томска равен 1,3). В таблице 27 представлен расчет основной заработной платы как для руководителей, так и для магистранта.

Таблица 27 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_{\text{б}}$, руб.	$k_{\text{пр}}$	$k_{\text{р}}$	$Z_{\text{м}}$, руб.	$Z_{\text{дн}}$, руб.	$T_{\text{р}}$, раб. дн.	$Z_{\text{осн}}$, руб.
Руководитель	26 300	0,5	1,3	34 190	416,95	82	34 189,9
Аспирант	3 094				35,56	87	3 093,72
Магистрант	1 854				22,34	83	1 854,22

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

В данную статью включается сумма выплат, предусмотренных законодательством о труде, например, оплата очередных и дополнительных отпусков; оплата времени, связанного с выполнением государственных и общественных обязанностей; выплата вознаграждения за выслугу лет и т.п. (в среднем – 10-15 % от суммы основной заработной платы).

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}}$$

$$Z_{\text{доп}}^{\text{рук-ль}} = 0,1 \cdot 34\,189,9 = 3\,418,99 \text{ руб.}$$

где $Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, руб.;

$k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты;

$Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, руб.

В таблице 28 приведены результаты расчета дополнительной заработной платы работников, непосредственно участвующих в выполнении темы.

Таблица 28 – Заработная плата исполнителей НИИ

Заработная плата	Руководитель	Аспирант	Магистрант
Основная зарплата	34 189,9	3 093,72	1 854,22
Дополнительная зарплата	3 418,99	-	-
Итого по статье $C_{зп}$	37 608,89		

Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

$$C_{внеб} = k_{внеб} \cdot (З_{осн} + З_{доп})$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.), равный 27,1% (таблица 29).

Таблица 29 – Отчисления на социальные нужды

	Руководитель	Аспирант	Магистрант
Заработная плата	37 608,89	3 093,72	1 854,22
ЕСН	10 192	-	-

Накладные расходы

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

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

$$C_{накл}^{рук-ль} = 0,8 * 37 608,89 = 30 087,11 \text{ руб.}$$

В таблице 30 представлена группировка по всем статьям бюджета проекта, описанным выше.

Таблица 30 – Группировка затрат по статьям

Сырье, материалы	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Отчисления на соц. нужды	Накладные расходы	Амортизационные отчисления	Итого плановая себестоимость
1 128,4	34 189,9	3 418,99	10 192	30 087,11	67,2	
	3 093,72				40,3	
	1 854,22				2,8	
						80980,92

4.3.5 Организационная структура проекта

Выделяется несколько базовых вариантов организационных структур: функциональная, проектная, матричная. По совокупности признаков, характерных для разных организационных структур, для данного проекта оптимальной является проектная, которая представлена на рисунке 15.

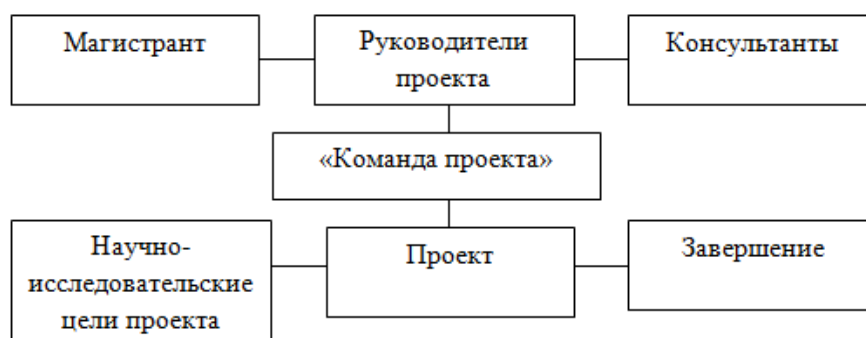


Рисунок 15 – Проектная организационная структура научного проекта

4.3.6 Матрица ответственности

Для распределения ответственности между участниками проекта была сформирована матрица ответственности, представленная в таблице 31. Степень участия в проекте характеризуется следующим образом:

- *ответственный* (O) – лицо, отвечающее за реализацию этапа проекта и контролирующее его ход;

- *исполнитель (И)* – лицо (лица), выполняющие работы в рамках этапа проекта;
- *утверждающее лицо (У)* – лицо, осуществляющее утверждение результатов этапа проекта (если этап предусматривает утверждение).

Таблица 31 – Матрица ответственности

Этапы проекта	Роль/должность	Роль/должность	Роль/должность
Составление технического задания	(У) / к.х.н., доцент ИШ ХБМТ		
Изучение литературы	(И) / магистрант		
Патентный поиск	(И) / магистрант		
Проведение эксперимента	(О) / аспирант ИШ ХБМТ	(И) / магистрант	
Обработка экспериментальных данных	(О) / аспирант ИШ ХБМТ	(И) / магистрант	
Обсуждение полученных результатов	(О) / к.х.н., доцент ИШ ХБМТ	(И) / магистрант	(О) / аспирант ИШ ХБМТ
Выводы	(У) / к.х.н., доцент ИШ ХБМТ	(И) / магистрант	(О) / аспирант ИШ ХБМТ
Оформление диссертации	(И) / магистрант		

4.3.7 План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями, представленный в таблице 32 отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта.

Таблица 32 – План управления коммуникациями

№ п/п	Какая информация передается	Кто передает информацию	Кому передается информация	Когда передает информацию
	Информация о текущем состоянии проекта	Исполнитель проекта	Руководителю магистерской диссертации, аспиранту	Еженедельно (пятница)
	Документы и информация по проекту	Исполнитель проекта	Руководителю магистерской диссертации	Еженедельно (любой рабочий день)
	Отчет о проделанной работе	Исполнитель проекта	Руководителю магистерской диссертации	Не позже сроков и контрольных точек

4.3.8 Реестр рисков проекта

В таблице 33 сведены все возможные риски проекта, которые могут вызвать нежелательные для проекта последствия.

Таблица 33 – Реестр рисков

Риск	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска*	Способы смягчения риска	Условия наступления
Отсутствие финансирования	5	4	Высокий	Заинтересовать инвесторов	Незаинтересованность в данной разработке
Ограничения внедрения на рынок	3	3	Средний	Провести маркетинговый анализ	Отсутствие рекламы
Существование прототипа научной разработки	4	3	Средний	Выявить сильные и слабые стороны конкурентов	Наличие альтернативных разработок
Низкие показатели качества гликолида и невысокий выход	3	4	Средний	Анализ патентной литературы, адекватная интерпретация данных.	Некачественное сырье, некорректный выбор параметров синтеза.

Из таблицы видно, что уровень риска проекта в целом средний, причиной этого является вероятность получения гликолида с высоким выходом и неудовлетворительной чистотой, в связи с чем, может пропасть интерес к разработке у инвесторов и снизиться финансирование.

4.3.9 План управления контрактами и поставками

В таблице 34 изложены основные требования, предъявляемые к поставщикам и подрядчикам.

Таблица 34 – Требования к объектам контрактов

№	Объект контракта (продукт/услуга)	Требования к продукту/услуге	Требования к срокам поставки	Требования к поставщику/подрядчику
1.	NaMXУК	Определенная влажность	По требованию	Своевременность поставки/оплаты
2.	Оксид сурьмы (III)	Отсутствие примесей, гранулометрический состав	По требованию	Своевременность поставки/оплаты
3.	Этилацетат Этанол Бутилацетат	Определенная массовая доля основного вещества	По требованию	Своевременность поставки/оплаты

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

Чтобы определить эффективность исследования, необходимо рассчитать интегральный показатель эффективности научного исследования. Для этого определяют две средневзвешенные величины: финансовую эффективность и ресурсоэффективность.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования (таблица 3). Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\phi}^p = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}}$$

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

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

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

В таблице 35 приведены данные затрат по статьям двух аналогов гликолида.

Таблица 35 – Группировка затрат по статьям аналогов разработки

Вариант аналога №	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	Основная заработная плата	Отчисления на социальные нужды	Итого плановая себестоимость
1	1 240	17 172	59 000	17 588	95 000
2	1 125	23 182	45 600	13 593	83 500

Найдем значения интегрального финансового показателя для всех вариантов исполнения научного исследования:

$$I_{\phi}^p = \frac{80\,980,92}{100\,000} = 0,81 \quad I_{\phi}^{a1} = \frac{95\,000}{100\,000} = 0,95$$

$$I_{\phi}^{a2} = \frac{83\,500}{100\,000} = 0,84$$

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное удешевление стоимости разработки в разы, то есть наша разработка обладает наименьшей стоимостью по сравнению с аналогами.

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования определяют следующим образом:

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

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

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности представлен в таблице 36.

Таблица 36 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Необходимость дополнительных операций (предварительной сушки соли NaMXУК)	0,3	5	4	4
2. Энергосбережение	0,25	4	3	4
3. Длительность процесса	0,25	5	4	4
4. Способствует росту производительности труда пользователя	0,2	4	5	4
ИТОГО	1	18	16	16

$$I_m^p = 5 * 0,3 + 4 * 0,25 + 5 * 0,25 + 4 * 0,2 = 4,55$$

$$I_m^{a1} = 4 * 0,3 + 3 * 0,25 + 4 * 0,25 + 5 * 0,2 = 3,95$$

$$I_m^{a2} = 4 * 0,3 + 4 * 0,25 + 4 * 0,25 + 4 * 0,2 = 4$$

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

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

$$I_{финр}^p = \frac{4,55}{0,81} = 5,62 \quad I_{финр}^{a1} = \frac{3,95}{0,95} = 4,16 \quad I_{финр}^{a2} = \frac{4}{0,84} = 4,76$$

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

Сравнительная эффективность проекта

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^a}$$

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

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{5,62}{4,16} = 1,35 \quad \mathcal{E}_{cp} = \frac{5,62}{4,76} = 1,18$$

В таблице 37 представлены все рассчитанные выше показатели эффективности.

Таблица 37 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,81	0,95	0,84
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,55	3,95	4
3	Интегральный показатель эффективности	5,62	4,16	4,76
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения		1,35	1,18

Вывод: Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволило определить, что существующий вариант решения поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является наиболее приемлемым.

Список публикаций

В.С. Фролов, А.Е. Лукьянов Синтез гликолида из соли хлорацетата натрия // Сборник научных трудов XIX Международной научно-практической конференции имени профессора Л.П. Кулева студентов и молодых ученых «Химия и химическая технология в XXI веке», Томск: Изд-во ТПУ, 21-24 мая 2018 г.

