

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

Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки: Химическая технология 18.03.01
Отделение химической инженерии

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Особенности определения 2,6-диметоксифенола в объектах биологического происхождения

УДК 547.568.5:543

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д4Б	Самочернова Анастасия Петровна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Чернова Анна Павловна	Кандидат химических наук		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Татьяна Гавриловна	Кандидат экономических наук		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Король Ирина Степановна	Кандидат химических наук		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Михеева Е.В.	Кандидат химических наук		

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

Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки: Химическая технология 18.03.01
Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Михеева .Е.В.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

бакалаврской работы

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

Студенту:

Группа	ФИО
2Д4Б	Самочернова Анастасия Петровна

Тема работы:

Особенности определения 2,6-диметоксифенола в объектах биологического происхождения	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	№ 2258/с от 02.04.2018

Срок сдачи студентом выполненной работы:

01.06.2018

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	В качестве объекта исследования взять 2,6 – диметоксифенол, провести литературный обзор по тематике научно-исследовательской работы, в экспериментальной части описать использованное оборудование, предоставить методики проведения экспериментов, проанализировать полученные результаты, сделать выводы.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	Провести литературный обзор по тематике научно-исследовательской работы, в аналитической части описать использованное оборудование, представить методики проведения экспериментов; проанализировать полученные результаты, сделать заключение по работе.
Перечень графического материала	Графическое представление полученных результатов.

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Рыжакина Татьяна Гавриловна
Социальная ответственность	Король Ирина Степановна

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	18.09.2017
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Чернова Анна Павловна	Кандидат химических наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д4Б	Самочернова Анастасия Петровна		

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

Инженерная школа природных ресурсов

Направление подготовки: Химическая технология 18.03.01

Уровень образования бакалавриат

Отделение химической инженерии

Период выполнения _____ (осенний / весенний семестр 2017/2018 учебного года)

Форма представления работы:

Бакалаврская работа <small>(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)</small>
--

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	01.06.2018 г.
--	---------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
20.03.2018г.	<i>Литературный обзор по теме</i>	20
14.04.2018г.	<i>Методики эксперимента</i>	10
16.04.2018г.	<i>Социальная ответственность</i>	10
20.05.2018г.	<i>Обсуждение результатов</i>	50
25.05.2018г.	<i>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</i>	10

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Чернова А.П.	Кандидат химических наук		

Согласовано:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Михеева Е.В.	Кандидат химических наук		

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

Студенту:

Группа	ФИО
2Д4Б	Самочернова Анастасия Петровна

Школа	ИШПР	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Химическая технология

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Приблизительный бюджет научного исследования, в том числе научно-технического оборудования, составляет около 318 554 тыс. руб.</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>В соответствии с ГОСТ 14.322-83 «Нормирование расхода материалов» и ГОСТ Р 51541-99 «Энергосбережение. Энергетическая эффективность»</i>
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>Налоги рассчитать по упрощенной системе налогообложения (30% от выручки), ставку дисконтирования принять равной 0,1</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	<i>Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения, оценка готовности проекта к коммерциализации. Определение целевого рынка и проведение его сегментирования. Выполнение SWOT-анализа проекта</i>
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	<i>Разработка плана проекта (календарный план НИ), бюджета проекта исследования (планируемые затраты на выполнения НИ), организационной структуры проекта (выбор организационной структуры научного проекта)</i>
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	<i>Особенности определения 2,6-диметоксифенола в объектах биологического происхождения</i>

Перечень графического материала:

<ol style="list-style-type: none"> 1. Оценка конкурентоспособности технических решений 2. Матрица SWOT 3. График проведения и бюджет НИ 4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ
--

5. Сравнительная эффективность разработки

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Рыжакина Т. Г.	Кандидат экономических наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д4Б	Самочернова Анастасия Петровна		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа	ФИО
2Д4Б	Самочернова Анастасия Петровна

Школа	ИШПР	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	Химическая технология

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения</p>	<p>Объект исследования – 2,6 – диметоксифенол. Прибор – ИК-спектрофотометр Agilent 660, УФ-спектрофотометр Cary 60. Методика – определения 2,6-диметоксифенола в объектах биологического происхождения методом ИК-спектроскопии, УФ-спектрофотометрии, ТСХ. Рабочая зона – научно-исследовательская лаборатория 2 корпуса ТПУ. Область применения – пищевая и фармацевтическая промышленность, лаборатории судебной и судебно-медицинской экспертизы.</p>
---	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Производственная безопасность 1.1. Анализ выявленных вредных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности: 1.2. Анализ выявленных опасных факторов при разработке и эксплуатации проектируемого решения в следующей последовательности:</p>	<p>1.1. Анализ вредных и опасных факторов, которые может создать объект исследования. 1.2. Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований. 1.3. Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов.</p>
<p>2. Экологическая безопасность:</p>	<p>2.1. Анализ влияния объекта исследования на окружающую среду. 2.2. Анализ влияния процесса исследования на окружающую среду. 2.3. Обоснование мероприятий по защите окружающей среды.</p>
<p>3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p>	<p>3.1. Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований. 3.2. Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований. 3.3. Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.</p>
<p>4. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p>	<p>4.1. Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового</p>

	законодательства. 4.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.
--	--

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

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Король Ирина Степановна	Кандидат химических наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2Д4Б	Самоченова Анастасия Петровна		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ООП

Код результата	Результат обучения
<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 новые технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование химической технологии, проектировать объекты химической технологии в контексте предприятия, общества и окружающей среды
P5	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в области современных химических технологий
P6	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современное высокотехнологичное оборудование, обеспечивать его высокую эффективность, выводить на рынок новые материалы, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на химико-технологическом производстве, выполнять требования по защите окружающей среды
<i>Универсальные 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	Активно владеть иностранным языком на уровне, позволяющем разрабатывать документацию, презентовать результаты профессиональной деятельности
P10	Эффективно работать индивидуально и в коллективе, демонстрировать лидерство в инженерной деятельности и инженерном предпринимательстве, ответственность за результаты работы и готовность следовать корпоративной культуре организации

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа состоит из 109 с., 11 рисунков, 40 таблиц, 51 источника, 4 приложения.

Ключевые слова: 2,6-диметоксифенол, сирингол, фенольные производные, УФ-спектрофотометрия, тонкослойная хроматография.

Объектом исследования является 2,6-диметоксифенол.

Цель работы - исследовать распределение 2,6-диметоксифенола в печени теплокровных животных.

В результате исследования провели идентификацию 2,6-диметоксифенола методом ИК-спектроскопии, подтвердили подлинность структурного строения исследуемого образца. Определили оптимальные растворители для идентификации 2,6 – диметоксифенола методом УФ-спектрофотометрии. Рассчитали уравнение калибровочного графика для определения 2,6-диметоксифенола спектрофотометрическим методом. Разработали методику количественного определения 2,6 – диметоксифенола спектрофотометрическим методом. Изучили хроматографическое поведение 2,6 – диметоксифенола в тонком слое сорбента с использованием различных подвижных фаз и установили оптимальную подвижную фазу. Исследовали кинетику распределения 2,6-диметоксифенола в говяжьей печени.

Степень внедрения:

1. Чернова (Асташкина) А. П. , Самочернова А. П. , Шорманов В. К. , Цацуа Е. П. Спектрофотометрическое определение 2,6-диметоксигидроксибензола в субстанции и биологическом материале // Научные исследования в области медицины и фармакологии: сборник научных трудов по итогам Международной научно-практической конференции, Саратов, 25 Апреля 2017. - Саратов: СГУ, 2017 - С. 58-61.
2. Самочернова А. П. , Чернова (Асташкина) А. П. , Шорманов В. К. Идентификация 2,6-диметоксигидроксибензола методом УФ-спектрофотометрии // Современные проблемы химической науки и фармации: сборник материалов VI Всероссийской конференции с

международным участием, Чебоксары, 23-24 Ноября 2017. - Чебоксары: ЧГУ, 2017 - С. 104-106.

3. Самочернова А. П. , Чернова (Асташкина) А. П. Идентификация 2,6-диметоксигидроксибензола методом УФ-спектрофотометрии // Химия и химическая технология в XXI веке имени профессора Кулева: сборник материалов конференции с международным участием, Томск, 29-30 Мая 2017. - Томск: ТПУ, 2017.
4. Самочернова А. П. , Чернова (Асташкина) А. П. Изучение хроматографического поведения 2,6-диметоксифенола.// Химия и химическая технология в XXI веке имени профессора Кулева: сборник материалов конференции с международным участием, Томск, 21-23 Мая 2018. - Томск: ТПУ, 2018.

Область применения: лаборатории судебной экспертизы и судебно-медицинской экспертизы, пищевая промышленность, фармацевтические предприятия.

Оглавление

Глава 1. Литературный обзор.....	19
1.1 Название, физические свойства и применение 2,6-диметоксифенола.....	19
1.2 Получение 2,6-диметоксифенола.....	21
1.3 Биотрансформация метоксифенолов.....	23
1.4 Представители метоксифенолов , их токсичность, симптоматика отравлений.....	26
1.5 Известные методы изолирования из биоматериала и очистка извлечений.....	29
Глава 2. Материалы и методы исследования.....	34
2.1 Объект исследования, реактивы, приборы и материалы.....	34
2.2 Методика исследования 2,6-диметоксифенола методом ИК-спектроскопии.....	35
2.3 Методика исследования оптических свойств 2,6 – диметоксифенола в различных растворителях.....	36
2.3.1 Методика построения градуировочного графика.....	36
2.4 Методика исследования хроматографического поведения 2,6-диметоксифенола.....	38
2.5 Методика определения 2,6-диметоксифенола в биологическом материале.....	39
2.5.1 Методика сравнительного изолирования различными изолирующими агентами с целью поиска оптимального изолирующего агента.....	41
2.5.2 Методика изолирования двумя оптимальными изолирующими агентами с целью поиска оптимального времени настаивания.....	42
2.5.3 Методика изучения зависимости степени извлечения 2,6-диетоксифенола оптимальными изолирующими агентами из биологического материала от содержания в ней анализита.....	44
Глава 3. Обсуждение результатов.....	46
3.1 Идентификация 2,6 – диметоксифенола методом ИК-спектроскопии.....	46
3.2 Исследование оптических свойств 2,6 – диметоксифенола в различных растворителях.....	48
3.2.1 Построение градуировочного графика.....	49
3.2.1.1 Разработка методики количественного определения 2,6-диметоксифенола спектрофотометрическим методом.....	53
3.3 Исследование хроматографического поведения 2,6-диметоксифенола.....	54
3.4 Определения 2,6-диметоксифенола в биологическом материале.....	57
3.4.1 Методика сравнительного изолирования различными	

	изолирующими агентами с целью поиска оптимального изолирующего агента.....	58
3.4.2	Методика сравнительного изолирования различными изолирующими агентами с целью поиска оптимального времени настаивания.....	61
3.4.3	Методика сравнительного изолирования различными изолирующими агентами с целью поиска оптимального количества аналита.....	62
Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....		63
4.1	Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	63
4.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования.....	63
4.1.2	Анализ конкурентных технических решений.....	63
4.1.3	SWOT-анализ.....	64
4.2	Определение возможных альтернатив проведения научных исследований.....	67
4.3	Планирование научно-исследовательских работ.....	68
4.3.1	Структура работ в рамках научного исследования.....	68
4.3.2	Определение трудоемкости выполнения работ.....	69
4.3.3	Разработка графика проведения научного исследования.....	70
4.4	Бюджет научно-технического исследования (НТИ).....	74
4.4.1	Расчет материальных затрат НТИ.....	74
4.4.2	Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ.....	75
4.4.3	Расчет основной заработной платы.....	77
4.4.4	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления).....	79
4.4.5	Накладные расходы.....	80
4.4.6	Формирование бюджета затрат НТИ.....	80
4.5	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	81
Глава 5. Социальная ответственность.....		85
5.1	Производственная безопасность.....	86
5.1.1	Микроклимат.....	88
5.1.2	Освещенность.....	90
5.1.3	Уровень шума.....	91
5.1.4	Электробезопасность.....	92
5.2	Экологическая безопасность.....	92
5.3	Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	94
5.3.1	Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований.....	94
5.3.2	Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть в	

	лаборатории при проведении исследований.....	94
5.3.3	Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.....	94
5.4	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	95
	Заключение.....	97
	Список литературы.....	98
	ПРИЛОЖЕНИЕ А.....	104
	ПРИЛОЖЕНИЕ Б.....	106
	ПРИЛОЖЕНИЕ В.....	108
	ПРИЛОЖЕНИЕ Г.....	110

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время эфирные масла широко применяются в медицине, косметологии, ароматерапии пищевой промышленности и других областях [1-2]. Широкое применение эфирных масел обусловлено их составом и свойствами соединений входящих в их состав. Таким образом, согласно литературным данным [3], содержащиеся фенольные соединения (их более 10), с одной стороны обладают положительной биологической активностью, с другой стороны обладают заметной токсичностью, канцерогенными свойствами, что позволяет относить их к приоритетным загрязняющим веществам.

Среди фенольных соединений входящих в состав эфирных масел преобладают сирингол и ацетосирингол [4-5]. Данные соединения как в свободной, так и в связанной формах в значительных количествах встречаются в продуктах питания (многих ягодах, фруктах, овощах, кофе, чае, соках и винах), выполняют важные физиологические функции, а также обладают различными видами биологической активности.

Кроме того, сирингол является важным участником метаболизма высших растений, прекурсором в биосинтезе биополимера - лигнина, составляющего до 30 % биомассы растений. Как в природных условиях, так и в технологических процессах химической переработки растительного сырья, содержание сирингола может негативно сказаться на окружающей среде [6]. Попадая в больших количествах в поверхностные воды, нарушает процессы фотосинтеза и ухудшает общее санитарное состояние водоемов ввиду значительного снижения содержания растворенного кислорода [7].

В настоящее время известны случаи отравления людей сиринголом, в том числе с летальным исходом. Но не смотря на это вопросы химико-токсикологического анализа остаются недостаточно изученными. В связи с этим весьма актуальным является разработка способов определения фенольных соединений, в том числе и сирингола, в объектах окружающей среды.

Цель работы: исследовать распределение 2,6-диметоксифенола в печени теплокровных животных.

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

1. Провести идентификацию 2,6 – диметоксифенола методом ИК-спектроскопии.
2. Исследовать влияние различных растворителей на оптические свойства 2,6-диметоксифенола методом УФ-спектрофотометрии. Построить градуировочный график.
3. Исследовать хроматографическое поведение 2,6-диметоксифенола методом нормально фазной тонкослойной хроматографии.
4. Исследовать распределение 2,6-диметоксифенола в печени методом экстракции. Определить влияние времени экстракции и количества аналита на степень извлечения 2,6-диметоксифенола из печени.

Научная новизна

Определили оптические свойства 2,6 – диметоксифенола методом УФ-спектрофотометрии. Разработали методику количественного определения 2,6 – диметоксифенола спектрофотометрическим методом. Изучили хроматографическое поведение 2,6 – диметоксифенола в тонком слое нормальнофазного сорбента с использованием одно- и двухкомпонентных подвижных фаз и установили оптимальную подвижной фазу. Исследовали кинетику распределения 2,6-диметоксифенола в говяжьей печени.

Данная работы была выполнена совместно с Курским медицинским университетом кафедрой фармацевтической химии.

Практическая значимость

Разработанная методика спектрофотометрического определения 2,6-диметоксифенола может быть использована для количественного определения данного вещества в различных биологических объектах и

применяться в области судебно-медицинской экспертизы. Данные по распределению сирингола в говяжьей печени позволяют разработать методику извлечения из других биологических объектов.

Глава 1. Литературный обзор

1.1 Название, физические свойства и применение 2,6-диметоксифенола

Объектом исследования выпускной квалификационной работы являлось производное фенола - сирингол. Данное соединение, структурная формула которого представлена на рисунке 1.1, известно как: 2,6 – диметоксигидроксibenзол, 2,6 – диметоксифенол, пирагаллол 1,3-диметилового эфира (согласно номенклатуре ИЮПАК), сирингол (далее 2,6 - ДМОФ).

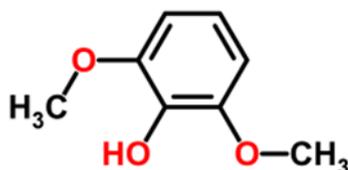


Рисунок 1.1.1 - Структурная формула 2,6 -ДМОФ

Основные свойства данного соединения представлены в таблице 1.1.1[8].

Таблица 1.1.1 Основные физико – химические свойства 2,6 – ДМОФ[8].

Физические свойства	
Тип вещества	Органическое
Внешний вид	Моноклинные кристаллы, твердое вещество от желтого до оранжевого цвета
Молекулярная масса	154,16 а.е.м.
Плотность	1,134 г/см ³
Показатель преломления	1,522
Химические свойства	
Растворимость в воде	2г/100мл (13°С)
Показатель диссоциации	pKa(1)=9,58 (25°С)
Термические свойства	
Температура кипения	261 °С

Температура плавления	50-56 °С
Температура вспышки	140 °С
Условия безопасности	
Температура хранения	Хранить в сухом, прохладном месте, в плотно закрытом контейнере.
Указания по безопасности	S26; S37/39*
	*S26 - В случае попадания в глаза немедленно промыть глаза большим количеством воды и обратиться за медицинской помощью *S37/39 - Надеть соответствующие перчатки и средства защиты глаз/лица
Указания по риску	R22; R36/37/38*
	*R22 - Опасно при проглатывании; *R36/37/38 - Раздражает глаза, органы дыхания и кожу

Сирингол является основным компонентом запаха дыма и отвечает за запах копченых на древесных углях шашлыков и барбекю. Используется в составах «копченое мясо без костра». Искусственные жидкие или твердые ароматизаторы дыма также содержат данное вещество, в среднем составляющее 13,73 % этих продуктов по массе [9]. Биотопливо, пиролизное масло, полученное из древесной биомассы, оптимизируют для получения в качестве побочного продукта – сирингола, который может потенциально заместить спрос на фенольные производные [10]. Например, сирингол может использоваться как замещающее сырье для фенолформальдегидной смолы, а так же широко используемого водостойкого клея для фанеры [11].

1.2 Получение 2,6-диметоксифенола

2,6-ДМОФ как в свободной, так и в связанной формах в значительных количествах встречаются в продуктах питания (многих ягодах, фруктах, овощах, кофе, чае, соках и винах), выполняют важные физиологические функции, а также обладают различными видами биологической активности. Лигнин представляет собой нерегулярный полимер (рисунок 1.2.1), имеющий сложное и точно не установленное строение, который является основным компонентом древесины. Макромолекулы лигнина представлены фенилпропановыми C₆-C₃ структурными единицами [12].

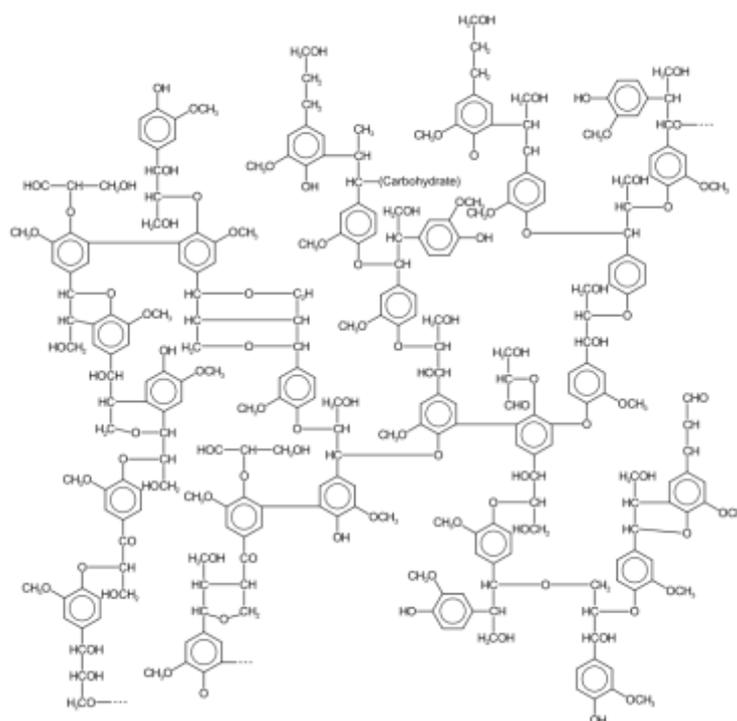


Рисунок 1.2.1 - Структурная формула лигнина

Содержание лигнина в древесных хвойных породах составляет - 23-38 %, в соломе злаков - 12-20 %, в лиственных породах - 14-25% от общей массы [13-15]. Таким образом, основным способом получения 2,6-ДМОФ является пиролиз лигнина.

Для исследования достаточно сложного химизма процесса пиролиза лигнина учеными Р. Брежны, Г. Э. Домбург, А. Н. Кислицыным и др. был изучен термораспад многочисленных соединений моделирующих как

строение структурных единиц лигнина, так и различные типы связей между ними. Полученные ими данные позволяют создать картину химических превращений лигнина при пиролизе.

Структурные единицы лигнина соединены несколькими типами углерод-углеродных и простых эфирных связей, определяющие характер его деструкции при пиролизе. В отличие от термораспада регулярно построенной макромолекулы целлюлозы, протекающего по деполимеризационному типу, макромолекула лигнина распадается по месту наиболее слабых связей. Механизм первичных реакций расщепления различных типов связей между структурными единицами неодинаков и осложняется к тому же одновременно идущими вторичными превращениями. Поэтому невозможно описать даже основные реакции, протекающие при термораспаде лигнина [16-17]. Можно лишь предположить пути, по которым идет деструкция макромолекулы, образование низкомолекулярных соединений и формирование структуры твердого остатка.

Основными продуктами пиролиза лигнина являются жидкий конденсат, твердый нелетучий углеродистый осадок и газы. В результате пиролиза происходит расслоение жидкого конденсата на нерастворимую смолу и водный слой. Состав смолы определяется ароматической природой лигнина. Основная часть идентифицированных в смоле веществ принадлежит к классу ароматических соединений, основными группами которых являются фенолы и их производные. Идентифицировано более 50 соединений, которые подразделяются на три следующие группы: одноатомные фенолы — фенол, о-, м-, п-крезолы, ксиленолы (диметилфенолы), триметилфенолы, этилфенол, пропилфенол и др.; двухатомные фенолы орторяда: пирокатехин (ортодоксибензол), монометилловый эфир пирокатехина (гваякол), диметилловый эфир пирагаллола, и, главным образом их производные, которым и является сирингол [18-19].

1.3 Биотрансформация метоксифенолов

Производные фенола представляют собой хорошо растворимые в воде твердые вещества. Высоко концентрированные растворы являются токсичными и вызывают химические ожоги, небольшие концентрации 0.2%-1,4 % напротив оказывают бактериостатическое, фунгицидное и бактерицидное действие и не являются токсичными. Отравление производными фенола возможно в результате попадания их на кожу, слизистые или вдыхании воздуха, содержащего данные соединения[20-21].

2,6 – диметоксифенол попав в организм подвергается процессу биотрансформации и выделяется в качестве метаболита. В основе биотрансформации лежит процесс ферментативного преобразования молекул. Биологический смысл данного процесса заключается в преобразовании метаболита в форму, удобную для выведения из организма. Метаболизм проходит в две фазы (рисунок 1.3.1) [22].

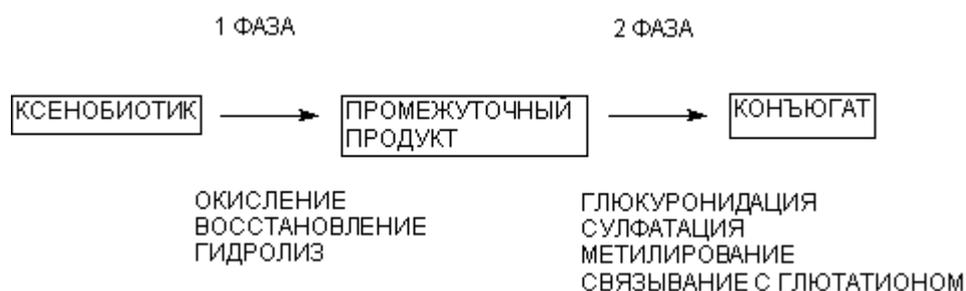


Рисунок 1.3.1 – Фазы метаболизма ксенобиотиков

В основе первой фазы лежит процесс гидролитического и окислительно-восстановительного превращения молекулы веществ. Молекула, обогащаясь полярными функциональными группами, становится реакционно – способной. Первая фаза метаболизма определяется как этап биотрансформации.

Во второй фазе происходит процесс в котором эндогенные молекулы конъюгируют с промежуточными продуктами метаболизма и образуют полярные соединения. В результате биопревращений во второй фазе

трудновыводимый липофильный ксенобиотик становится гидрофильным, это обеспечивает возможность его быстрой экскреции из организма[23-24].

Основным органом метаболизма в организме человека является печень, так как она содержит различные высокоактивные ферменты биотрансформации. Так же все вещества поступающие в желудочно – кишечный тракт проходят через печень и только после этого поступают в общий кровоток (рисунок 1.3.2). Высокая эффективность печеночной элиминации токсиканта на клеточном уровне обеспечивается за счет тонкой сети печеночных капилляров, большой площади контакта между кровью и поверхностью гепатоцитов, которая обеспечивается микроворсинками базальной поверхности печеночных клеток[25].

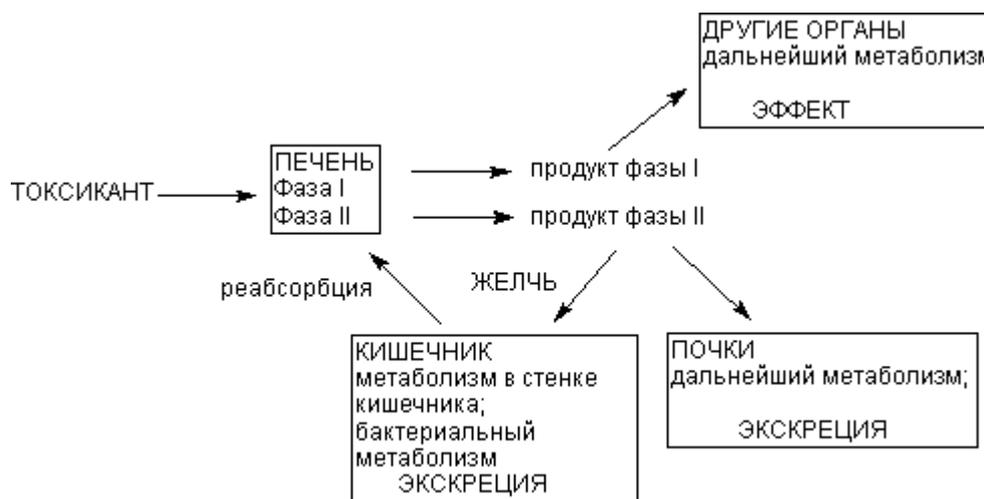


Рисунок 1.3.2. Локализация этапов метаболических превращений ксенобиотиков в организме

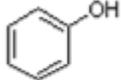
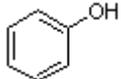
Продукты, образующиеся в процессе первой фазы метаболизма, поступают в общий кровоток и оказывают действие на отдельные органы и системы. Продукты второй фазы метаболизма также могут выбрасываться в кровь печенью, откуда могут захватываться легкими, почками, а так же повторно печенью для экскреции с желчью. С желчью ксенобиотики попадают в кишечник, частично ресорбируются и повторно поступают в печень (цикл печеночной рециркуляции)[26].

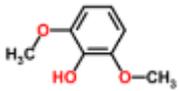
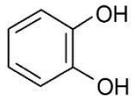
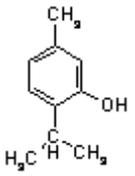
Печень играет ключевую роль в процессе метаболизма, но, не смотря на это другие органы, так же имеют не маловажное значение. Особую роль играют почки. Почки имеют специфическую систему захвата и катаболизма ксенобиотиков, образовавшихся в печени. Кроме этого почки и легкие содержат ферменты первой и второй фазы метаболизма ксенобиотиков. В результате внепеченочного метаболизма образуются продукты аналогичные продуктам печеночного происхождения. В ходе внепеченочного метаболизма может происходить активация метаболитов, образующихся в печени[27].

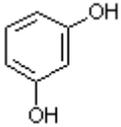
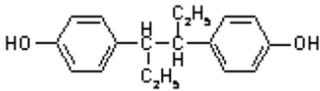
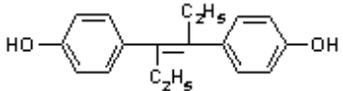
1.4 Представители метоксифенолов, их токсичность, симптоматика отравлений.

Фенол и его производные обладают высокой токсичностью. При попадании внутрь смертельная доза для взрослых составляет от 1 до 10 г, для детей -50-500 мг. Для производных фенола примерная смертельная доза составляет 2 грамма. Отравление фенолом или его производными возможно в результате приема веществ внутрь, а также в результате всасывания через кожные покровы и слизистые оболочки. Производные фенола значительно отличаются по степени токсичности в зависимости от структуры молекулы и физико – химических свойств соединений. Основные представители производных фенола и их токсикологическая характеристика представлены в таблице 1.4.1 [28-29].

Таблица 1.4.1 Основные представители производных фенола.

№	Соединение	Химическая формула	Внешний вид, токсикологическая характеристика, симптоматика отравлений.
1	Фенол чистый (Оксибензол)		<p>Бесцветные, длинные, игольчатые кристаллы своеобразного запаха. При проглатывании или вдыхании паров происходит поражение слизистой оболочки ЖКТ, глаз и верхних дыхательных путей. При попадании на кожу образует ожог. В результате глубокого проникновения в ткани вызывает некроз. Вызывает аллергический дерматит. В больших концентрациях способен вызвать нарушение работы мозговой деятельности, привести к остановке дыхания.</p>
2	Фенол жидкий		<p>Жидкость со своеобразным запахом бесцветная или розоватого оттенка. Жидкий фенол и его пары может легко поглощаться слизистыми оболочками и кожей. Попадание на кожу концентрированного раствора вызывает тяжелые ожоги.</p>

3	Сирингол (2,6 – диметоксифенол)		<p>Моноклинные кристаллы, твердое вещество от желтого до оранжевого цвета. Попадая в больших количествах в поверхностные воды, нарушает процессы фотосинтеза и ухудшает общее санитарное состояние водоемов ввиду значительного снижения содержания растворенного кислорода. Обладают заметной токсичностью, канцерогенными свойствами.</p>
4	Гваякол (2-метоксифенол)		<p>Бесцветные кристаллы. Вызывает анестезию кожи, экзему, раздражает глаза и дыхательные пути. Накапливаясь в организме человека вызывает нарушение обмена веществ.</p>
5	Тимол (2-изопропил-5-метилфенол)		<p>Бесцветная кристаллическая масса с характерным запахом. Отравления при вдыхании паров маловероятны. Вызывает раздражение кожи и слизистых оболочек.</p>

6	Резорцин (м-диоксибензол)		<p>Кристаллический порошок со слабым желтоватым оттенком с характерным запахом. В больших концентрациях вызывает ожоги, головокружение и головную боль, рвоту, повышенное потоотделение, судороги, потерю сознания.</p>
7	Синэстрол (Мезо-3,4-ди-(п-оксифенил)-гексан)		<p>Белый или со слегка желтоватым оттенком порошок. Вызывает головокружение тошноту, рвоту. Приводит к нарушению функции печени.</p>
8	Диэтилстильбестрол (Транс-3,4-ди-(п-оксифенил)-гексен-3)		<p>Белая кристаллическая масса. Повышает риск развития новообразований, опухолей.</p>

Таким образом, описанные токсикологические характеристики доказывают необходимость контроля данных соединений в окружающей среде и изучения механизма их действия на живой организм.

1.5 Известные методы изолирования из биоматериала и очистка извлечений

В основе химико-токсикологического анализа лежит решение двух основных задач: изолирование токсичных веществ и определение их количественного содержания в изолированной фазе. Процесс «изолирования» включает в себя три последовательных этапа: разделение, концентрирование и выделение. Изолирование ядовитых и токсичных веществ осуществляется путем отделения токсичных веществ от субстрата и концентрирование их с последующим выделением в самостоятельную фазу. Метод изолирования выбирается в зависимости от природы объекта. Так же следует учитывать обстоятельства отравления и результаты предварительных испытаний. Существует несколько основных способов изолирования токсичных веществ из биологического материала. Наиболее распространенные из них представлены в таблице 1.5.1 [30].

Таблица 1.5.1. Методы изолирования веществ из биологического материала

№	Название метода	Достоинства	Недостатки
1	Изолирование подкисленным этанолом	1.Этанол является хорошим растворителем для многих веществ, поэтому данный метод можно считать универсальным 2.Метод обеспечивает изолирование барбитуратов до 30 % и алкалоидов до 20-25 %. В результате изолирования получают чистые хлороформные	1.Метод является длительным (8-10 дней) и осуществляется в несколько стадий. Проводится большое количество операций связанных с осаждением белков и последующим фильтрованием, что приводит к значительным

		<p>извлечения. При экстрагировании веществ из водной фазы хлороформом, данные извлечения не дают эмульсий.</p>	<p>потерям изолируемых веществ. 2. Сравнительная дороговизна (Затраты этанола на одно изолирование превышают 500 мл)</p>
2	Изолирование веществ щавелевой кислотой, водой	<p>1. Экспрессность (1 день)</p> <p>2. Сокращение количества операций, соответственно меньшие потери извлекаемых веществ.</p> <p>3. В качестве извлекающего агента дорогой спирт заменен водой, что делает данный метод экономичным.</p>	<p>1. При исследовании гнилостного биологического материала проводится экстрагирование веществ из водной фазы с помощью хлороформа, что приводит к образованию стойких эмульсий. Поэтому метод не предусматривает очистку извлечений.</p>
3	Изолирование веществ амфифильным ацетоном	<p>1. Использование в качестве экстрагента амфифильного растворителя – нейтрального ацетона позволяет извлекать вещества основного и кислотного характера, как в молекулярной, так и в ионизированной формах. Это обеспечивает высокий выход токсичных веществ (до 60-70%)</p>	<p>1. Метод является многостадийным. Полученные извлечения содержат большое количество примесей, что требует их дополнительной очистки.</p>

Экстракты, полученные настаивание биологического материала, содержат примеси аминокислот, липидов, белковых веществ и других соединений, которые мешают обнаружению и определению количественного содержания токсичных веществ в полученных экстрактах. Поэтому необходимо проводить очистку экстрактов от примесей. Существует несколько способов очистки

извлечений: центрифугирование, фильтрование, экстракция, осаждение и ряд физико-химических методов.

Центрифугирование и фильтрование. Фильтрование применяют для очистки вытяжек от механических примесей (частичек биологического материала). Однако поры фильтров могут пропускать более мелкие частицы, размером меньшим по отношению диаметра пор фильтра. Помимо этого, материал фильтра может адсорбировать определенное количество токсичных веществ, выделенных из биологического материала. Исходя из вышеперечисленных недостатков фильтрования, как метода очистки извлечений от примесей, наиболее подходящим для этой цели является метод центрифугирования.

Осаждение примесей. Примеси, которые переходят из биологического материала в извлечения, проходящие через поры фильтра и не осаждающиеся в процессе центрифугирования, могут быть осаждены специальными реактивами. Некоторые реактивы применяются не только для очистки извлечений, но и для осаждения белковых веществ из крови. В качестве таких реактивов применяются: вольфрамовая, трихлоруксусная, метафосфорная кислоты, гетерополикислоты и другие вещества. Очистка извлечений основанная на осаждении примесей имеет ряд недостатков. Полученные осадки адсорбируют на своей поверхности некоторые токсичные вещества, подлежащие исследованию, что является одной из причин потери исследуемых веществ в химико-токсикологическом анализе.

Экстракция примесей из вытяжек. Наиболее часто применяемым методом очистки извлечений из биологического материала в химико-токсикологическом анализе является экстракция. Данный метод обеспечивает очистку извлечений от аминокислот, липидов, продуктов их дезаминирования и декарбоксилирования. Для успешного проведения экстракции необходимо правильно выбрать несмешивающийся с водой органический растворитель и установить необходимое значение pH среды. В случае неправильного выбора pH среды вместе с примесями возможна экстракция некоторого количества

исследуемого токсичного вещества. Поэтому экстракция должна проводиться при значении рН, при котором исследуемые вещества находящиеся в вытяжках не экстрагируются.

Физико-химические методы очистки вытяжек. В химико-токсикологическом анализе для очистки извлечений из биологического материала в последнее время внедряют различные физико-химические методы. Для этой цели применяют методы гель-хроматографии, ионообменной хроматографии, метод молекулярной адсорбционной хроматографии на колонках и др. Для обнаружения токсичных и ядовитых веществ, находящихся в вытяжках из биологического материала, используют методы хроматографии в тонких слоях сорбента, методы электрофореза и хроматографии на бумаге. Данные методы позволяют производить обнаружение исследуемых веществ в полученных извлечениях не проводя предварительную очистку их от примесей [31].

Глава 2. Материалы и методы исследования

2.1 Объект исследования, реактивы, приборы и материалы

Объектом исследования являлся стандартный образец 2,6 – диметоксифенола (2,6 – ДМОФ) с содержанием основного вещества не менее 99 % производства Sigma-Aldrich.

Для исследования 2,6-ДМОФ использовалось следующее оборудование:

- ИК – Спектрометр Agilent 660 производитель Digilab;
- УФ-Спектрофотометр Cary60 производитель Digilab;
- Дозатор пипеточный «Лайт» объемом 100-1000 мкл;
- Весы аналитические серии «ВЛ-М» производитель Госметр;

В данной работе использовались следующие материалы и реактивы:

- 2,6-диметоксифенол $(\text{CH}_3\text{O})_2\text{C}_6\text{H}_3\text{OH}$;
- порошок бромида калия-KBr (ГОСТ 4160-74);
- раствор этанола 95%- $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (ГОСТ 5962-2013);
- толуол – C_7H_8 (ГОСТ 5789-78);
- ледяная уксусная кислота – CH_3COOH (61-75);
- ацетонитрил- CH_3CN (ТУ 2636-092-44493179-04);
- гексан- C_6H_{14} (ТУ 6-09-3375-78);
- этилацетат- $\text{C}_4\text{H}_8\text{O}_2$ (ГОСТ 8981-78);
- ацетон- $\text{C}_3\text{H}_6\text{O}$ (ГОСТ 2768-84);
- хлороформ- CHCl_3 (ГОСТ 20015-88);
- гептан- C_7H_{16} (ГОСТ 25828-83);
- диэтиловый эфир- $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$ (ГОСТ 22300-76);
- пропанол-2- $\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$ (ГОСТ 9805-84);
- вода дистиллированная - $\text{H}_2\text{O}_{\text{дист}}$ (ГОСТ 6709-72);
- Стандарт-титры для приготовления стандартных буферных растворов:
 - гидроксид натрия (NaOH) (С=0.1 н);

-соляная кислота (HCl) (C=0.1 н);

- Дихлорэтан- $C_2H_4Cl_2$ (ГОСТ 1942-86);
- диоксан-1,4 - $O(CH_2CH_2)_2O$ (ГОСТ 10455-80);
- хроматографические пластинки типа "Сорбфил";

2.2 Методика исследования 2,6-диметоксифенола методом ИК-спектроскопии

Подготовку фонового и анализируемого образцов проводили по следующей методике: навеску анализируемого образца 2,6-ДМОФ массой 0,0007 г, с точностью до 0,0001 г, растирали до мелкодисперсного состояния в агатовой ступке ручным способом. Далее навеску тонкоизмельченного образца тщательно перемешивали с точной навеской KBr массой 0,0170 г, с точностью до 0,0001 г, предварительно измельченной в агатовой ступке, с последующим прессованием данной смеси в пресс-форме для получения прозрачной (полупрозрачной) таблетки. При регистрации спектров на ИК-спектрометре Agilent 660 с однолучевой схемой проводили предварительное снятие фонового спектра KBr, затем регистрировали ИК-спектр анализируемого образца. Спектрограмму записывали в интервале частот 4000–1100 cm^{-1} .

Полученные спектрограммы обрабатывали путем точного расчета положения максимумов поглощения. Интерпретацию спектров проводят с помощью литературы [32-34].

2.3 Методика исследования оптических свойств 2,6 – диметоксифенола в различных растворителях

В пробирки вместимостью 10 cm^3 вносили навески образца 2,6-ДМОФ массой 10 мкг, 20 мкг, 40 мкг и доводил до метки растворителем, получая растворы с концентрацией 0,001 %, 0,002% и 0,004%. Далее проводили измерение полученных растворов 2,6-ДМОФ с помощью УФ – спектрофотометра Cary 60 при длине волны 190-360 нм в кюветах с толщиной рабочего слоя 10 мм [35].

2.3.1. Методика построения градуировочного графика

В мерную колбу вместимостью 10 см³ (или пробирку, градуированную на 10 см³) вносили 10 мг 2,6-ДМОФ и доводили до метки этанолом. Получили раствор А с концентрацией 1000 мкг/см³ (0,1%-ый раствор). Далее в ряд мерных пробирок (вместимостью 10 см³) вносили 0,05; 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5 и 0,6 см³ раствора А и доводили содержимое каждой колбы (пробирки) до метки этанолом согласно схеме (рисунок 2.3.1.1).

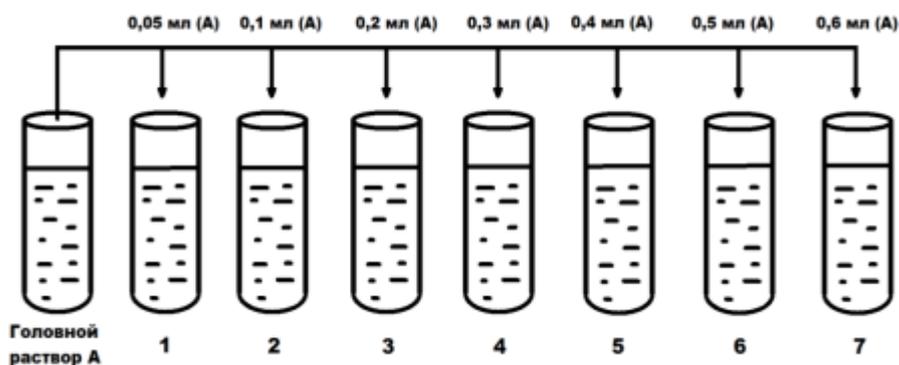


Рисунок 2.3.1.1-Схема приготовления стандартной серии растворов

Оптическую плотность полученных растворов стандартной серии измеряли при длине волны 190-360 нм в кюветах с толщиной рабочего слоя 10 мм с помощью УФ-спектрофотометр Cary 60. По результатам измерения оптических плотностей растворов стандартной (градуировочной) серии строили график зависимости оптической плотности этанольных растворов (А) от концентрации 2,6-ДМОФ (С, мкг/см³). Уравнение прямой линии рассчитывали методом наименьших квадратов [36-37]. Общий вид уравнения:

$$A = k C + b \quad (2.1)$$

где А - оптическая плотность; С - концентрация определяемого вещества в фотометрируемом растворе, мкг/см³; k и b – коэффициенты. Коэффициент k – тангенс угла, образуемого калибровочным графиком и осью абсцисс, коэффициент b –расстояние между началом

координат и гипотетической точкой пересечения калибровочного графика с осью ординат, выраженное в единицах оптической плотности.

Для расчёта коэффициентов k и b принимали во внимание концентрации анализируемых веществ (мкг/см^3) в фотометрируемых растворах стандартной серии и значения оптической плотности, соответствующие этим концентрациям. Исходя из концентрации (C) и значений оптической плотности (A), рассчитывали значения C_2 и $C \cdot A$. Коэффициент k рассчитывали по формуле:

$$k = \frac{\sum C \cdot \sum A - n \cdot \sum C \cdot A}{\sum C^2 - n \cdot \bar{C}^2}, \quad (2.2)$$

где n – число точек, по которым строят график; A – оптическая плотность; C – концентрация (мкг/см^3);

Коэффициент b рассчитывали по формуле:

$$b = \frac{-\sum C \cdot \sum C^2 + \sum C \cdot \sum C \cdot A}{\sum C^2 - n \cdot \bar{C}^2}, \quad (2.3)$$

где n – число точек, по которым строят график; A – оптическая плотность; C – концентрация (мкг/см^3);

2.4. Методика исследования хроматографического поведения 2,6-диметоксифенола

При изучении хроматографического поведения 2,6-ДМОФ в тонком слое силикагеля использовали пластинки типа "Сорбфил" с УФ-индикатором размером 10×5 см.

В качестве подвижных фаз (элюентов) были использованы гексан, гептан, диоксан, пропанол-2, тетрахлорметан, бензол, диэтиловый эфир, этилацетат, хлороформ, этанол, ацетонитрил, ацетон, а также сложные смеси: гексан-ацетон в соотношениях 2:8, 5:5 и 8:2; гексан-хлороформ, гексан-этанол, гексан-пропанол-2, тетрахлорметан-диэтиловый эфир в таких же соотношениях.

Значения основных параметров хроматографирования рассчитывали по формулам (2.4-2.8) [38-39]

$$R_f = \frac{L_1}{L} \quad (2.4)$$

$$R_s = \frac{R_{f\text{исслед.вещества}}}{R_{f\text{ фенола}}} \quad (2.5)$$

$$B = \frac{1}{R_f} \quad (2.6)$$

$$k' = \frac{B-1}{1} \quad (2.7)$$

$$N = 16 \cdot \left(\frac{l_{ц}}{l_{п}}\right)^2 \quad (2.8)$$

$$H=L/N \quad (2.9)$$

$$i_{\text{тсх}}=2(l_{ц2}-l_{ц1})/(l_{п2}+l_{п1}) \quad (2.10)$$

где R_f – абсолютная хроматографическая подвижность; L_1 – расстояние от линии старта до центра пятна, а L – длина пробега фронта подвижной фазы (расстояние от линии старта до линии финиша); R_s – относительная хроматографическая подвижность, B – условное удерживание; N – число теоретических тарелок; H – высота эквивалентная теоретической тарелке; $i_{\text{тсх}}$ – степень разделения; $l_{ц}$ – расстояние от линии старта до центра пятна, $l_{п}$ – длина пятна, измеренная по направлению движения фронта подвижной фазы, L – длина пробега фронта подвижной фазы, $l_{ц1}$ и $l_{ц2}$ – расстояние от линии старта до центров пятен соответственно с большей и меньшей хроматографической подвижностью, $l_{п1}$ и $l_{п2}$ – длина пятен соответственно с большей и меньшей хроматографической подвижностью. Измерение расстояний на хроматограммах проводились в миллиметрах.

2.5. Методика определения 2,6-диметоксифенола в биологическом материале

Для определения 2,6 – ДМОФ в биологическом материале использовали свежую говяжью печень. Печень в количестве 30-50 г измельчали в блендере в течении 1 минуты, до размеров частиц 0,3-0,5 мм. Подготовленный биологический материал в количестве 5 г помещали в химический стаканчик вместимостью 150 см³. В биоматрицу вносили 5 мг 2,6-ДМОФ с точностью до 0,0001 г и тщательно перемешивали с помощью стеклянной палочки. Содержимое герметично закрывали полиэтиленовой пленкой и выдерживали при температуре 20 °С в течении 1 часа. Затем выдержанные искусственные смеси заливали 10 см³ экстрагирующими реагентами различной химической природы: этанол 95%, ацетон, ацетонитрил, хлороформ, этилацетат, этилацетат – ацетон (3:7), этилацетат – ацетон (5:5), этилацетат – ацетон (7:3), вода, гексан, раствор гидроксида натрия 0,1 %, толуол, дихлорэтан, 8% раствор уксусной кислоты, ледяная уксусная кислота и настаивали в течении 45 минут, периодически перемешивая содержимое стаканчиков. Далее жидкие извлечения собирали в соответствующую пробирку и повторяли настаивание в экстрагирующем агенте по вышеописанной схеме еще один раз.

Объединенные жидкие извлечения первого и второго настаивания наносили на хроматографическую пластинку размером 10×5 см в виде полосы длиной 2,5-3 см и шириной 0,8-1 см. В качестве раствора свидетеля использовали 0,5% этанольный раствор 2,6-ДМОФ.

Каждую пластину с нанесёнными извлечениями и раствором стандарта высушивали на воздухе от остатков растворителя и помещали в хроматографическую камеру, на дно которой налито 10 см³ оптимальной для хроматографирования подвижной фазы (которая была найдена в процессе предварительно проведённых исследований особенностей хроматографического поведения 2,6-диметоксифенола в тонких слоях сорбента), и хроматографировали до тех пор, пока фронт подвижной фазы не достигал линии финиша. В качестве оптимальной подвижной фазы были

выбраны гексан-хлороформ (2:8) и гексан – ацетон (5:5). При достижении фронтом растворителя линии финиша камеру открывали, хроматограмму вынимали из камеры, высушивали от остатков подвижной фазы в токе воздуха при комнатной температуре и анализировали хроматограмму в УФ- свете (под УФ- излучателем, генерирующим излучение с длиной волны 254 нм). Проявившиеся на хроматограмме пятна обводили карандашом. Проявившееся пятно анализируемого вещества (вещества, извлечённого тем или иным изолирующим агентом из биоматериала) вырезали вместе с подложкой из хроматограммы, и помещали в элюент – 95 % этанол на 15 минут. Полученный этанольный элюат анализируемого вещества спектрофотометрировали при длине волны 190-360 нм в кюветах с толщиной рабочего слоя 10 мм с помощью УФ-спектрофотометр Cary 60 на фоне чистого этанола. Для каждого элюата записывали длины волн, соответствующие максимумам полос поглощения, а также записывали значение оптической плотности в точках максимумов. По величине оптической плотности, соответствующей наиболее длинноволновому максимуму определяли количество 2,6-диметоксифенола, извлечённого тем или иным изолирующим агентом, используя заранее рассчитанное уравнение градуировочного графика. Количество 2,6-диметоксифенола, перешедшее в то или иное извлечение в мг и в % рассчитывали по формулам:

$$X = \frac{(A-b) \cdot V_1 \cdot V_2}{k \cdot V_3 \cdot 1000}, \text{ мг} \quad (2.11)$$

где A - оптическая плотность, измеренная в длинноволновом максимуме, V₁ - общий объём элюата, V₂ - общий объём извлечения, V₃ - объём извлечения, наносимый на хроматографическую пластину; k и b - коэффициенты в уравнении градуировочного графика;

$$X = \frac{X \cdot 100}{m}, \% \quad (2.12)$$

где m - масса 2,6-диметоксифенола, внесённая в 5 г искусственной смеси.

2.5.1 Методика сравнительного изолирования различными изолирующими агентами с целью поиска оптимального изолирующего агента

Измельченную говяжью печень до размеров частиц 0,3-0,5 мм помещали в пять химических стаканчиков в количестве 5 г и прибавляли по 5 мг 2,6-ДМОФ. Содержимое тщательно перемешивали стеклянной полочкой. К каждой подготовленной модельной смеси прибавляли по 10 см³ изолирующего агента и оставляли настаиваться в течении 45 минут. Жидкое извлечение сливали с твердого остатка и повторяли операцию настаивания в предлагаемых условиях еще один раз. Извлечения, полученные для каждой искусственной смеси в результате первого и второго настаивания, объединяли в отдельные пробирки и перемешивали.

Далее 0,3 см³ объединенного извлечения наносили на линию старта хроматографической пластины «Сорбфил» в виде полосы длиной 3 см и шириной 1 см и хроматографировали в системе гексан-ацетон (5:5) в присутствии вещества-стандарта 0,5 % раствора 2,6-ДМОФ в этаноле 95%. Детекцию пятен на хроматограммах проводили в УФ-свете (под УФ-излучателем, генерирующим излучение с длиной волны 254 нм). Для количественного определения пятно анализируемого вещества вырезали и элюировали в 10 см³ 95 % раствора этанола. Полученные растворы фотометрировали на УФ-спектрофотометре Cary 60 в кювете с толщиной рабочего слоя 10 мм при длине волны 268 нм на фоне этанола. Количество 2,6-ДМОФ, перешедшее в то или иное извлечение в мг и в % рассчитывали по формулам:

$$X = \frac{(A-b) \cdot V_1 \cdot V_2}{k \cdot V_3 \cdot 1000}, \text{ мг} \quad (2.13)$$

где А - оптическая плотность, измеренная в длинноволновом максимуме, V₁ - общий объём элюата, V₂ - общий объём извлечения, V₃ - объём извлечения, наносимый на хроматографическую пластину; k и b - коэффициенты в уравнении градуировочного графика;

$$X = \frac{X \cdot 100}{m}, \% \quad (2.14)$$

где m - масса 2,6-диметоксифенола, внесённая в 5 г искусственной смеси.

2.5.2. Методика изолирования двумя оптимальными изолирующими агентами с целью поиска оптимального времени настаивания

Измельченную говяжью печень до размеров частиц 0,3-0,5 мм помещали в пять химических стаканчиков в количестве 5 г и прибавляли по 5 мг 2,6-ДМОФ. Содержимое тщательно перемешивали стеклянной полочкой.

После этого в каждый стаканчик добавляли по 10 см³ оптимального изолирующего агента, перемешивали в течении 1 мин и оставляли при периодическом перемешивании 15, 30, 45, 60, 75 мин.

По истечении 15 минут настаивания жидкое извлечение сливали в пробирку № 1 вместимостью 20 см³, а остаток биоматериала в этом стаканчике заливали новой порцией (10 см³) оптимального изолирующего агента и оставляли при периодическом перемешивании ещё на 15 минут. По истечении повторных 15 минут настаивания второе жидкое извлечение из первого стаканчика сливали в пробирку № 1 вместимостью 20 см³, в которой уже находилось первое извлечение, и тщательно перемешивали первое извлечение со вторым (получаем объединённое извлечение № 1). Аналогично проводили извлечение 2,6 – ДМОФ при 30, 45, 60, 70 минутах.

Извлечения в количестве 0,3 см³ наносили на хроматографическую пластину «Сорбфил» в виде полосы длиной 3 см и шириной 1 см и хроматографировали в системе гексан-ацетон (5:5) в присутствии вещества-стандарта 0,5 % раствора 2,6-ДМОФ в этаноле 95%.

Детекцию пятен на хроматограммах проводим в УФ-свете (под УФ-излучателем, генерирующим излучение с длиной волны 254 нм). Анализируемое вещество соответствующее стандарту вырезали и элюировали в 5 мл 95 % раствора этанола. Полученные растворы фотометрировали на спектрофотометре в кювете с толщиной рабочего слоя 10 мм при длине волны 268 нм или при другой близкой длине волны, где проявился максимум (область 255-275 нм) на фоне этанола или раствора, полученного в контрольном опыте.

Количество 2,6-диметоксифенола, перешедшее в то или иное извлечение в мг и в % рассчитывали по формулам:

$$X = \frac{(A-b) \cdot V_1 \cdot V_2}{k \cdot V_3 \cdot 1000}, \text{ мг} \quad (2.15)$$

где A - оптическая плотность, измеренная в длинноволновом максимуме, V_1 - общий объем элюата, V_2 - общий объем извлечения, V_3 - объем извлечения, наносимый на хроматографическую пластину; k и b - коэффициенты в уравнении градуировочного графика;

$$X = \frac{X \cdot 100}{m}, \% \quad (2.16)$$

где m - масса 2,6-диметоксифенола, внесённая в 5 г искусственной смеси.

2.5.3. Методика изучения зависимости степени извлечения 2,6-диетоксифенола оптимальными изолирующими агентами из биологического материала от содержания в ней аналита

Измельченную говяжью печень до размеров частиц 0,3-0,5 мм помещали в пять химических стаканчиков в количестве 5 г и прибавляли по 1, 2, 5, 10, 15 мг 2,6-ДМОФ. Содержимое тщательно перемешивали стеклянной полочкой.

К каждую модельную подготовленную смесь прибавляли по 10 см³ изолирующего агента и оставляли настаиваться в течении 45 минут. Жидкое извлечение сливали с твердого остатка и повторяли операцию настаивания в предлагаемых условиях еще один раз. Извлечения, полученные для каждой искусственной смеси в результате первого и второго настаивания, объединяли в отдельные пробирки и перемешивали.

Извлечения в количестве 0,3 см³ наносили на хроматографическую пластину «Сорбфил» в виде полосы длиной 3 см и шириной 1 см и хроматографировали в системе гексан-ацетон (5:5) в присутствии вещества-стандарта 0,5 % раствора 2,6-ДМОФ в этаноле 95%.

Детекцию пятен на хроматограммах проводили в УФ-свете (под УФ-излучателем, генерирующим излучение с длиной волны 254 нм). Анализируемое вещество, соответствующее стандарту, вырезали и элюировали в 5 см³ 95 % раствора этанола. Полученные растворы фотометрировали на спектрофотометре в кювете с толщиной рабочего слоя 10 мм при длине волны

268 нм или при другой близкой длине волны, где проявился максимум (область 255-275 нм) на фоне этанола или раствора, полученного в контрольном опыте.

Количество 2,6-ДМОФ, перешедшее в то или иное извлечение в мг и в % рассчитывали по формулам:

$$X = \frac{(A-b) \cdot V_1 \cdot V_2}{k \cdot V_3 \cdot 1000}, \text{ мг} \quad (2.17)$$

где A - оптическая плотность, измеренная в длинноволновом максимуме, V_1 - общий объём элюата, V_2 - общий объём извлечения, V_3 - объём извлечения, наносимый на хроматографическую пластину; k и b - коэффициенты в уравнении градуировочного графика;

$$X = \frac{X \cdot 100}{m}, \text{ \%} \quad (2.18)$$

где m - масса 2,6-диметоксифенола, внесённая в 5 г искусственной смеси.

Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Потенциальными потребителями являются лаборатории судебной экспертизы, лаборатории судебно-медицинской экспертизы, пищевая промышленность, фармацевтические предприятия, студенты проводящие анализы по исследованию 2,6 – диметоксифенола.

4.1.2. Анализ конкурентных технических решений

В настоящее время для определения 2,6 – диметоксифенола применяют различные методы. В ходе разработки методики по определению 2,6-диметоксифенола был использован спектрофотометрический метод.

Рассмотрим следующие методы, которые используются для определения 2,6 - диметоксифенола: тонкослойная хроматография (ТСХ) и высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum_{i=1}^n B_i \cdot B_i, \quad (4.1)$$

где: K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента; B_i – вес показателя (в долях единицы); B_i – балл i-го показателя.

Целесообразно анализ конкурентных технических решений проводить с помощью оценочной карты таблица 4.1.1.

Таблица 4.1.1 – Оценочная карта сравнения для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1.Точность определения	0.2	4	3	5	0.8	0.6	1
2.Экспрессность	0.2	5	5	4	1	1	0.8
3.Простота эксплуатации	0.2	5	5	4	1	1	0.8
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Цена	0.2	5	5	2	1	1	0.4
2. Предполагаемый срок эксплуатации	0.1	4	3	4	0.4	0.3	0.4
3. Стоимость оборудования	0.1	5	5	3	0.5	0.5	0.3
Итого	1	28	26	16	4.7	4.4	3.7

Анализ был проведен сравнительно с двумя методами анализа: конкурент 1 – «Тонкослойная хроматография (ТСХ)», конкурент 2 – «Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ)». По итогам анализа оценочной карты можно сделать вывод, что научная разработка, описываемая в данной НИР, является конкурентоспособной. Следовательно, можно отметить, что основными конкурентами спектрофотометрического метода является высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).

4.1.3. SWOT-анализ

SWOT – (Strengths – сильные стороны, Weaknesses – слабые стороны, Opportunities – возможности и Threats – угрозы) – это комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT – анализ применяют для

исследования внешней и внутренней среды проекта и состоит из нескольких этапов.

В первом этапе рассматривает сильные и слабые стороны проекта, а также выявлении возможностей и угроз.

Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены в таблице 4.1.3.1.

Таблица 4.1.3.1 – Результаты первого этапа SWOT-анализа

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Экспрессность С2. Простота эксплуатации С3. Низкие затраты на пробоподготовку С4. Селективность	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Необходимость дорогостоящего оборудования Сл2. Необходимость дорогостоящих реактивов, дополнительных материалов к прибору
Возможности: В1. Разработка методики определения 2,6-диметоксифенола В2. Появление спроса на продукт В3. Перспективы внедрения методики определения 2,6-диметоксифенола в области судебно-медицинской экспертизы.		
Угрозы: У1. Развития конкурентных методов анализа У2. Ограниченный круг потребителей, узкая направленность. У3. Повышение		

стоимости оборудования		
---------------------------	--	--

На втором этапе SWOT – анализа рассматривает соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Это соответствие или несоответствие должны помочь выявить степень необходимости проведения стратегических изменений.

В рамках данного этапа необходимо построить интерактивную матрицу проекта. Ее использование помогает разобраться с различными комбинациями взаимосвязей областей матрицы SWOT. Каждый фактор помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» или «-».

Интерактивные матрицы проекта представлены в таблицах 4.1.3.2-4.1.3.5.

Таблица 4.1.3.2– Интерактивная матрица проекта «Сильные стороны и возможности»

Сильные стороны проекта					
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4
	B1	+	+	+	+
	B2	+	0	0	+
	B3	+	+	+	+

Таблица 4.1.3.3 – Интерактивная матрица проекта «Слабые стороны и возможности»

Слабые стороны проекта			
Возможности проекта		Сл1	Сл2
	B1	-	-
	B2	0	0
	B3	-	-

Таблица 4.1.3.4 – Интерактивная матрица проекта «Сильные стороны и угрозы»

Сильные стороны проекта					
Угрозы		С1	С2	С3	С4
	У1	-	-	-	+
	У2	-	-	-	+
	У3	-	+	+	-

Таблица 4.1.3.5 – Интерактивная матрица проекта «Слабые стороны и угрозы»

Слабые стороны проекта			
Угрозы		Сл1	Сл2
	У1	+	+
	У2	-	-
	У3	-	+

Таким образом, в рамках третьего этапа может быть составлена итоговая матрица SWOT-анализа, представленная в таблице 4.1.3.6.

Таблица 4.1.3.6 – Итоговая матрица SWOT-анализа

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Экспрессность</p> <p>С2. Простота эксплуатации</p> <p>С3. Низкие затраты на пробоподготовку</p> <p>С4. Селективность</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Необходимость дорогостоящего оборудования</p> <p>Сл2. Необходимость дорогостоящих реактивов, дополнительных материалов к прибору</p>
--	--	--

<p>Возможности:</p> <p>В1. Разработка методики определения 2,6-диметоксифенола</p> <p>В2. Появление спроса на продукт</p> <p>В3. Перспективы внедрения методики определения 2,6-диметоксифенола в области судебно-медицинской экспертизы</p>	<p>Разработка методики определения 2,6-диметоксифенола позволяет разработать альтернативную методику определения данного вещества и использование ее в области судебно-медицинской экспертизы и в области химико-токсикологического анализа.</p>	<p>Срок доставки материалов и оборудования достаточно долгий и будет влиять на успешное внедрении данного продукта, а соответственно, на его спрос. Также ремонт и обслуживание оборудования являются дорогостоящими.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Развития конкурентных методов анализа</p> <p>У2. Ограниченный круг потребителей, узкая направленность.</p> <p>У3. Повышение стоимости оборудования</p>	<p>Заявленная точность экспрессность, простота и низкие затраты позволяют данной методике стать конкурентоспособной.</p>	<p>Отсутствие спроса на новые методы и развитая конкуренция методов обусловлены тем, что данный продукт разрабатывается без прототипа научной разработки.</p> <p>Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования приводит к тому, что для проведения испытаний и опытов не хватает оборудования и реактивов. Это приводит к большим</p>

		затратам времени на проведение научных исследований.
--	--	--

Вывод: В результате SWOT-анализа выявлено, что для данного проекта характерен баланс сильных и слабых сторон, а также возможностей и угроз. При правильно разработанной концепции продвижения проекта, можно внедрить продукт на рынок производства и сбыта.

4.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

Морфологический подход основан на систематическом исследовании всех теоретически возможных вариантов, вытекающих из закономерностей строения (морфологии) объекта исследования. Синтез охватывает как известные, так и новые, необычные варианты, которые при простом переборе могли быть упущены. Путем комбинирования вариантов получают большое количество различных решений, ряд которых представляет практический интерес. В рамках этого этапа составляется морфологическая матрица. Морфологическая матрица для 2,6-диметоксифенола представлена в таблице 4.2.1.

Таблица 4.2.1 – Морфологическая матрица для 2,6 - диметоксифенола

	1	2	3
А. Используемый растворитель	Этанол 95 %	Гидроксид натрия 01.н	Хлороформ
Б. Приборная база	УФ-спектрофотометр Cary 60	Фото Спектрофотометр ПЭ-5300ВИ	Фотоколориметр
В. Толщина поглощающего слоя	10 мм	Различный набор кювет (5-20 мм)	20 мм
Г. Построение графических	Автоматический вывод данных в	Автоматический вывод данных,	Самостоятельное снятие данных в

зависимостей параметров спектрофотометрирования	каждой точке, автоматическое построение графических зависимостей.	ручное построение графических зависимостей.	каждой определяемой точке, ручное построение графических зависимостей
---	---	---	---

4.3. Планирование научно-исследовательских работ

4.3.1 Структура работ в рамках научного исследования

Для выполнения научно-исследовательской работы формируется рабочая группа, в состав которой входят: бакалавр – Самочернова А.П., научный руководитель – Чернова.А.П., консультант по экономической части (ЭЧ) - Рыжакина Т. Г.и консультант по части социальной ответственности (СО) – Король И.С. выпускной квалификационной работы. Необходимо составим перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования и проведем распределение исполнителей по видам работ (таблица 4.3.1.1).

Таблица 4.3.1.1 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

№ этап а	Название этапа	Содержание работ	Должность исполнителя
1	Введение	Разъяснение темы НИР, основных направлений деятельности по осуществлению НИР.	Чернова А.П. (доцент каф. ФАХ)
2	Литературный обзор	Обзор существующих методик и теоретических основ методы исследования фенольных производных, в том числе и 2,6-диметоксифенола.	Самочернова А. П. (студент)

3	Теоретический анализ	Разработка плана НИР, выбор методики и техники выполнения.	Чернова А.П. (доцент каф. ФАХ) Самочернова А.П. (студент)
4	Постановка задачи исследования	Постановка задачи на эксперимент, предсказание возможных результатов.	Чернова А.П. (доцент каф. ФАХ)
5	Экспериментальная часть	Разработка методики определения 2,6 – диметоксифенола с использованием различных физико-химических методов.	Самочернова А. П. (студент)
6	Результаты и обсуждения	Оценка эффективности полученных результатов и определение целесообразности проведения ВКР	Чернова А.П. (доцент каф. ФАХ) Самочернова А. П (студент)
7	Разработка технической документации и проектирование	Оценка эффективности применения анализа	Рыжакина Т. Г. (доцент каф.экон.) Самочернова А.П. (студент)
8		Разработка социальной ответственности по теме	Король И.С. (доцент каф.БЖД) Самочернова А. П (студент)
9	Оформление отчета по НИР	Разработка презентации, дипломной работы и	Самочернова А. П (студент)

		раздаточного материала	
--	--	------------------------	--

4.3.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов.

Таблица 4.3.2.1 - Рабочая группа проекта

ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудозатраты, час.
Инженер-исследователь ФАХ, Чернова А.П.	Руководитель НИР	Контроль над ходом выполнения проекта, консультации по поводу проведения эксперимента, получения и анализа результатов НИР	128
Самочернова А. П	Исполнитель	Выполнение проекта (проведение эксперимента, получение и анализ результатов НИР)	640
Рыжакина Т. Г.	Консультант по экономической части	Оценка эффективности применения анализа	10

Король И.С.	Консультант по части социальной ответственности	Разработка социальной ответственности по теме	10
Итого:			788

Трудозатраты были рассчитаны на основании следующих данных: проект выполняется 3 месяца, руководитель проекта принимает участие 4 раза в неделю на протяжении 2-х часов, инженер дипломник работает в среднем 5 дней в неделю по 8 часов.

4.3.3. Разработка графика проведения научного исследования

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни. Для этого необходимо воспользоваться следующей формулой:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (4.2)$$

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

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

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

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = 365/247 = 1.5 \quad (4.3)$$

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

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

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

Календарный план проекта представлен в таблице 4.3.3.1.

Таблица 4.3.3.1 – Календарный план проекта

№ п/п	Название работы	Длительность, рабочие дни	Длительность, календарные дни	Количество исполнителей	Должность исполнителя
1	Введение	10	15	1	Чернова А.П. (доцент каф. ФАХ)
2	Литературный обзор	7	10	1	Самочернова А. П (студент)
3	Теоретический анализ	7	10	2	Чернова А.П. (доцент каф. ФАХ) Самочернова А. П (студент)
4	Постановка задачи исследования	5	8	1	Чернова А.П. (доцент каф. ФАХ)
5	Экспериментальная часть	31	46	1	Самочернова А. П (студент)
6	Результаты и обсуждения	10	15	2	Чернова А.П. (доцент каф. ФАХ) Самочернова А. П (студент)

7	Оценка эффективности применения анализа	5	9	2	Рыжакина Т. Г. (доцент каф.экон.) Самочернова А. П (студент)
8	Разработка социальной ответственности по теме	5	9	2	Король И.С. (доцент каф.БЖД) Самочернова А. П (студент)
9	Разработка презентации и раздаточного материала	5	8	1	Самочернова А. П (студент)
10	Оформление дипломной работы	15	23	1	Самочернова А. П (студент)
	Итого:	100	153		

Диаграмма Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ. Диаграмма Ганта для данного исследования представлена в таблице 4.3.2.2.

Таблица 4.3.2.2 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме «Особенности определения 2,6-диметоксифенола в объектах биологического происхождения»

№ п/п	Вид работ	Исполнители	Т _к , кал, дн.	март			апрель			май		
				1	2	3	1	2	3	1	2	3
				1	Введение	Руководитель	10	□				
2	Литературный обзор	Бакалавр	7		▒							
3	Теоретический анализ	Руководитель, Бакалавр	7		▒							
4	Постановка задачи исследования	Руководитель	5			□						
5	Экспериментальная часть	Бакалавр	31				▒					
6	Результаты и обсуждения	Руководитель, Бакалавр	10						□			
7	Оценки эффективности и применения анализа	Консультант по ЭЧ, бакалавр	5						▒	□	□	

Таблица 4.4.1.1 – Материальные затраты

№п/п	Наименование	Единица измерения	Количество			Цена за ед., руб.			Затраты на материалы, (З _м), руб.		
			Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	2,6-диметоксифенол	г	50	100	150	3130 (за 50 г)30	3130(за 50 г)30	3130(за 50 г)30	3130	6260	9390
2	Хлороформ	мл	200	400	600	400	400	400	400	800	1200
3	Толуол	мл	200	400	600	300	300	300	300	600	900
4	Гексан	мл	200	400	600	1176	1176	1176	1176	2352	3528
5	Этилацетат	мл	200	400	600	229	229	229	229	458	687
6	Уксусная кислота	мл	200	400	600	487	487	487	487	974	1461
7	Гептан	мл	200	400	600	360	360	360	360	720	1080
8	Диэтиловый эфир	мл	200	400	600	646	646	646	646	1292	1938
9	Этанол	мл	200	400	600	1400	1400	1400	1400	2800	4200
10	Стандарт-титры гидроксида натрия (NaOH) (С=0.1 н);	упаковка	1	1	1	294	294	294	294	294	294

11	Стандарт-титры Соляной кислота (HCl) (C=0.1 н);	упаковка	1	1	1	446	446	446	446	446	446	
12	Хроматографические пластинки типа "Сорбфил"	упаковка	1	1	1	4950	4950	4950	4950	4950	4950	
13	Колбы мерные на 50 и 100 см ³	шт	10	12	14	120	120	120	1200	1440	1680	
14	Цилиндры мерные с носиком на 25, 50, 100 см ³	шт	5	5	10	70	70	70	350	350	700	
15	Пипетки, градуированные на 5, 10 см ³	шт	3	5	8	95	95	95	285	475	760	
16	Стаканы на 25, 50, 100 см ³	шт	7	9	10	60	60	60	420	540	600	
17	Пробирки	шт	3	10	10	20	20	20	60	200	200	
	Итого									16133	24951	34014

4.4.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ

В данную статью включены все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по данной теме. Определение стоимости спецоборудования производили по действующим прейскурантам с учетом НДС. При приобретении спецоборудования учтены затраты по его доставке и монтажу в размере 15 % от его цены. Все расчеты по приобретению спецоборудования и оборудования, используемого для каждого исполнения темы, сводятся в таблице 4.4.2.1.

Таблица 4.4.2.1 – Затраты на оборудование для научно-экспериментальных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования			Цена единицы оборудования , тыс. руб.			Общая стоимость оборудования, тыс. руб.		
		Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1.	Дистиллятор для приготовлени я воды очищенной (Россия, ЧЗБТ)	1	1	1	35000	35000	35000	35000	35000	35000

2.	Весы аналитические (класс точности 0,0001 г., Россия)	1	1	1	38000	38000	38000	38000	38000	38000
3.	Дозатор 1-канальный, переменного объема 10-100 мкл (Россия);	1	1	1	7906	7906	7906	7906	7906	7906
4.	Дозатор 1-канальный, переменного объема 100-1000 мкл (Россия);	1	1	1	9780	9780	9780	9780	9780	9780
Итого:								90686	90686	90686

Стоимость оборудования, используемого при выполнении НИР имеющегося на кафедре ФАХ стоимостью свыше 40 тыс. рублей, учитывалось в виде амортизационных отчислений. Расчет затрат по статье «Амортизация оборудования» представлена в таблице 4.4.2.2.

Таблица 4.4.2.2 - Расчет затрат по статье «Амортизация оборудования»

№ п/п	Наименование оборудования	Цена оборудования, тыс. руб			Срок эксплуатации, лет			Амортизация, тыс. руб		
		Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1.	Спектрофотометр универсальный Agilent Cary 60 (производство Германия). воды очищенной (Россия, ЧЗБТ)	650	-	-	5	5	5	130	-	-
2.	ИК-спектрофотометр Agilent 660	965	965	965	5	5	5	193	193	193
3.	Хроматограф	-	800	950				-	160	190
Итого:								323	353	383

4.4.3 Расчет основной заработной платы

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

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{раб}}, \quad (4.4)$$

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}}, \quad (4.5)$$

где: $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб.дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя; при отпуске в 48 раб.дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя; $F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн.

Таблица 4.4.3.1 – Баланс рабочего времени за 2018 год

Показатели рабочего времени	Руководитель		Консультант	
	Бакалавр	ЭЧ	Бакалавр	СО
Календарное число дней	365	365	365	365
Количество нерабочих дней				
- выходные дни	118	118	118	118
- праздничные дни				
Потери рабочего времени				
- отпуск	24	-	24	24
- невыходы по болезни				
Действительный годовой фонд рабочего времени	223	247	223	223

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \quad (4.6)$$

где: $Z_{\text{тс}}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

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

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5

$k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Расчет основной заработной платы приведен в таблице 4.4.3.2.

Таблица 4.4.3.2 – Расчет основной заработной платы

Категория	$Z_{мс}$, руб.	k_d	k_p	Z_m , руб.	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель							
ППСЗ	28000	0,35	1,3	60060	6108	11,7	71464
Бакалавр							
ППС1	2200	0,35	1,3	4719	480	7,6	3648
Консультант по ЭЧ							
ППСЗ	22450	0,35	1,3	48155	4897	4,1	20078
Консультант по СО							
ППСЗ	33240	0,35	1,3	71300	7251	4,4	31904

Общая заработная плата исполнителей работы представлена в таблице

4.4.3.3.

Таблица 4.4.3.3 – Общая заработная плата исполнителей

Исполнители	$Z_{осн}$, руб.	$Z_{доп}$, руб.	$Z_{зп}$, руб.
Научный руководитель	71464	10005	81469
Бакалавр	3648	510,7	4158,7
Консультант по ЭЧ	20078	2811	22889
Консультант по СО	31904	4466,6	36370,6

4.4.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Отчисления на социальные нужды составляет 30,5% от суммы заработной платы всех сотрудников. Отчисления на социальные нужды составляет: отчисления в пенсионный фонд 22%, отчисление на социальное страхование 2,9%, отчисление на медицинское страхование 5,1%. 0,5% страхование жизни, от несчастного случая.

Рассчитываем затраты на отчисление на социальные нужды по формуле:

$$Z_{о.с.н.} = 0,3 \cdot (Z_{осн.рук.} + Z_{осн.инж.}), \quad (4.7)$$

где: $Z_{o.c.n.}$ – затраты на отчисления на социальные нужды, руб.

$$Z_{o.c.n.} = 0,305 \cdot (71464 + 3648) = 22909,16 .$$

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 4.4.4.1.

Таблица 4.4.4.1 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнители	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Научный руководитель	71464	10005
Бакалавр	3648	510,7
Консультант по ЭЧ	20078	2811
Консультант СО	31904	4466,6
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,3	
ИТОГО:	22909,16	

4.4.5 Накладные расходы

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

$$Z_{\text{накл}} = (\text{сумма статей } 1 \div 4) \cdot k_{\text{нр}} , \quad (4.8)$$

где: $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов $k_{\text{нр}}$ допускается взять в размере 16%. Таким образом накладные расходы на данные НТИ составляют

4.4.6 Формирование бюджета затрат НИИ

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

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект приведен в таблице 4.4.6.1.

Таблица 4.4.6.1 – Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.			Примечание
	Исп.1	Исп.2	Исп.3	
1. Материальные затраты НИИ	16133	24951	34014	Табл.4.4.1.1
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	90686	125426	125426	Табл.4.4.2.1
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	127094	127094	127094	Табл.4.4.2.2
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	17793,3	17793,3	17793,3	Табл.4.4.3.3
5. Отчисления во внебюджетные фонды	22909,16	22909,16	22909,16	Табл.4.4.4.1
6. Накладные расходы	43938,5	50907,7	52357,8	16 % от суммы ст.1-5
7. Бюджетзатрат НИИ	318554	369081,2	379594,3	Сумма ст. 1-6

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

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (4.9)$$

где: $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

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

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

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

$$I_{\phi}^{\text{исп.}1} = \frac{357305}{395014} = 0,9$$

$$I_{\phi}^{\text{исп.}2} = \frac{395014}{395014} = 1$$

$$I_{\phi}^{\text{исп.}3} = \frac{393127}{396014} = 0,99$$

Полученная величина интегрального финансового показателя разработки отражает соответствующее численное увеличение бюджета затрат разработки в разгах (значение больше единицы), либо соответствующее численное удешевление стоимости разработки в разгах (значение меньше единицы, но больше нуля).

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (4.10)$$

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

Результаты по расчету интегрального показателя ресурсоэффективности представлены в таблице 4.5.1.

Таблица 4.5.1 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп. 3
1. Повышение производительности	0,15	5	4	4
2. Энергоэкономичность	0,15	4	4	4
3. Достоверность	0,20	5	4	4
4. Простота использования	0,25	5	3	4
5. Надежность	0,25	5	3	4
ИТОГО:	1	4,8	3,6	4

$$I_{\text{рисп.1}} = 5 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,20 + 5 \cdot 0,25 + 5 \cdot 0,25 = 4,85;$$

$$I_{\text{рисп.2}} = 4 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,20 + 3 \cdot 0,25 + 3 \cdot 0,25 = 3,5;$$

$$I_{\text{рисп.3}} = 4 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,20 + 4 \cdot 0,25 + 4 \cdot 0,25 = 4.$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{исп.i}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исп.1} = \frac{I_p^{исп.1}}{I_\phi^{исп.1}} = \frac{4,85}{0,9} = 5,4$$

$$I_{исп.2} = \frac{I_p^{исп.2}}{I_\phi^{исп.2}} = \frac{3,5}{1} = 3,5$$

$$I_{исп.3} = \frac{I_p^{исп.3}}{I_\phi^{исп.3}} = \frac{4}{0,99} = 4,04$$

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

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}} = \frac{5,4}{3,5} = 1,54$$

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.3}} = \frac{7,04}{3,72} = 1,34$$

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволяет понять и выбрать более эффективный вариант решения поставленной в бакалаврской работе технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности. Наглядно данное сравнение представлено в таблице 4.5.2.

Таблица 4.5.2 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп. 3
1	Интегральный финансовый показатель	0,9	1	0,99
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности	4,85	3,5	4
3	Интегральный показатель эффективности	<u>5,4</u>	3,5	4,04

4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,54	0,64	0,74
		1,34	0,86	1,15

При оценке сравнительной эффективности методов определения можно сделать вывод, что настоящий проект, использующий в качестве инструмента спектрофотометрический определения 2,6 - диметоксифенола, является более ресурсоэффективным, чем конкурентные методики: тонкослойная хроматография (ТСХ) и высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ).

Список публикаций

1. Чернова (Асташкина) А. П., Самочернова А. П., Шорманов В. К., Цацуа Е. П. Спектрофотометрическое определение 2,6-диметоксигидроксибензола в субстанции и биологическом материале // Научные исследования в области медицины и фармакологии: сборник научных трудов по итогам Международной научно-практической конференции, Саратов, 25 Апреля 2017. - Саратов: СГУ, 2017 - С. 58-61.
2. Самочернова А. П. , Чернова (Асташкина) А. П. , Шорманов В. К. Идентификация 2,6-диметоксигидроксибензола методом УФ-спектрофотометрии // Современные проблемы химической науки и фармации: сборник материалов VI Всероссийской конференции с международным участием, Чебоксары, 23-24 Ноября 2017. - Чебоксары: ЧГУ, 2017 - С. 104-106.
3. Самочернова А. П., Чернова (Асташкина) А. П. Идентификация 2,6-диметоксигидроксибензола методом УФ-спектрофотометрии // Химия и химическая технология в XXI веке имени профессора Кулева: сборник материалов конференции с международным участием, Томск, 29-30 Мая 2017. - Томск: ТПУ, 2017.
4. Самочернова А. П., Чернова (Асташкина) А. П. Изучение хроматографического поведения 2,6-диметоксифенола.// Химия и химическая технология в XXI веке имени профессора Кулева: сборник материалов конференции с международным участием, Томск, 21-23 Мая 2018. - Томск: ТПУ, 2018.