

Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки 19.04.01 Биотехнология, профиль Биотехнология
 Научно-образовательный центр Н.М. Кижнера

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Синтез и исследование физико-химических свойств гетероарилдiazоний камфорасульфонов

УДК 547.55:547.057

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ДМ81	Медиев Дамир Саматович		08.06.2020

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
профессор НОЦ Н.М. Кижнера	Краснокутская Е.А.	д.х.н., профессор		09.06.2020

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Спицына Л.Ю.	к.э.н.		22.05.2020

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Романцов И.И.	к.т.н.		16.05.2020

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ООП 19.04.01 Биотехнология	Чубик М.В.	к.м.н., доцент		09.06.2020

Планируемые результаты обучения
по ООП 19.04.01 «Биотехнология» (магистр)
профиль «Биотехнология»

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
Р1	Профессионально эксплуатировать современные биотехнологические производства, обеспечивая их высокую эффективность и безопасность
Р2	Разрабатывать и внедрять новые биотехнологические процессы и оборудование в рамках проектирования новых и усовершенствования действующих производств
Р3	Проводить теоретические и экспериментальные исследования в различных областях прикладной биотехнологии
<i>Универсальные компетенции</i>	
Р4	Ставить и решать задачи инженерного анализа для создания инновационных биотехнологических процессов и продуктов
Р5	Эффективно организовывать и участвовать в работе коллективов, в том числе международных, демонстрировать ответственность за результаты инженерной деятельности
Р6	Демонстрировать глубокие знания социальных, этических и правовых аспектов инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах устойчивого развития
Р7	Постоянно повышать интеллектуальный и общекультурный уровень и профессиональную квалификацию, способствовать обучению персонала

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки 19.04.01 Биотехнология, профиль Биотехнология
 Научно-образовательный центр Н.М. Кижнера

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП 19.04.01 Биотехнология
 _____ Краснокутская Е.А.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

магистерской диссертации

Студенту:

Группа	ФИО
4ДМ81	Медиеву Дамиру Саматовичу

Тема работы:

Синтез и исследование физико-химических свойств гетероарилдiazоний камфорасульфонов	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	02.03.2020 г. № 62-53/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	08.06.2020 г.
--	---------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(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.).</i></p>	<p><i>Объектом исследования являются 1-окситиридин diazonий камфорасульфонов</i></p>
---	--

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> • Обзор литературы • Объект и методы исследования • Описание экспериментальной части • Результаты проведенного исследования • Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение • Социальная ответственность • Заключение
<p>Перечень графического материала</p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	
<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</p> <p><i>(с указанием разделов)</i></p>	
<p>Раздел</p>	<p>Консультант</p>
<p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p>	<p>Спицына Л.Ю., доцент кафедры МЭН, к.ф.н.</p>
<p>Социальная ответственность</p>	<p>Романцов И.И., ассистент кафедры ЭБЖ, к.т.н.</p>
<p>Раздел на иностранном языке</p>	<p>Соколова Э.Я., Старший преподаватель.</p>

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	<p>22.02.2020 г.</p>
--	----------------------

Задание выдал руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель НОЦ им.Кижнера Н.М.	Краснокутская Е.А.	д.х.н., профессор		22.02.2020

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ДМ81	Медиев Дамир Саматович		22.02.2020

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
4ДМ81	Медиеву Дамиру Саматовичу

Школа	ИШНПТ	Отделение школы (НОЦ)	НОЦ Н.М. Кижнера
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	19.04.01 Биотехнология

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Стоимость сырья, материалов, комплектующих изделий и покупных полуфабрикатов, спецоборудования, затраты по статьям. Бюджет проекта - не более 550 тыс. руб
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Районный коэффициент – 1,3. Накладные расходы 16% премиальный коэффициент, коэффициент доплат и надбавок, заработная плата по тарифной ставке, Транспортно-заготовительные расходы Значение показателя интегральной ресурсоэффективности - не менее 0,9 баллов.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Расчетные величины материалов и сырья научно-технического проекта Упрощенная система налогообложения,

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	Доступность исходных продуктов, простота методики, селективность процесса, экологичность, скорость и время реакции, выход и чистота полученного продукта.
2. Разработка устава научно-технического проекта	Определение целей и результатов проекта, организационной структуры проекта
3. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	Расчет основной заработной платы, баланс рабочего времени, общая стоимость оборудования и материалов
4. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Удобство в эксплуатации, материалоемкость, надежность, энергосбережение, помехоустойчивость

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. «Портрет» потребителя результатов НТИ
2. Сегментирование рынка
3. Оценка конкурентоспособности технических решений
4. Диаграмма FAST
5. Матрица SWOT
6. График проведения и бюджет НТИ
7. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ
8. Потенциальные риски

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	02.03.2020
--	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Спицына Л.Ю	К.т.н., доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ДМ81	Медиев Дамир Саматович		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
4ДМ81	Медиеву Дамиру Саматовичу

Школа	ИШНПТ	Отделение (НОЦ)	НОЦ им. Н.М. Кижнера
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	19.04.01 Биотехнология

Тема ВКР:

Синтез и исследование физико-химических свойств гетероарилдiazоний камфорасульфонов

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения.	<p>Объектом исследования является новый класс солей diazonия, они являются важными соединениями для синтеза биологически активных веществ и лекарственных средств в фармацевтической области и в производстве красителей. А также в тонком органическом синтезе.</p> <p>Работа проводилась в лаборатории Научнообразовательного центра Н.М. Кижнера ТПУ.</p> <p>Рабочая зона исследователя была оборудована вентиляцией. Аудитория оборудована вытяжными шкафами с принудительной вентиляцией, электрооборудованием и различными нагревательными приборами.</p> <p>Область применения:</p> <p>Соли diazonия применяются в тонком органическом синтезе, производстве лекарственных средств и производстве красителей.</p>
---	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:	<p>1.Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 16.12.2019)</p> <p>2.ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.</p> <p>3.ГОСТ 12.0.003-2015 ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.</p> <p>4.Федеральный закон от 22.07.2008 N 123-ФЗ "Технический регламент о требованиях пожарной безопасности".</p> <p>5.ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов.</p> <p>6.ГОСТ 12.1.018-93. Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Пожаровзрывобезопасность статического электричества. Общие требования.</p> <p>7.ГОСТ Р 55090-2012. Ресурсосбережение. Обращение с отходами. Рекомендации по утилизации отходов бумаги.</p>
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<p>Анализ вредных факторов:</p> <p>1.1 Повышенный уровень шума (Источником являются насосы вентиляционной системы и компрессоры. Уровень шума не превышает допустимый уровень звука в 75дБ [ГОСТ 12.1.003–83 ССБТ. Шум]).</p> <p>1.2 Отклонение показателей микроклимата в помещении (Согласно нормативному документу [СанПиН 2.2.4.548–96.] описанная работа относится к категории IIa (работы с</p>

	<p>интенсивностью энергозатрат 151-200 Вт). Поэтому в лабораторных помещениях создаются оптимальные микроклиматические условия для нормального функционального состояния человека)</p> <p>1.3 Недостаточная освещенность рабочей зоны (Для предотвращения воздействия данного фактора, помещение лаборатории и рабочее место оснащается искусственным освещением, с соответствием норм. Коэффициент естественной освещенности для химической лаборатории равен 2,1%. Нормальная искусственная освещенность – не менее 400 люкс[СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03])</p> <p>1.4 Повышенный уровень электромагнитных излучений (Источником излучений является компьютер. Согласно нормативному документу [СанПиН 2.2.4/2.1.8.055-96], продолжительность работы с компьютером не должно превышать 1 ч.)</p> <p>1.5 Утечка токсичных и вредных веществ в атмосферу (Вредными факторами являются пары летучих используемых реагентов (трифторметансульфокислота (II)) и растворителей (дихлорметан (IV), этилацетат (IV)) [ГОСТ 12.1.007–76 ССБТ] Вредные вещества</p> <p>1.6 Психофизиологические опасные и вредные производственные факторы такие как физические перегрузки и нервно-психические перегрузки. ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация</p> <p>1.7 Предусмотрены следующие меры предосторожности: работу вели в вытяжном шкафу с вентиляцией, применялись средства индивидуальной защиты: халат, перчатки, респиратор.).</p> <p>Анализ опасных факторов:</p> <p>1.1 Механические повреждения (Источником опасности в виде движущихся механизмов могут быть оборудование ГХ-МС, ротационный испаритель, центрифуга и экран вытяжного шкафа. Необходимо соблюдать правила техники безопасности и не отвлекать внимание при их эксплуатации)</p> <p>1.2 Термические опасности (Источником служит электрическая плитка и сухожаровый (сушильный) шкаф. Для предотвращения ожогов необходимо использовать специальные ухваты и защитные перчатки).</p> <p>1.3 Электробезопасность (Для научной работы применялись электрическое оборудование: электр.плитка, роторный испаритель, сушильный шкаф и т.д. Необходимо соблюдать все меры предосторожности и проверять исправность оборудования.)</p> <p>1.4 Пожаровзрывоопасность (Источниками и причинами пожаров и взрывов на рабочем месте при выполнении работ являются: электрический ток и неосторожное обращение с легковоспламеняющимися веществами)</p>
--	---

<p>3. Экологическая безопасность:</p>	<p>В химической лаборатории воздействие на окружающую среду оказывается в основном за счет отходов (сливы растворителей, тары от реактивов, мытье посуды). Выбросы в атмосферу минимизированы хранением легковолетучих веществ в герметичной таре.</p> <p>Утилизация лабораторных отходов может включать в себя различные этапы и процедуры, в зависимости от типа перерабатываемых веществ.</p> <p>В зависимости от специфики работы той или иной лаборатории, это может быть переработка ТБО или отходов с низким потенциалом опасности, не требующая сложных манипуляций и подразумевающая организацию сбора, правильного хранения и сжигания, как наиболее простого и доступного метода утилизации, или же работа с потенциально опасными веществами, требующими предварительного обезвреживания и соблюдения множества норм и предписаний.</p> <p>Утилизация отработанных ртутных ламп проходит в соответствии с Правилами обращения с отходами производства и потребления в части осветительных устройств, электрических ламп. Инструкция по обращению с отходами 1 класса опасности «Ртутные лампы, люминесцентные ртутьсодержащие трубки отработанные и брак».</p>
<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</p>	<p>Возможные ЧС в химической лаборатории в ходе проведения научного исследования: утечка в атмосферу токсичных и опасных веществ, пожар.</p> <p>Для лаборатории типичной ЧС является пожар в результате неправильного эксплуатирования, хранения легковоспламеняющихся веществ и растворителей (ацетон, дихлорметан и т.д), а также в результате короткого замыкания (неисправность электрооборудования).</p> <p>Перед допуском к работе с установкой проводится первичный инструктаж по технике безопасности, электробезопасности и первой помощи.</p> <p>В случае пожара предусмотрены первичные средства пожаротушения: огнетушители ОХП-10 и ОУ-5 для тушения электрооборудования.</p> <p>В случае сильного пожара проводится эвакуация людей согласно плану эвакуации из лаборатории НОЦ Н.М. Кижнера ТПУ.</p>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	02.03.2020
--	------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Романцов И.И.	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4ДМ81	Медиев Дамир Саматович		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа состоит из 109 стр., 29 схем, 8 рис., 33 табл., 23 источника, приложения А.

Ключевые слова: соли пиридиндиазония, диазотирование, пиридин, N-оксиды пиридина, соли 1-оксидопиридиндиазония камфорасульфонов, камфорасульфонаты.

Объектом исследования являются: 1-оксидопиридиндиазоний камфорасульфонаты.

Цель работы – синтез солей диазония камфорасульфонов и исследование их физико-химических свойств.

Для достижения этой цели были поставлены следующие задачи:

1. Разработка метода синтеза ряда 1-оксидопиридиндиазоний камфорасульфонов.
2. Экспериментальное описание их строения современными физико-химическими методами анализа (ЯМР-спектроскопия, ИК-спектроскопия, Масс-спектрометрия).
3. Исследование реакционной способности солей 1-оксидопиридиндиазоний камфорасульфонов в реакциях азидирования, C-C-сочетания.
4. Оценка себестоимости проведения научного исследования
5. Разработка мероприятий по охране труда и экологической безопасности.

В процессе работы осуществлялись: синтез, установление структуры, исследование физических свойств и реакционной способности солей 1-оксидопиридиндиазония камфорасульфонов.

В результате были получены новые соединения 1-оксидопиридиндиазоний камфорасульфонаты.

Область применения: производство красителей, тонкий органический синтез.

Определения, обозначения, сокращения и нормативные ссылки

Сокращения:

ЯМР – ядерный магнитный резонанс

ГХ-МС – газовая хроматография–масс-спектрометрия

ИК – инфракрасная спектроскопия

АсОН – уксусная кислота

DCM – дихлорметан

t-BuONO – трет-бутилнитрит

Нормативные ссылки

В настоящей работе использованы ссылки на следующие стандарты:

1. Трудовой кодекс Российской Федерации" от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019)
2. ГОСТ 12.1.007-76 ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.
3. ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация».
4. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
5. ГН 2.2.5.3532–18. Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе рабочей зоны.
6. СН 2.2.4/2.1.8.562–96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки.
7. ГОСТ 12.1.029-80 ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация.
8. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*
9. ГОСТ Р 22.3.03-94. Безопасность в ЧС. Защита населения. Основные положения.
10. ГОСТ 17.1.3.06-82. Охрана природы. Гидросфера. Общие требования к охране подземных вод.
11. ФЗ от 24.06.1998 N 89-ФЗ (ред. от 25.12.2018) "Об отходах производства и потребления".
12. ГОСТ Р 22.0.01-2016. Безопасность в ЧС. Основные положения.
13. «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» от 22.07.2008 N 123-ФЗ
14. ГОСТ ИЕС 61140-2012. Защита от поражения электрическим током. Общие положения безопасности установок и оборудования (с Поправкой)

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	14
Раздел 1 «Синтез и исследование физико-химических свойств гетероарилдiazоний камфорасульфонов.» (литературный обзор).....	15
1.1 Арилдiazоний п-толуолсульфонаты	16
1.2 Арилдiazоний п-додецилбензолсульфонаты	19
1.3 Арилдiazоний трифторметансульфонаты.....	21
1.4 Арилдiazоний камфорасульфоноваты	26
1.5 Гетероароматические соли diaзония пиридинового строения	27
Раздел 2 Объект и методы исследования	30
Раздел 3 Экспериментальная часть.....	31
3.1 Общая методика синтеза N-оксидов аминопириндов.	31
3.2 Общая методика синтеза N-оксидов аминопириндов с защитой аминогруппы.	31
3.3 Общая методика синтеза 1-оксипиридин-diazоний камфорасульфоновата.	32
3.4 Реакция азидирования 1-оксипиридиндiazоний камфорасульфоноватов	32
3.5 Общая методика синтеза 1-оксипиридинтриазенов камфорасульфоноватов	33
3.6 Реакция C-C-сочетания Соногашеры 1-оксипиридиндiazоний камфорасульфоноватов с фенилацетиленом.....	34
Раздел 4 Результаты проведенного исследования	35
Раздел 5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	42
5.1 Предпроектный анализ	42
5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования	42
5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	44
5.1.3 Диаграмма Исикавы.....	46
5.1.4 SWOT – анализ	47
5.1.5. Оценка готовности проекта к коммерциализации	49
5.1.6. Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	51
5.2. Инициация проекта	51
5.3. Планирование управления научно – техническим проектом.....	54
5.3.1 Иерархическая структура работ проекта.....	54
5.3.2. Контрольные события проекта	55
5.3.3. План проекта	56
5.3.4. Бюджет научного исследования	58
5.3.5 Реестр рисков проекта	66
5.4. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	66
5.4.1 Оценка сравнительной эффективности исследования.....	66
Раздел 6 Социальная ответственность.....	70

6.1. Введение	70
6.2. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	70
6.2.1. Мероприятия по компоновке рабочей зоны	71
6.3. Производственная безопасность.....	72
6.4. Анализ вредных и опасных производственных факторов	72
6.5. Обоснование мероприятий по снижению уровней воздействия опасных и вредных факторов на исследователя.	74
6.5.1. Микроклимат и отклонение показателей микроклимата	74
6.5.2. Характеристика вредных веществ.....	75
6.5.3. Шум.....	77
6.5.4. Освещение в лабораторном помещении.....	78
6.5.5.Повышенный уровень электромагнитных излучений.....	81
6.5.6 Электробезопасность	82
6.5.7 Термические опасности	84
6.5.8 Механические повреждения	84
6.6 Экологическая безопасность	85
6.6.1. Защита селитебной зоны	85
6.6.2. Защита атмосферы.....	85
6.6.3. Защита гидросферы	85
6.6.4. Защита литосферы	86
6.6.5. Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	87
6.7. Вывод.....	89
Выводы.....	90
Список публикаций студента	91
Список источников:	92
ПРИЛОЖЕНИЕ А	95

Введение

Ароматические соли диазония представляют большую практическую значимость. Они являются хорошими строительными блоками в органическом синтезе. Группа N_2 легко заменяется различными заместителями. Однако они являются крайне нестабильными соединениями, плохо растворимы и взрывоопасны.

Одним из возможных способов стабилизации солей диазония пиридинового – снижение электроноакцепторного влияния азота цикла. Это может быть достигнуто формированием связи N-O, т.е. предварительное получение аминопиридин-1-оксидов. При этом известно несколько примеров успешной реализации этого приема. Несмотря на это, практически отсутствует информация о физико-химических особенностях пиридиниевых солей диазония.

Целью нашей работы является синтез пирилдиазоний камфорасульфонов и исследование их физико-химических свойств.

Научная новизна работы:

1. Впервые синтезированы ранее неизвестные гетероарилкамфоросульфонаты. Современными физико-химическими методами надежно установлена их структура.

Практическая значимость

1. Разработан удобный и эффективный метод синтеза гетероарилкамфоросульфонов из коммерчески доступных аминопиридинов под действием $t\text{-BuONO}_2$ в присутствии камфоросульфокислоты.

Раздел 1 «Синтез и исследование физико-химических свойств гетероарилдiazоний камфорасульфонов.» (литературный обзор)

Реакция диазотирования – это взаимодействие ароматических или гетероароматических аминов с азотистой кислотой с образованием ароматической (гетероароматической) соли диазония. Реакция открыта в 1858 г. Петером Гриссом. Соли диазония являются важными строительными блоками современного органического синтеза, диазотирование – одна из ключевых стадий технологии получения красителей. Основным недостатком традиционных солей диазония – хлоридов, сульфатов, фосфатов – является их нерастворимость в органических средах и взрывоопасность в сухом состоянии. При этом известно, что арилсульфокислоты оказывают положительное влияние на стабильность солей диазония [1]. Так, было установлено, что при добавлении сульфокислот в диазотатный раствор, образуются осадки, которые можно отфильтровать и хранить в течение длительного времени. При этом, они не теряют способности растворяться в воде и вступают в реакции, характерные для солей диазония [2].

В НОЦ Н.М. Кижнера Национального исследовательского Томского политехнического университета разработан уникальный класс ароматических солей диазония – арендиазоний сульфонаты (тозилаты, трифлаты, п-додецилбензолсульфонаты).

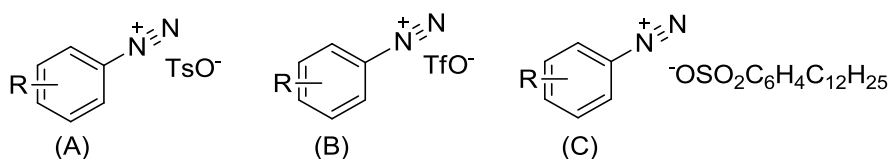


Схема 1. Тозилаты(А), Трифлаты(В) и п-додецилбензолсульфонаты(С)

Есть примеры работ, в которых соли диазония не сразу выделяли в индивидуальном виде, соль сразу вступала в реакцию с KI без выделения из водной пасты [3]. Схожая растворимость образующихся тозилатов арендиазония и TsONa усложняет их разделение и создает нежелательные проблемы с выделением солей диазония во время процесса очистки. Однако долгое время не существовало надежных методов получения солей диазония.

1.1 Арилдиазоний п-толуолсульфонаты

В работе [4] впервые опубликованы результаты по диазотированию широкого ряда анилинов в присутствии *n*-толуолсульфокислоты под действием нитрозирующего агента полимерной природы (Схема 2).

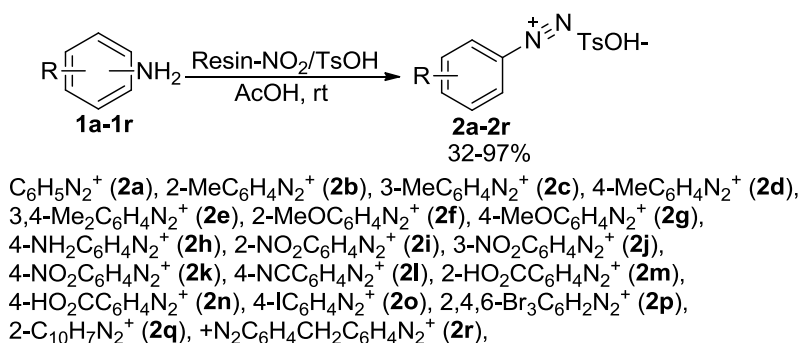
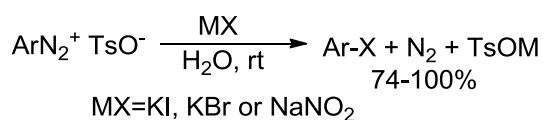
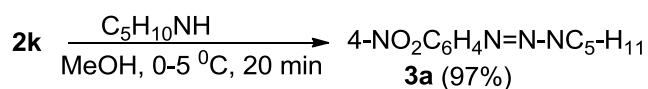


Схема 2

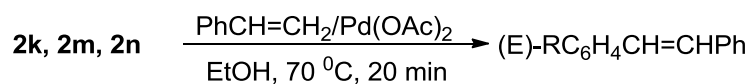
Нитрозирующий агент получали путем ионного обмена водного раствора NaNO_2 с пористой смолой гидроксида тетраметиламмония AV-17-86 или Amberlyst A26. Структура синтезированных солей диазония установлена с использованием ИК-, ЯМР-спектроскопии, а также рентгено-структурного анализа. В отличие от традиционных арендиазоний хлоридов, сульфатов арендиазонийтозилаты хорошо растворимы в органических растворителях, в отличие от арилдиазоний тетрафторборатов – в воде. Кроме того, арендиазоний тозилаты проявили уникальную для солей диазония устойчивость при хранении и взрывобезопасность (ДТА-ДСК-ТГА). При этом все синтезированные соединения демонстрировали типичное для солей диазония химическое поведение (Схема 3).



(A)



(B)



R= 4-NO₂; **4a** (75%), 2-CO₂-H; **5a** (65%), 4-CO₂H: **6a** (67%)

(C)

Схема 3

Кроме реакции азосочетания они эффективно реагируют при комнатной температуре с KI, KBr или NaNO₂ в воде, давая соответствующие продукты нуклеофильного замещения с высокими выходами (схема 2 (A), таблица 1.1).

Таблица 1.1 Результаты реакции тозилатов арендиазония с нуклеофильными реагентами при комнатной температуре в воде.

Соль	Реагент	Время, min	Продукт, выход (%)
2g	KI	30	<i>p</i> -MeOC ₆ H ₄ I, 80
2h	KI	50	<i>p</i> -NH ₂ C ₆ H ₄ I, 100
2i	KI	10	<i>o</i> -NO ₂ C ₆ H ₄ I, 97
2k	KI	5	<i>p</i> -NO ₂ C ₆ H ₄ I, 98
2l	KI	20	<i>p</i> -NCC ₆ H ₄ I, 64
2m	KI	200	<i>o</i> -HO ₂ CC ₆ H ₄ I, 93
2n	KI	240	<i>p</i> -HO ₂ CC ₆ H ₄ I, 91
2p	KI	10	2,4,6-Br ₃ C ₆ H ₂ I, 97
2k	KBr	60	<i>p</i> -NO ₂ C ₆ H ₄ Br, 80
2l	KBr	100	<i>p</i> -NCC ₆ H ₄ Br, 74
2k	NaNO ₂	30	<i>p</i> -(NO ₂)C ₆ H ₄ , 74

На примере *n*-нитробензолдиазоний тозилата **2k** показана возможность образования триазенов (Схема 3 (B)). Соли **2k**, **2m** и **2n** были эффективно использованы в палладий катализируемой реакции кросс-сочетания по типу Хека (Схема 3 (C)).

В настоящее время арилдiazоний тозилаты широко используются в органическом синтезе. Так на их основе разработаны удобные и эффективные методы диазотирования-иодирования ароматических и активированных гетероароматических аминов в слабокислотных средах [5] (Схема 4), в воде [6, 7] и водных пастах [3], с использованием новых, эффективных диазотирующих агентов на полимерной основе [4, 6]. Надежность этих синтетических процедур подтверждается цитированием работ [4, 5] в последней редакции (2020 г.) 4-х томного издания «Органическая химия Марча» [8].

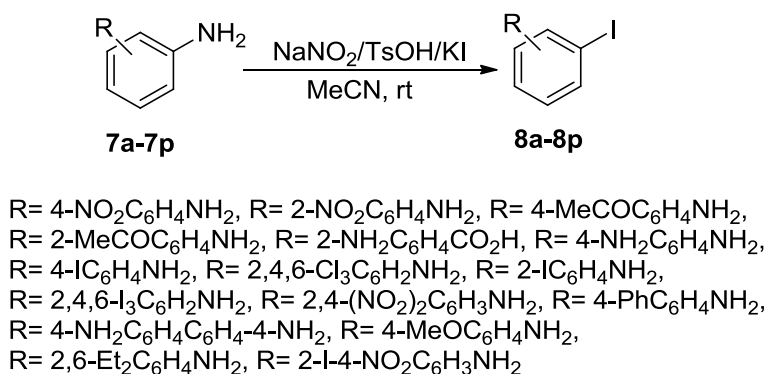


Схема 4

Было показано, что арилдiazоний тозилаты могут быть успешно использованы в кросс-сочетании по типу Мацуда – Хека.

Реакция проходила в воде [9] при температуре 75°C при микроволновом облучении (Схема 5).

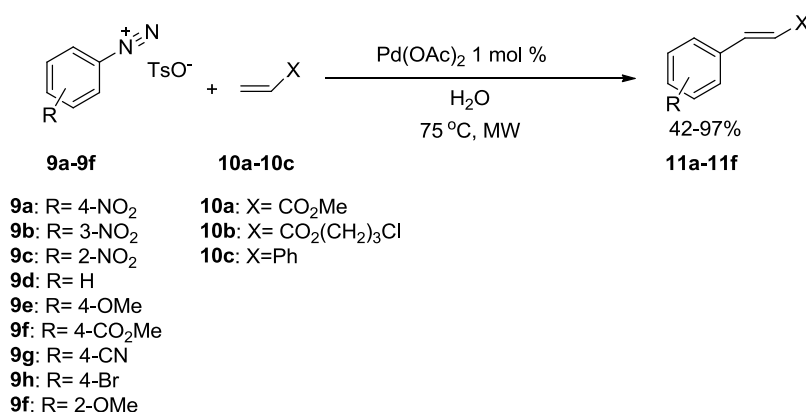


Схема 5

В работе [10] показана возможность использования арилдiazоний тозилатов в реакции кросс-сочетания по типу Сузуки – Мияура при комнатной температуре с хорошими выходами (Схема 6, Таблица 1.2).

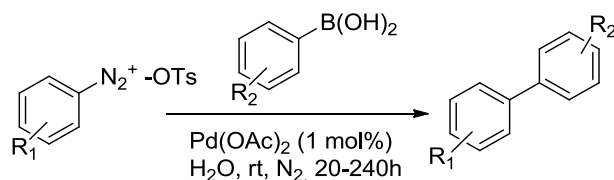


Схема 6

Таблица 1.2 Сочетание Сузуки – Мияура аренидiazониевых тозилатов с арилбороновыми кислотами.

ArN ₂ ⁺ OTs ⁻	ArB(OH) ₂	Время (ч)	Выход(%)
4-NO ₂	H	72	60
4-NO ₂	H	72	72
2-NO ₂	H	12	76
H	H	48	81
4-CO ₂ Et	H	48	54
2-CO ₂ Me	H	16	58
4-NO ₂	4-MeO	20	67
4-NO ₂	4-CHO	240	42
4-NO ₂	2-CHO	72	68
4-NO ₂	2-CHO	72	81
4-NO ₂	2-CHO	72	91
4-NO ₂	1-naphthyl	20	60
4-NO ₂	2-Me	16	86
2-Br	H	24	65
2-MeO	H	72	88
4-Br-2-F	H	72	30
4-F-2-Br	H	30	24

1.2 Арилдiazоний п-додецилбензолсульфонаты

Соли дiazония хорошо растворимы в полярных растворителях (вода, AcOH, ДМСО, ДМФА, MeCN). Авторами работы [11] предложен метод синтеза ранее неизвестных арилдiazоний *n*-додецилбензолсульфонатов (Схема 7).

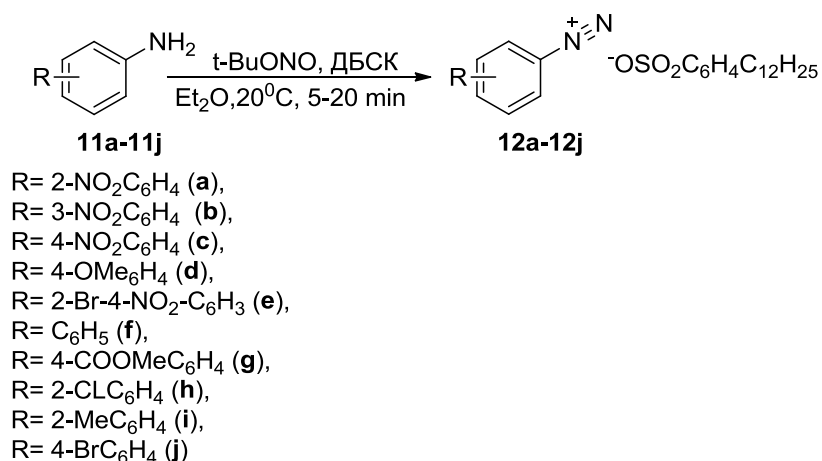


Схема 7

Уникальность этих солей диазония заключается в способности растворяться в малополярных средах (бензоле, CCl₄ и CHCl₃). Кроме того, как и арилдiazоний тозилаты, они могут храниться в темноте при комнатной температуре в течение нескольких недель, не показывая признаков разложения. Их экзотермические энергии разложения существенно ниже 800 Дж/г⁻¹, поэтому арилдiazоний п-додецилбензолсульфонаты можно классифицировать как не взрывоопасные вещества.

Уникальное свойство солей п-додецилбензолсульфонатов быть растворимыми в неполярных растворителях открывает новые возможности в химии солей диазония. Так, было показано, что под действием триэтиламина арилдiazоний п-додецилбензолсульфонаты проявляют нетипичные для известных diaзонииевых солей свойства, подвергаясь хлоредиазонированию в среде CCl₄ до ArCl+N₂, или восстанавливаясь в хлороформе до ArH+N₂ (Схема 8) [12].

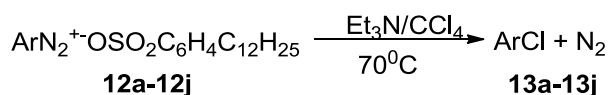


Схема 8

1.3 Арилдiazоний трифторметансульфонаты

Арилдiazоний трифторметансульфонаты могут быть получены разложением триазенов при медленном добавлении TfOH к холодному AcOEt раствору, затем осаждая эфиром [13] (Схема 9).

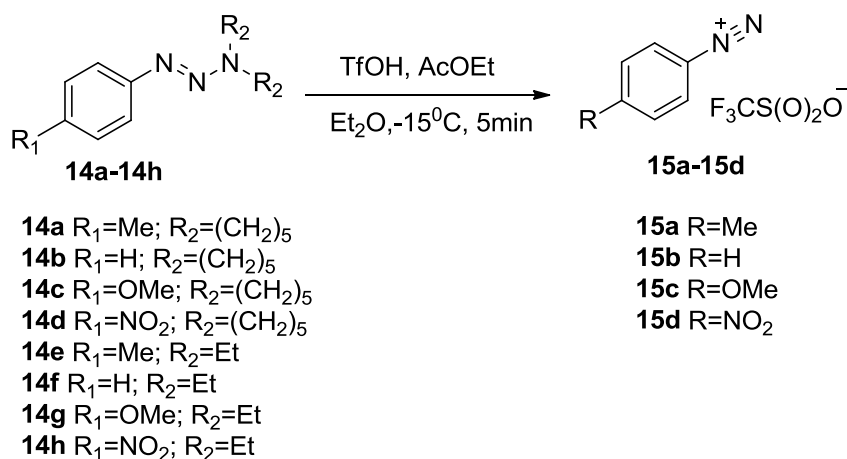


Схема 9

Недавно предложен эффективный метод синтеза широкого ряда арилдiazоний трифлатов: анилин и производные анилина подвергаются диазотированию в системе с t-BuONO/TfOH в растворе уксусной кислоты при 10–15°C с получением соответствующих солей **16a** – **16l** с высоким выходом (Схема 10) [14].

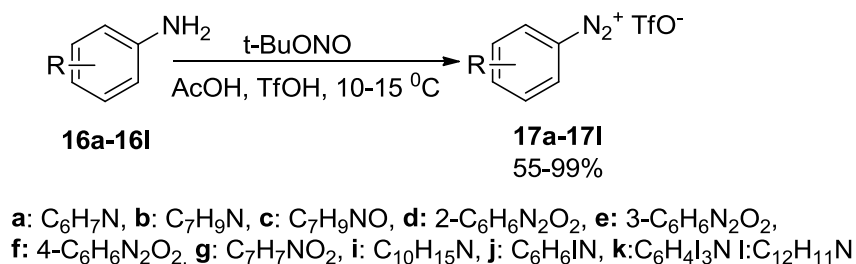


Схема 10

Все изученные соли экзотермически разлагаются с выделением азота в интервале температур 84,5–143,3°C. Энергия разложения были ниже 800 J/g, за исключением соли **17f**. Таким образом, в соответствии с критериями безопасности UNECE соли **17a,e,g,l** относятся к группе соединений, которые разрешается безопасно транспортировать [15].

Показано, что арилдiazоний трифлаты легко растворяются в воде и органических растворителях, таких как ДМСО, MeOH, EtOH, AcOH, MeCN при комнатной температуре, а также в CH₂Cl₂, CHCl₃ при нагревании.

Очевидно, что множественные сходства RSO₃[–] и N–N-фрагментов между сульфоновой группой противоионов тозилата *p*-IC₆H₄N₂⁺OTs[–] (**2o**) и трифлата *p*-IC₆H₄N₂⁺OTf[–] (**17i**) может объяснить относительную стабильность тозилатов арендiazония и трифлатов арендiazония в сухом твердом состоянии.

Однако следует отметить, что длина связи C–N в трифлатном катионе 4-йодбензол diaзоний трифторметансульфоната (**17i**) значительно длиннее, чем для тозилата 4-йодбензолдiazония (1.405 против 1.371 и 1.385 Å). Что указывает на более низкую прочность связей C–N в трифлатах и, следовательно, более высокую реакционную способность в реакциях расщепления N₂ по сравнению с тозилатами арендiazония.

В ходе исследований была изучена реакционная способность арилдiazониевых трифлатов в отношении KI, NaN₃ и B₂(OH)₄ (Схема 11).

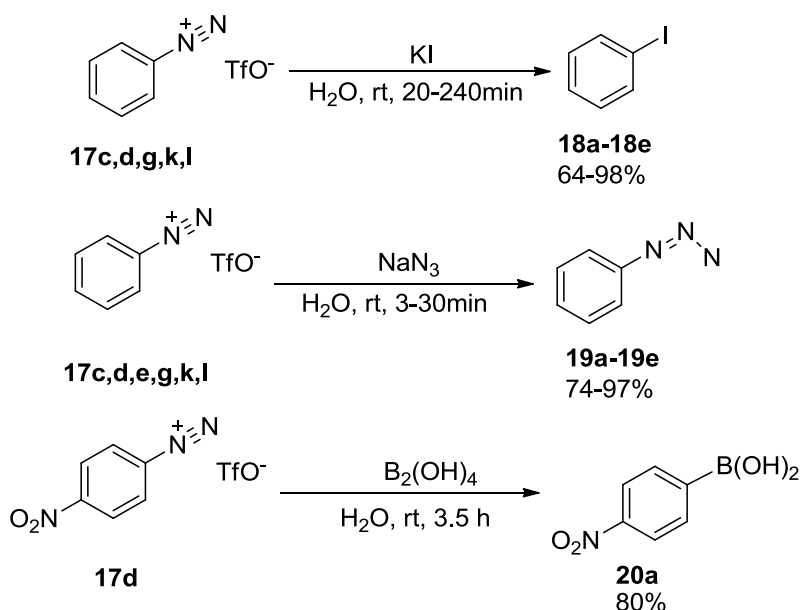


Схема 11

Трифлаты легко и быстро реагировали с KI и NaN₃ в водном растворе при комнатной температуре с образованием арилиодидов **18a** – **18e** и арилазидов **19a** – **19f** с высоким выходом.

Было обнаружено, что арилдiazониевые трифлаты **17c**, **17d** и **17g** легко реагируют со стиролом в присутствии $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ при нагревании в этаноле с получением высоких выходов **21a** – **21c** (Схема 12).

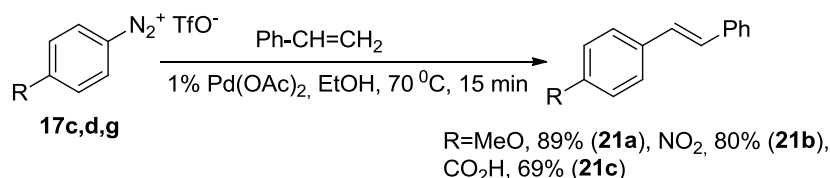


Схема 12

Трифлаты **17c** и **17d** также могли легко подвергаться гомосочетанию путем нагревания в растворе MeOH в присутствии $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ с получением симметричных бифенилов **22a** и **22b** (Схема 13).

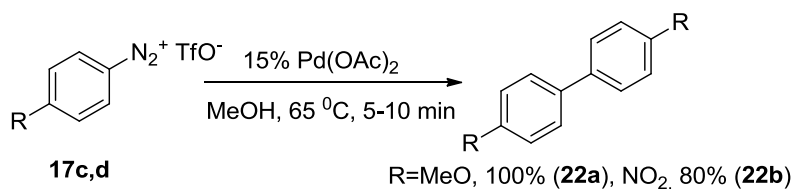


Схема 13

Недавно в работе [16] был предложен новый подход к определению устойчивости солей диазония с использованием метода изотермической поточной калориметрии. Было проведено сравнение стабильности солей трифлатов, тозилатов и тетрафторборатов

В данных исследованиях впервые определили термодинамику и кинетику термического разложения солей трифлатов, тозилатов и тетрафторборатов.

Показало, что при 75°C максимальные значения теплового потока (P_{max}), практически не зависят от типа соли диазония. Однако, значения P_{max} , полученные для трифлатной соли диазония при 80 и 85°C, значительно выше, чем значения у соли тозилата и тетрафторбората (Таблица 1.3, Рисунок. 1.1).

Таблица 1.3. Интегральная энтальпия и максимальные значения теплового потока, обнаруженные при изотермическом разложении диазониевых солей.

Соль диазония	ΔH , kJ/mol			P_{\max} , mW/g		
	75 °C	80 °C	85 °C	75 °C	80 °C	85 °C
4-NO ₂ C ₆ H ₄ N ₂ ⁺ TfO ⁻ (Ia)	200	235,1	250	20,12	47,89	119,5
4-NO ₂ C ₆ H ₄ N ₂ ⁺ TsO ⁻ (Ib)	253	232,4	231	21,1	34,82	64,6
4-NO ₂ C ₆ H ₄ N ₂ ⁺ BF ₄ ⁻ (Ic)	173	156	147	20,02	31,63	66,87
ΔH -интегральная энтальпия						
P_{\max} -Максимальная величина теплового потока						

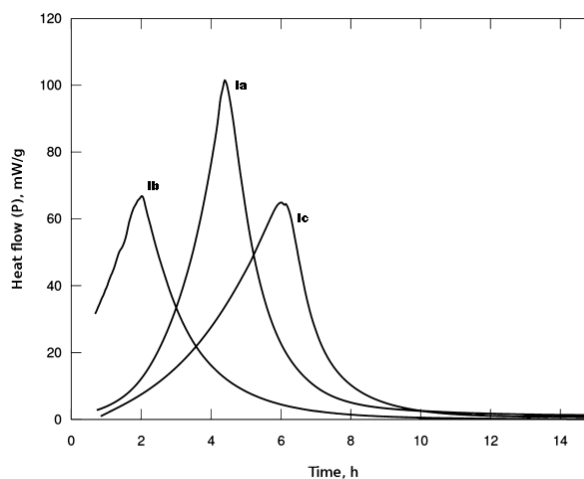


Рисунок 1.1 Тепловой поток (P) при изотермическом разложении солей 4-нитробензолдиазония: тетрафторбората **Ic**, тозилата **Ib** и трифлата **Ia** при 85°C.

Кривые теплового потока, описывают изотермическое разложение солей тетрафторбората **Ic**, тозилата **Ib** и трифлата **Ia** при 85°C. Как видно, период полураспада соли диазония зависит от противоиона: для тетрафторбората **Ic**, он составляет 2 часа, для тозилата **Ib** 4 часа, а для трифлата **Ia** 6 часов.

Анализ кинетических данных, полученных при различных температурах позволил найти кинетические параметры реакций разложения, протекающих при 25°C (Таблица 1.4).

Таблица 1.4 Рассчитанные кинетические параметры солей. Реакции разложения, происходящие при 25°C.

Соль диазония	$k_{298} \times 10^9, \text{ s}^{-1}$	$E_a, \text{ kJ/mol}$
4-NO ₂ C ₆ H ₄ N ₂ ⁺ TfO ⁻ (Ia)	4,45	173
4-NO ₂ C ₆ H ₄ N ₂ ⁺ TsO ⁻ (Ib)	48,91	131.7
4-NO ₂ C ₆ H ₄ N ₂ ⁺ BF ₄ ⁻ (Ic)	18,75	140.3
k_{298} - константа скорости при 298 К		
E_a - энергия активации, kJ/mol.		

На основе анализа кинетических данных был смоделирован процесс разложения солей на большой период времени (Рисунок 1.2).

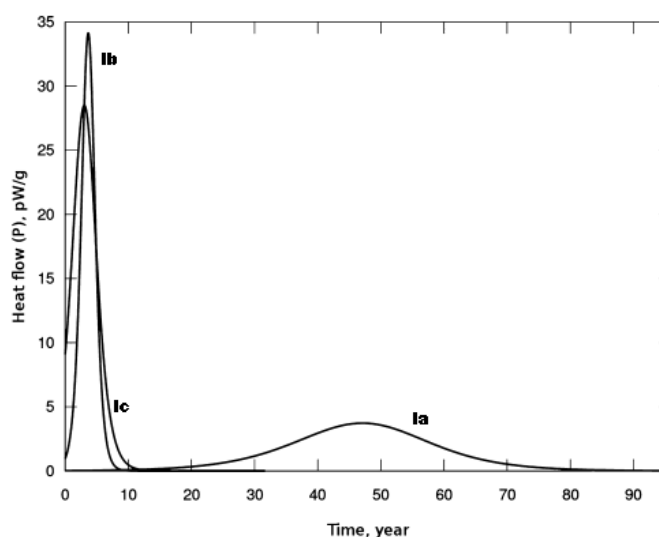


Рисунок 1.2 Тепловой поток (P) в зависимости от времени основанный на кинетических параметры реакций разложения, протекающих при 25°C для 4-нитробензолдиазония: тетрафторбората **Ic**, тозилата **Ib** и трифлата **Ia** при 25°C.

Таким образом, видно, что 4-нитробензолдiazоний тозилат **Ib** и тетрафторборат **Ia** имеют близкое время полураспада равным 4,5 года, тогда как 4-нитробензолдiazоний трифлат **Ia** гораздо более стабилен и период полураспада равен 46 лет и имеет значительно меньший максимальный тепловой поток.

1.4 Арилдiazоний камфорсульфонаты

Был получен ряд стабильных арилдiazониевых камфорсульфонатных солей путем диазотирования некоторых ароматических аминов в присутствии нитрита натрия и камфорсульфокислоты [17](Схема 13).

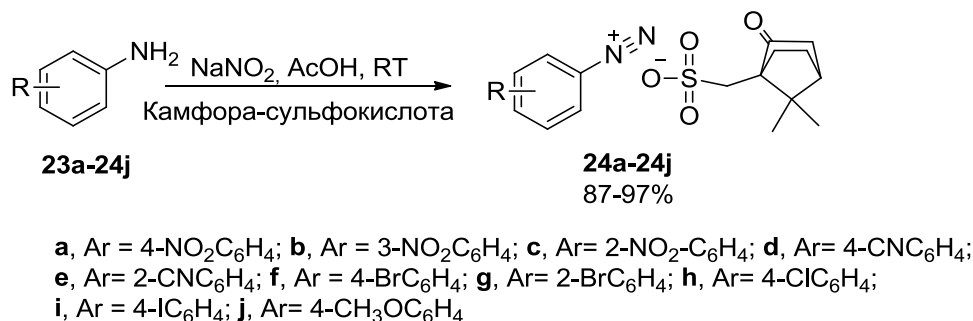


Схема 13

Анализ методом ДСК показал термостабильность этих солей. Соли растворялись в полярных, а также в неполярных растворителях, что определяет их как очень интересные соединения для различных органических реакций.

Реакционную способность арилдiazониевых камфорсульфонатных солей проверяли реакцией с KBr, в присутствии галогенида меди. Соли эффективно реагировали с KI при комнатной температуре, в растворителе или в условиях отсутствия растворителя с получением галогенированных продуктов с высокими выходами (Схема 14).

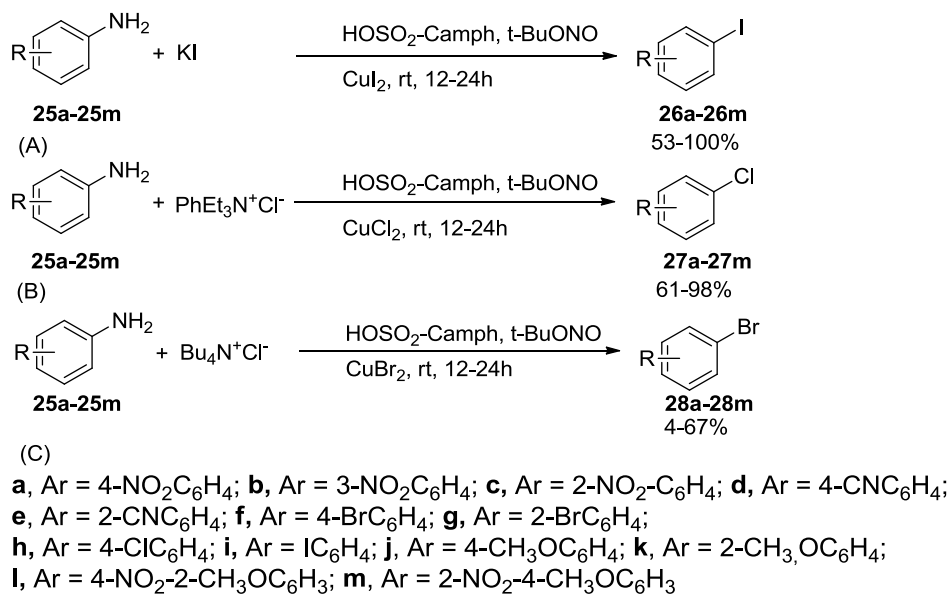


Схема 14

Кроме того, показано, что арилдiazоний камфорасульфонаты могут являться эффективными агентами расщепления ДНК. При добавлении 1,0 мМ соли diaзония наблюдается 100% активность расщепления ДНК, о чем свидетельствует полное исчезновение полос ДНК при электрофорезе.

Таким образом, можно констатировать, что арилдiazоний сульфонаты (тозилаты, трифлаты, камфорасульфонаты) - безопасные в работе, удобные при хранении, обладающие высокой растворимостью в воде и органических растворителях (полярных и малополярных), а также высокой химической активностью – являются не просто хорошей альтернативой, а в значительной степени превосходят по своим физико-химическим параметрам традиционные арилдiazоний хлориды, сульфаты и тетрафторбораты.

Однако, несмотря на высокий синтетический потенциал, ароматические соли diaзония, как строительные блоки органического синтеза значительно уступают гетероароматическим аналогам. В этой связи необходимо особенно отметить мало известные пиридин- и хинолиндiazониевые соли. Такой синтетический «пробел» традиционно объясняется неустойчивостью указанных солей за счет электроноакцепторного влияния азота цикла. При этом известно, что окисление пиридинов и хиналинов (N-оксидирование) приводит к снижению электроноакцепторного характера азота [18]. Этот прием был использован для получения некоторых пиридиндiazониевых солей.

1.5 Гетероароматические соли diaзония пиридинового строения

Было установлено что при diaзотировании 2-аминопиридин-N-оксид(**29a**) под действием системы $\text{NaNO}_2/\text{HBF}_4$ в воде при $-5-0^\circ\text{C}$ образуется соответствующая соль diaзония (**30a**) (Схема 18). Подобным образом может быть получена соль diaзония из 2-аминохинолин-N-оксида, 1-аминоизохинолин-N-оксида и 4-аминопиридин-N-оксида [19] (Схема 18).

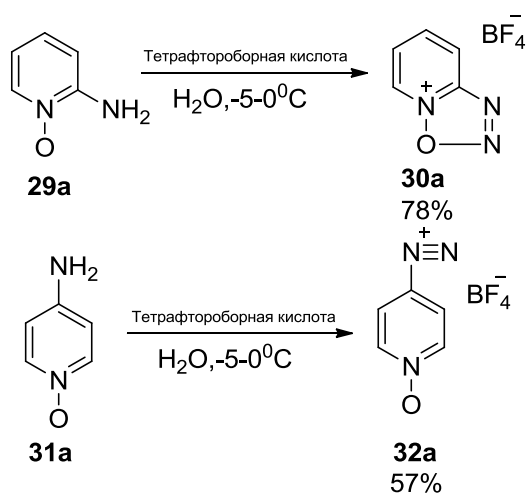


Схема 18

Полученные соли диазония относительно устойчивы, могут быть выделены в индивидуальном виде и использованы в дальнейших превращениях. Так, например, показана возможность использования N-оксидированных пиридиндиазоний тетрафторборатов в реакции С-С-сочетания по Хеку [20] (Схема 19, 20).

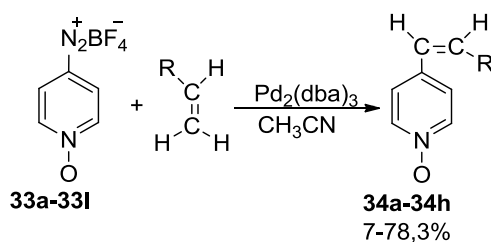


Схема 19

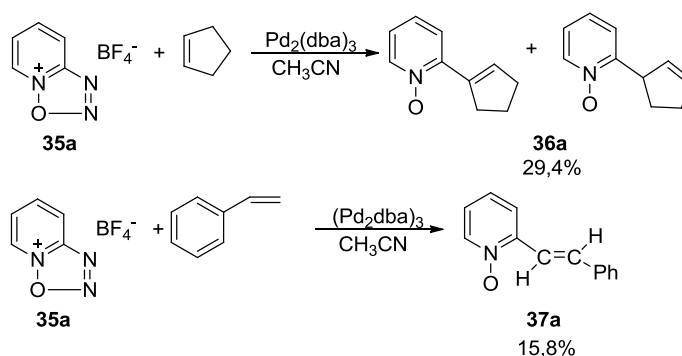


Схема 20

Недавно показано, что N-оксиды аминопиридинов могут диазотироваться под действием бутилнитрита в присутствии трифторметансульфокислоты в уксусной кислоте с образованием относительно

устойчивых солей диазония, способных к реакциям дediaзотирования (иодирования, азидирования) (Схема 21) [21].

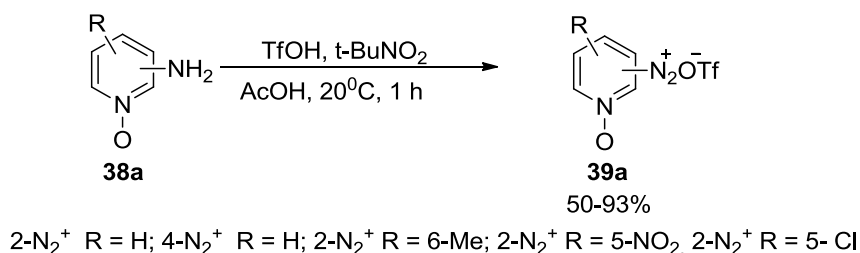


Схема 21

Этими же авторами недавно был предложен эффективный метод диазотирования-иодирования ряда N-оксидов аминопиридинов и аминохинолинов под действием NaNO₂, KI в присутствии п-толуолсульфокислоты в воде (Схема 22) [22].

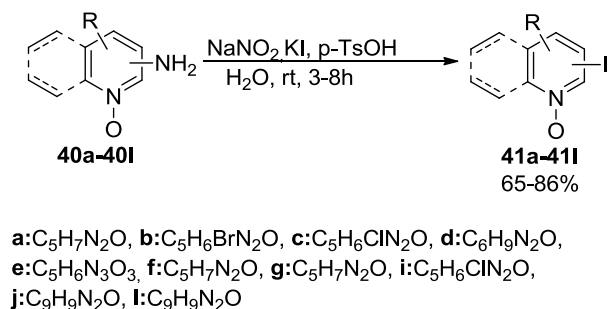


Схема 22

Авторы высказывают предположение, что успешное диазотирование-иодирование может быть объяснено устойчивостью образующихся *in situ* солей диазония. Однако в данной работе не были предприняты попытки выделить в индивидуальном виде эти соли диазония.

Таким образом, приведенные немногочисленные результаты, тем не менее, указывают на перспективность разработки стратегии синтеза гетероароматических солей диазония пиридинового строения, основанной на предварительном N-оксидировании аминогетероциклов и дальнейшем их диазотировании в присутствии сульфокислот.

Целью предлагаемой работы является синтез пириндидазоний камфорасульфонов и исследование их физико-химических свойств.

Раздел 2 Объект и методы исследования

Анализ методом газовой хроматографии – масс-спектрометрии (ГХ/МС) производили с помощью системы ГХ-МС, состоящей из масс-детектора Agilent 5975С и газового хроматографа Agilent 7890А. Спектры ЯМР ^1H и ^{13}C снимали на приборе Bruker AVANCE III HD (рабочая частота ^1H – 400 МГц, ^{13}C – 100 МГц). Температуры плавления полученных соединений были установлены с помощью прибора METTLER TOLEDO MP50. ИК-спектры регистрировали на ИК Фурье-спектрометре Agilent Cary 630 в твердых образцах и растворах (область 400-4000 cm^{-1}).

Контроль за ходом реакции и чистотой полученных продуктов вели методом ТСХ на пластинках Sorbfil ПТСХ-АФ-А-УФ и Merck, silicagel 60 μ . Детектирование пятен проводили УФ-светом при длине волны 254 нм, а также качественными реакциями на раствор 2-нафтола.

Характеристика использованных веществ

Ледяную уксусную кислоту, диэтиловый эфир, этилацетат, гексан, бензол, этанол, ацетонитрил, дихлорметан, хлороформ использовали марки «хч» без предварительной очистки.

Ароматические амины использовали марки «хч», при необходимости перекристаллизовывали из подходящего растворителя.

Аминопиридины «Aldrich», трет-бутилнитрит чистота 96 % «Aldrich», 2-нафтол марки «ч» использовали без предварительной очистки, DL-10-камфорасульфокислота являются коммерческими продуктами компании «Acros Organics».

Аминопиридин-1-оксиды синтезированы по известной методике [23].

Раздел 5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

5.1 Предпроектный анализ

Для качественного научного исследования его необходимо правильно организовать, спланировать и выполнить в определенной последовательности. Экономичное управление основных ресурсов и их рациональное использование является особенно важным направлением современного мира. Коммерциализация конечного продукта, рентабельность и затраты должны быть включены для синтеза органических соединений.

Выполнение научно-исследовательской работы включает не только преодоление и выполнение трудностей в процессе познания новых явлений, но и оценки коммерциализации, ресурсоэффективности, что является трудной задачей.

В данной магистерской диссертации представлен синтез и исследование физико-химических свойств ранее неизвестных пиримидиновых камфорасульфонов. Мы выявили хорошую уходящую способность камфорасульфоновой группы в реакциях SN по сравнению с OTF и OTs группами, поэтому камфорасульфоны будут широко использоваться в тонком органическом синтезе, что делает этот класс перспективным продуктом на рынке химических реагентов.

5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования

В настоящее время большой интерес уделяется к веществам обладающей биологической активностью. Мы предполагаем возможную биологическую активность наших синтезированных веществ так как большинство соединений где есть камфорная группа обладают биологической активностью и ряд соединений (пиримидиновых камфорасульфонов) синтезированных нами могут быть не исключением. А также лучшая уходящая

способность в реакциях нуклеофильного замещения среди сульфонатных групп делает его ценным для органического синтеза.

Потенциальными потребителями пирилдиазоний камфорасульфонов могут быть предприятия химической и фармацевтической промышленности, занимающиеся производством субстратов, биологически активных веществ и лекарственных средств. А также научно-исследовательские лаборатории.

Для анализа потребителей был рассмотрен целевой рынок фармацевтических производителей и проведено его сегментирование. Сегментирование рынка потребителей данной работы проведено на основе двух факторов: размер фармацевтической компании и сфера приложения биоматериалов



Рисунок 5.1 - Карта сегментирования рынка

Как видно из рисунка 5.1 основной рынок российской фармацевтической промышленности, в отличие от зарубежных, составляет производство готовых лекарственных средств. Разрабатываемые нами методики синтеза могут быть применены в синтезе лекарственных субстанций на территории России.

5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Для внесения коррективов в научное исследование чтобы лучшего противостоять конкурентам, необходимо выявить и проанализировать сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

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.

Таблица 5. Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		B_{ϕ}	B_{k1}	B_{k2}	K_{ϕ}	K_{k1}	K_{k2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1.Экологичность	0,1	4	5	4	0,4	0,5	0,4
2.Удобство в эксплуатации	0,05	5	2	3	0,25	0,1	0,15
3.Безопасность	0,11	4	4	3	0,44	0,44	0,33
4.Надежность	0,11	5	5	3	0,55	0,55	0,33
5.Выход целевого продукта	0,1	4	5	4	0,4	0,5	0,4
6.Длительность реакции	0,08	4	5	4	0,32	0,4	0,32
7.Условия реакции	0,02	5	3	4	0,1	0,06	0,08
Экономические критерии оценки эффективности							
1.Конкурентоспособность продукта	0,15	5	4	4	0,75	0,6	0,6
2.Цена	0,1	4	2	4	0,4	0,2	0,4
3.Уровень проникновения на рынок	0,1	3	3	4	0,3	0,3	0,4
6.Финансирование научной разработки	0,03	5	3	3	0,15	0,09	0,09
7.Срок выхода на рынок	0,05	4	5	4	0,2	0,25	0,2
Итого	1				4,26	3,99	3,7

K1 – Одностадийное иодирование аминопиридинов в присутствии ангидрида трифторметансульфокислоты.

K2 – Этоксילирование галогенпиридинов.

Исходя из таблицы, разрабатываемая методика более конкурентоспособна, чем разработки конкурентов. Она более удобна в эксплуатации, а так же наносит меньший вред окружающей среде, так как используемые реагенты почти не токсичны и легко извлекаются. Также цены реагентов нашей методики достаточно низки.

5.1.3 Диаграмма Исикавы

Диаграмма Исикавы — это способ графически изображать исследования и определения, с помощью которых можно выражать взаимосвязей между факторами и последствиями какого-нибудь проекта, ситуации, проблемы. С помощью данной диаграммы были рассмотрены все факторы данной работы (Рисунок 5.2).



Рисунок 5.2 – Причинно-следственная диаграмма Исикавы для получения пирилдиазоний камфорсульфонатов

5.1.4 SWOT – анализ

Суть анализа заключается в выявлении сильных, слабых сторон проекта и выявлении угроз. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Таблица 5.1.1 - Матрица SWOT.

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Заявленная экономичность технологии.</p> <p>С2. Экологичность технологии.</p> <p>С3. Более низкая стоимость исследований по сравнению с другими.</p> <p>С4. Наличие бюджетного финансирования.</p> <p>С5. Квалифицированный персонал.</p> <p>С6. N-окисленные соли диазония пирида более стабильны.</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой.</p> <p>Сл2. Большой срок поставок материалов и комплектующих, используемые при проведении научного исследования.</p> <p>Сл3. Высокая продолжительность подготовительных стадий.</p> <p>Сл4. Низкий уровень проникновения на рынок.</p> <p>Сл5. Проблемы выделения продукта при больших нагрузках.</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>В2. Снижение таможенных пошлин на сырье и материалы, используемые при научных исследованиях</p> <p>В3. Повышение</p>	<p>Инфраструктура ТПУ позволяет снизить стоимость исследования по сравнению с другими и облегчает получение бюджетного финансирования.</p> <p>Снижение таможенных пошлин и повышение стоимости</p>	<p>Инфраструктура ТПУ позволяет снизить срок поставок, продолжительность стадий и повысить уровень проникновения на рынок. Снижение таможенных пошлин позволяет снизить срок поставок материалов.</p>

стоимости конкурентных разработок	конкурентных разработок влияет на все сильные стороны кроме экологичности технологии	
Угрозы: У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства У2. Развитая конкуренция технологий производства У3. Ограничения на экспорт технологии У4. Введения дополнительных государственных требований к сертификации продукции У5. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования со стороны государства	Отсутствие спроса может привести к утечке квалифицированных кадров и прекращению бюджетного финансирования. Развитая конкуренция может не дать продукту удержаться на рынке. Ограничение на экспорт может способствовать уменьшению бюджетному финансированию. Введение дополнительных требований к сертификации продукта и несвоевременное финансовое обеспечение влияет на экономичность и цену продукта.	Отсутствие спроса, развитая конкуренция и ограничения на экспорт приведут к низкому уровню проникновения на рынок. Введение дополнительных требований к сертификации приводит в сочетании с отсутствием квалифицированных кадров значительно усложняет вывод продукции на рынок.

Таблица 5.1.2 – Интерактивная матрица проекта.

Сильные стороны проекта							
Возможности проекта		C1	C2	C3	C4	C5	C6
	B1	0	-	+	+	-	+
	B2	+	-	+	+	+	+
	B3	+	-	+	+	+	+
Сильные стороны проекта							
Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4	C5	C6
	У1	-	-	-	+	+	+
	У2	+	0	+	+	+	+
	У3	-	-	-	+	-	+
	У4	+	-	+	+	+	+
	У5	+	-	+	+	+	+

Слабые стороны проекта						
Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	Сл5
	B1	-	+	+	+	+
	B2	-	+	-	-	-
	B3	0	0	0	0	0
Слабые стороны проекта						
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	Сл5
	У1	-	-	-	+	-
	У2	-	-	-	+	-
	У3	-	-	-	+	-
	У4	+	0	0	+	0
	У5	0	0	0	0	0

5.1.5. Оценка готовности проекта к коммерциализации

Степень готовности научного проекта к коммерциализации можно оценить с помощью нескольких критериев. Для оценивания есть специальный бланк оценки, представленный в таблице 5.2.

Таблица 5.2 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	4	4
2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	3	4
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	5
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	4

5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	5	4
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	3
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	3	3
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	1	2
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	2	3
10.	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	5	5
11.	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	2	2
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	3	2
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	5	4
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	3
15.	Проработан механизм реализации научного проекта	5	4
	ИТОГО БАЛЛОВ	53	52

Оценка готовности научного проекта к коммерциализации (или уровень имеющихся знаний у разработчика) равна:

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i$$

Значение $B_{\text{сум}}$ получилось 53 и 52, это свидетельствует о том, что перспективность разработки, с точки зрения инвестирования, является выше средней. Данная разработка перспективная и практически готова к коммерциализации. Необходимо ещё дополнительно проработать стратегию внедрения данной технологии на широкий рынок.

5.1.6. Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Коммерциализация данного продукта осуществляется путем: торговлей патентными лицензиями, то есть, продажа разработок исследования третьим лицам - лицензиатом, а также с организациями совместных предприятий, работающих по схеме «российское производство – зарубежное распространение».

Использование торговлю патентными лицензиями, приведет нас к сотрудничеству с зарубежными странами, что повысит эффективность исследования, будет, происходит технологический и научно-технический обмен, обмен опытом работы. При технологическом обмене происходит экономическое развитие страны и происходит развитие международных экономических отношений.

При совместном предприятии будет происходить привлечение в страну передовых технологий, управленческого опыта, дополнительные и материальные и финансовые ресурсы, привлекают иностранный капитал в отечественную экономику расширение экспортной базы, сокращение импорта, расширение рынков сбыта.

5.2. Инициация проекта

Для определения нового проекта или новой фазы существующего выполняется группа процессов инициации. Инициация проекта определяет изначальные цели проекта или содержание работы. Также, в данном разделе определяются изначальные экономические – финансовые затраты. По данной

работе также надо определить внутренние и внешние заинтересованные стороны данной научной работы, которые влияют на общий результат научного проекта. Для этого проекта тоже имеются заинтересованные стороны (Таблица 5.2.1). Ниже указаны, изначальные цели и результат проекта (Таблица 5.2.2), рабочая группа данного проекта (Таблица 5.2.3) приведены ниже.

Цели и результат проекта. В данном разделе приведена информация о заинтересованных сторонах проекта, иерархии целей проекта и критериях достижения целей.

Таблица 5.2.1 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Научный руководитель	исследование физико-химических свойств пирилдиазоний камфорасульфонов
Магистрант	

Таблица 5.2.2 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Синтез и исследование физико-химических свойств гетероарилдиазоний камфорасульфонов
Ожидаемые результаты проекта:	Синтезировать ряд пирилдиазоний камфорасульфонов с умеренными выходами
Критерии приемки результата проекта:	Воспроизводимость методики, ЯМР-спектры, ГХ-МС спектры, температуры плавления.
Требования к результату проекта:	Требование:
	Разработанная методика должна быть нацелена на широкий спектр превращений соответствующих исходных пиридинов.
	Высокие выходы целевых пирилдиазоний камфорасульфонов по предлагаемой методике.

Организационная структура проекта. В данном этапе инициации проекта приведена вся рабочая группа данного проекта, определена роль каждого участника в данном проекте, а также прописаны функции, выполняемые каждым из участников и их трудозатраты в проекте.

Таблица 5.2.3 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, место работы, должность	Функции в проекте	Основные обязанности
1.	Краснокутская Е.А., профессор НОЦ Н.М. Кижнера	Руководитель проекта	Осуществляет детальное планирование проекта; Информацию для создания и актуализации планов работ; контролирует сроки выполнения научных работ по проекту.
2.	Медиев Д.С., магистрант	Исполнитель проекта	Выполняет научный проект.
3.	Спицына Л.Ю., Доцент	Консультант раздела «Финансовый менеджмент, ресурсо-эффективность и ресурсосбережение»	Оказание методической помощи при работе над разделом «Финансовый менеджмент, ресурсо-эффективность и ресурсосбережение» в магистерской диссертации.
4.	Романцов И.И., Доцент	Консультант раздела «Социальная ответственность»	Оказание методической помощи при работе над разделом «Социальная ответственность»
5.	Соколова Э.Я., Старший преподаватель	Консультант – лингвист	Оказание методической помощи при работе над переводом одной из глав магистерской диссертации на иностранный язык

Ограничения и допущения проекта.

Ограничения проекта – это все факторы, которые могут послужить ограничением степени свободы участников команды проекта, а также «границы проекта» - параметры проекта или его продукта, которые не будут реализованы в рамках данного проекта.

Таблица 5.2.4 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/допущения
3.1. Бюджет проекта	550000 рублей
3.1.1. Источник финансирования	-
3.2. Сроки проекта:	02.03.2020 – 01.06.2020
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	02.03.2020
3.2.2. Дата завершения проекта	14.06.2020
3.3. Прочие ограничения и допущения*	Не имеются

Таким образом, мы определили в рамках инициации проекта изначальные цели и финансовые ресурсы, заинтересованные стороны проекта, действия которых направлены на достижение общего результата. Также провели анализ всех ограничительных факторов проекта.

5.3. Планирование управления научно – техническим проектом

5.3.1 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. Планирование научного проекта состоит из процессов определения цели работы, разработка последовательности действий и общего содержания работы требуемых для достижения определенных целей.



Рисисунок. 5.3 - Иерархическая структура работ по проекту

5.3.2. Контрольные события проекта

Таблица 5.3 – Контрольные события проекта

№ п/п	Контрольное событие	Дата	Результат
1.	Изучение литературных источников	25.09.2019 – 01.12.2019	Литературный обзор
2.	Работа над магистерской диссертацией	04.12.2019 – 30.04.2020	Синтез и исследование физико-химических свойств гетероарилдiazоний камфорасульфонов.
3.		01.05.2019 – 02.06.2020	Готовая магистерская диссертация

5.3.3. План проекта

Для планирования научного проекта необходимо построить календарный план проекта.

Таблица 5.3.1 – Календарный план данного проекта

Код работ ы	Название	Длительность , дни	Дата начала работ	Дата окончани я работ	Состав участников (ФИО ответ- ственных исполнителе й)
1.	Литературный обзор	50	25.09.2019	01.12.2019	Медиев Д.С.
2.	Разработка метода синтеза пирилдиазоний камфорасульфонов	10	04.12.2019	15.12.2019	Медиев Д.С., Санжиев А.Н.
3.	Проведение синтеза по разработанной методике	48	18.12.2019	21.02.2020	Медиев Д.С.
4.	Наработка широкого ряда пирилдиазоний камфорасульфонов	32	26.02.2020	10.04.2020	Медиев Д.С.
5.	Исследование свойств продуктов	9	11.04.2020	23.04.2020	Медиев Д.С.
6.	Анализ полученных результатов	5	24.04.2020	30.04.2020	Медиев Д.С., Санжиев А.Н., Краснокутская Е.А.
7.	Составление отчета	25	04.05.2020	02.06.2020	Медиев Д.С., Краснокутская Е.А.
8.	Защита работы	1	14.06.2020	14.06.2020	Медиев Д.С.
Итого:		180			

Таблица 5.3.2 - Календарный план-график проведения НИОКР по теме: Синтез и исследование физико-химических свойств гетероарилдiazоний камфорасульфонов

Код работы	Видработ	Исполнители	Т _к , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ																											
				сентябрь		октябрь			ноябрь			декабрь			январь			февраль			март			апрель			май			июнь	
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2
1.	Литературный обзор	Инженер (магистрант)	50																												
2.	Синтез гетероарилкамф оросульфонов	Руководитель	10																												
3.		Инженер (магистрант)																													
4.	Проведение синтезапо разработанной методике	Инженер (магистрант)	48																												
5.	Наработка широкого ряда пиридиндiazоний камфорасульфо натов	Инженер (магистрант)	32																												
6.																															
7.	Исследование свойств продуктов	Инженер (магистрант)	9																												
8.	Анализ полученных результатов	Руководитель	5																												
		Инженер (магистрант)																													
9.	Составление отчета	Руководитель	25																												
		Инженер (магистрант)																													
10.	Защита работы	Инженер (магистрант)	1																												
	Итого:		180																												



– руководитель



– инженер

5.3.4. Бюджет научного исследования

При планировании бюджета научного исследования должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для его выполнения.

Сырье, материалы, покупные изделия (за вычетом отходов)

В этом разделе включаются затраты на сырьевые материалы, комплектующих полуфабрикатов и изделий, необходимых для выполнения работы. Потребность сырьевых материалов определяется по количеству их расхода.

Таблица 5.3.3 – Материальные затраты

Наименование	Марка, размер	Размер	Кол-во	Цена за	Сумма, руб.
Этанол	Вектон, х.ч	1л	1л	240	240
Хлороформ	Вектон, х.ч	1л	1л	317	317
Гексан	Вектон, х.ч	1л	0,1л	449	44,9
Силикагель	Вектон, х.ч	1 кг	0,1 кг	477,01	477,01
Уксусная кислота	Вектон, х.ч	1л	1л	188	188
Ацетон	Вектон, х.ч	1л	2л	276	552
Калия иодид	Aldrich, х.ч	0,1кг	0,05кг	354	177
Гидроксид Натрия	Aldrich, х.ч	0,1кг	0,05кг	354	177
Этилацетат	Вектон, х.ч	1л	0,1л	532	53,2
Метанол	Вектон, х.ч	1л	0,5л	645	322,5
Натрия сульфат безводный	Aldrich, х.ч	0,1 кг	1 кг	27	270
Дихлорметан	Вектон, х.ч	1л	2л	360	720
м-Хлорнадбензойная кислота	Aldrich, х.ч	0,5 кг	0,5кг	28464	28464
Трифторметансульфокислота	Aldrich, х.ч	100 г	50г	51920	25960
п-Толуолсульфокислота	Aldrich, х.ч	100 г	50г	2283	1141,5
t-бутилнитрит	Aldrich, х.ч	0,1л	0,1л	4237	4237
2-аминопиридин	Aldrich, х.ч	25г	10г	1851	740,4
3-аминопиридин	Aldrich, х.ч	25 г	10г	2451	980,4
4-аминопиридин	Aldrich, х.ч	25 г	10г	4274	1709,6
Всего за материалы					66771,51
Транспортно-заготовительные расходы (5%)					3338,5755
Итого по статье C_m					70110,086

Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включаются все затраты, связанные с приобретением специального оборудования. Определение стоимости спецоборудования производится по действующим прейскурантам. Стоимость оборудования, имеющегося в научно-технической организации, учитываем в калькуляции в виде амортизационных отчислений.

Таблица 5.3.4 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования (инструментов) для научных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц	Цена единицы, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1.	Шпатель	2	74	148
2.	Воронка стеклянная	5	20	100
3.	Пластика для тонкослойной хроматографии	1	2565	2565
4.	Цилиндр	3	120	360
5.	Штатив	1	1800	1800
6.	Колба круглодонная	10	97	970
7.	Стакан	6	91	546
8.	Колба плоскодонная	3	65	195
9.	Палочки стеклянные	3	13	39
10.	Фильтр обеззоленный	2	33	66
11.	Колба бунзена	1	1168	1168
12.	Фильтр Шотта	1	819	819
13.	Флакон пеницилиновый	60	1,5	90
14.	Термометр	1	200	200
15.	Термометр на шлифе	1	250	250
16.	Прямой холодильник	1	390	390
17.	Обратный холодильник	1	430	430
Итого				10136

Расчет амортизационных отчислений:

Затраты определяются в виде амортизации по формуле:

$$E_{am} = \frac{\sum K_{обi} * H_{ami} * T_{обi}}{365 * 100}$$

где $K_{обi}$ —стоимость ед. прибора или оборудования, руб.;

H_{ami} —норма амортизации прибора или оборудования, %;

$T_{обi}$ —время использования оборудования, дни.

Таблица 5.3.5 – Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

№	Наименование оборудования	Цена единицы оборудования, $K_{обi}$, руб	Время использования, $T_{обi}$, дни	Норма амортизации, H_{ami} , %	Мощность прибора, N_i , Вт	Сумма амортизационных отчислений, $E_{ам}$, руб.	Сумма затрат на электроэнергию, $E_{э}$, руб
1	ГХ/МС Agilent 5975C	4700000	5	11	2,45	7082,2	110,25
2	УФ лампы EN-280L (8 Вт)	23500	20	11	0,008	141,6	0,72
3	Электроплитка с магнитной мешалкой HP-20D-Unit	18500	90	10,4	0,6	474,4	486
4	Электронные весы E-200	25200	10	8,8	0,03	60,8	1,35
5	Весы аналитические HTR-120CEShinko	40120	1	8,8	0,03	9,67	0,27
6	Аквадистиллятор ДЭ-4-2М	19467	30	10	0,003	160	0,405
7	Испаритель ротационный	149250	5	11	60	224,9	1350

	ый типа RV- 06ML1- BIKA						
8	Итого	4976037				8153,57	1948,995

Основная заработная плата

В данном заголовке включены основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, которые участвуют в выполнении работы по магистерской теме. Расходы по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда.

Месячный должностной оклад работника:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{б}} \cdot K_{\text{р}}$$

где $Z_{\text{б}}$ – базовый оклад, руб.;

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

1) Базовый оклад $Z_{\text{б}}$ такого руководителя, как д.х.н. доцент, составляет: 47104р.

Рассчитываем месячный должностной оклад руководителя:

$$З_{\text{м}} = 47104 \cdot 1,3 = 61235,2 \text{ руб.}$$

Среднедневная ЗП руководителя:

$$З_{\text{дн.}} = 61235,2 \cdot 10,4 / 251 = 2537,23 \text{ руб.}$$

2) Базовый оклад $Z_{\text{б}}$ магистранта, составляет 26300 руб.

Рассчитываем месячный должностной оклад инженера (магистранта):

$$З_{\text{м}} = 26300 \cdot 1,3 = 34190 \text{ руб.}$$

Среднедневная ЗП инженера (магистранта):

$$З_{\text{дн.}} = 34190 \cdot 10,4 / 275 = 1293 \text{ руб.}$$

Таблица 5.3.6 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистрант
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	44	48
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени:		
-отпуск	56	28
-невыходы по болезни	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	275

Таблица 5.3.7 – Расчет основной заработной платы

№ п/п	Наименование этапов	Исполнители по категориям	Трудо-емкость, чел.-дни	Заработная плата приходящаяся на один чел.-дн., руб.	Всего заработная плата по тарифу (окладам), руб.
1.	Составление методик работы	Краснокутская Е.А.	10	2537,23	101489,2
2.	Анализ полученных результатов	Краснокутская Е.А.	5		
3.	Составление отчета	Краснокутская Е.А.	25		
4.	Литературный обзор	Медиев Д.С.	50	1293	232740
5.	Разработка метода синтеза пирилдиазоний камфорасульфонов	Медиев Д.С.	10		
6.	Проведение синтеза по разработанной методике	Медиев Д.С.	48		
7.	Наработка широкого ряда пирилдиазоний камфорасульфонов	Медиев Д.С.	32		

8.	Исследование свойств продуктов	Медиев Д.С.	9		
9.	Анализ полученных результатов	Медиев Д.С.	5		
10.	Составление отчета	Медиев Д.С.	25		
11.	Защита работы	Медиев Д.С.	1		
Итого:					334229,2

Таблица 5.3.8 - Расчет основной заработной платы

Исполнитель и	З _б , руб.	k _{пр}	k _д	k _р	З _м , руб.	З _{дн} , руб.	Т _р , раб. дн.	З _{осн} , руб.
Руководитель	47104	0	0	1,3	61235,2	2537,23	32,8	83221,14
Инженер (магистрант)	26300	0	0	1,3	34190	1293	147,5	190717,5
Итого:								273938,64

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала рассчитывается исходя из 10-15% от основной заработной платы, работников, непосредственно участвующих в выполнении темы:

$$З_{\text{доп.}} = k_{\text{доп.}} * З_{\text{осн.}}$$

где $З_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, руб.; $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной зарплаты; $З_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, руб.

Таблица 5.3.9 – Дополнительная заработная плата

Заработная плата	Руководитель	Инженер (магистрант)
Основная зарплата	83221,14	190717,5
Дополнительная зарплата	12483,17	28607,63

Контрагентные расходы в данном научно-исследовательском проекте составляют 3100 руб. на проведение спектроскопического анализа ЯМР ^{13}C и ^1H .

Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему.

А) Расход электроэнергии в час для магнитной мешалки составляет 1,3 кВт/ч. Длительность использования: 105 дней по 5 часов в среднем

$$E = 105 * 5 * 1,3 = 682,5 \text{ кВт.}$$

Б) Расход электроэнергии для персонального компьютера равен 0,16 кВт/ч. Длительность использования: 4 месяца (компьютер работал в среднем 22 дня в месяц по 6 часов).

$$E = 4 \text{ мес} * 22 \text{ дня} * 6 \text{ часов} * 0,16 = 84,48 \text{ кВт.}$$

В) Освещение (4 лампы по 100 Вт)

$$7 \text{ месяцев} * 22 \text{ дня} * 8 \text{ часов}$$

$$E = (7 * 22 * 8) * 0,4 = 492,8 \text{ кВт.}$$

Общая сумма затрат на электроэнергию составляет, согласно действующему тарифу (5,10 руб. за 1 кВт/ч):

$$C_{\text{эл}} = (682,5 + 84,48 + 492,8) * 5,10 = 6424,88 \text{ руб.}$$

Г) Затраты на водоснабжение

Тариф на водоснабжение – 34,14 р на м³. Примерный расход воды за время исследований составляет – 30 м³.

Затраты на водоснабжение за весь период исследования составляет – 1024,2 руб. Вода использовалась для конденсации паров жидкостей при перегонке или нагревании (кипячении). Так же вода использовалась для мытья химической посуды.

Итого расходы: $C1 = C_{\text{в}} + C_{\text{эл}} = 1024,2 + 6424,88 = 7449,08 \text{ руб.}$

Отчисления на социальные нужды

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды.

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

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

Отчисления на социальные нужды составляет 27,1%.

$$C_{\text{внеб}} = 0,271 \times (83221,14 + 12483,17) = 25935,87 \text{ руб.}$$

Таблица 5.4 – Бюджет научного исследования

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание
1. Материальные затраты НИ	70110,086	Табл. 5.3.3
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	18289,57	Табл. 5.3.4-5.3.5
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	334229,2	Табл. 5.3.7
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	41090,8	Табл. 5.3.9
5. Отчисления во внебюджетные фонды	25935,87	—
6. Затраты на научные и производственные командировки	—	—
7. Контрагентские расходы	3100	—
8. Накладные расходы	7449,08	—
9. Бюджет затрат НИ	500204,606	

Таким образом, сделав указанные расчеты, можно сделать следующий вывод, что данный исследовательский проект эффективен. Экономические затраты по расчетам считаются приемлемыми. Сроки реализации данного проекта полностью совпадают.

5.3.5 Реестр рисков проекта

На пути реализации проекта могут возникнуть разного рода риски, представляющие опасность того, что поставленные цели проекта могут быть не достигнуты полностью или частично. Полностью избежать риска практически невозможно, но снизить их угрозу можно, уменьшая действие неблагоприятных факторов. Возможные риски представлены в таблице 29.

Таблица 5.4.1 – Возможные риски проекта

№	Риск	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска*	Способы смягчения риска
1.	Низкий выход целевого продукта	4	5	высокий	Точное следование методике синтеза
2.	Образование побочных продуктов	3	5	высокий	Точное следование методике синтеза

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

5.4.1 Оценка сравнительной эффективности исследования

Детальный анализ конкурирующих разработок, существующих на рынке, необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Такой анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы успешнее противостоять своим соперникам. Важно реалистично оценить сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования.

Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более)

вариантов исполнения научного исследования. 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:

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

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

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

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

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

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить 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 для варианта

исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i-го варианта исполнения разработки;

b_i^a, b_i^p – балльная оценка i-го параметра для аналога и разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности (I^p) приведен в форме таблицы ниже.

Таблица 5.5 – Сравнительная оценка характеристик конкурентных вариантов исполнения проекта.

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
Химические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Доступность исходных продуктов	0,1	5	5	3	0,5	0,5	0,3
2. Простота методики	0,07	4	3	5	0,28	0,21	0,35
3. Выход продукта реакции	0,05	5	2	4	0,25	0,1	0,2
4. Условия реакции	0,08	5	3	5	0,4	0,24	0,4
5. Время реакции	0,1	5	3	2	0,5	0,3	0,2
6. Селективность процесса	0,02	5	3	5	0,1	0,06	0,1
7. Чистота полученного продукта	0,03	5	3	5	0,15	0,09	0,15
Технические критерии ресурсоэффективности							
8. Экологичность	0,1	4	2	4	0,4	0,2	0,4
9. Удобство в эксплуатации	0,05	4	3	5	0,2	0,15	0,25
10. Безопасность	0,1	5	3	5	0,5	0,3	0,5
11. Надежность	0,05	5	4	5	0,25	0,2	0,25
Экономические критерии ресурсоэффективности							
12. Конкурентоспособность продукта	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
13. Цена исходных субстратов	0,1	5	5	3	0,5	0,5	0,3
14. Уровень проникновения на рынок	0,05	4	3	4	0,2	0,15	0,2
Итого :	1				4,73	3,4	4,0

К_ф (текущий проект) – (диазотирование-нуклеофильное замещение)

К_{к1} (конкурент 1) – (алкилирование аминопиридинов)

К_{к2} (конкурент 2) – (нуклеофильное замещение хлорпиридинов).

Интегральный показатель эффективности разработки ($I_{фнр}^P$) и аналог ($I_{фнр}^a$)

Определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

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

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных

Сравнительная эффективность проекта:

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

где \mathcal{E}_{cp} – сравнительная эффективность проекта;

$I_{mз}^p$ – интегральный показатель разработки;

$I_{mз}^a$ – интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 5.5.1 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1.	Интегральный финансовый показатель (I_{ϕ}^p) разработки	1,00	0,99	0,99
2.	Интегральный показатель Ресурсоэффективности разработки (I_m^p)	4,73	3,4	4,0
3.	Интегральный показатель эффективности ($I_{\text{финр}}^p$)	4,73	3,4	4,0
4.	Сравнительная эффективность вариантов исполнения (\mathcal{E}_{cp})	1	0,99	0,98

Таким образом, сравнение значений интегральных показателей эффективности показывает, что данный научно-исследовательский проект является ресурсоэффективным. Разрабатываемая нами методика удобна в эксплуатации, более конкурентоспособна, чем разработки конкурентов. Оценка готовности проекта к коммерциализации дает возможность охарактеризовать данную работу как перспективную. Экономические затраты по расчетам считаются приемлемыми.

Список публикаций студента

1. Медиев Д.С., Санжиев А. Н., Синтез пирилдиазоний камфорасульфонов и исследование физико-химических свойств// Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XVII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 110-летию со дня рождения профессора А.Г. Стромберга, Томск, 21-24 Сентябрь 2020. - Томск: ТПУ, 2020.