

Школа Инженерная школа новых производственных технологий  
 Направление подготовки 19.03.01 Биотехнология, профиль Биотехнология  
 Отделение школы (НОЦ) Научно-образовательный центр Н.М. Кижнера

### БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

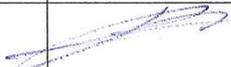
Тема работы
<b>Получение и исследование новых DES-растворителей с участием ЭДТА и ДТПА</b>

УДК 66.061.18:661.731.11

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д71	Ковальская Екатерина Сергеевна		06.06.2021

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор НОЦ Н.М. Кижнера	Филимонов В.Д.	д.х.н., профессор		11.06.2021

### КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Спицына Любовь Юрьевна	к.э.н.		02.06.2021

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Черемискина Мария Сергеевна	-		26.05.2021

### ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ООП 19.03.01 Биотехнология	Лесина Ю.А.	к.х.н.		11.06.2021

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП

### по направлению 19.03.01 Биотехнология

Код компетенции	Наименование компетенции
<b>Универсальные компетенции</b>	
<b>УК(У)-1</b>	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач
<b>УК(У)-2</b>	Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений
<b>УК(У)-3</b>	Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовывать свою роль в команде
<b>УК(У)-4</b>	Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном языке Российской Федерации и иностранном(-ых) языке(-ах)
<b>УК(У)-5</b>	Способен воспринимать межкультурное разнообразие общества в социально-историческом, этическом и философском контекстах
<b>УК(У)-6</b>	Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни
<b>УК(У)-7</b>	Способен поддерживать должный уровень физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности
<b>УК(У)-8</b>	Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций
<b>Общепрофессиональные компетенции</b>	
<b>ОПК(У)-1</b>	Способность осуществлять поиск, хранение, обработку и анализ информации из различных источников и баз данных, представлять ее в требуемом формате с использованием информационных, компьютерных и сетевых технологий
<b>ОПК(У)-2</b>	Способность и готовность использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования
<b>ОПК(У)-3</b>	Способность использовать знания о современной физической картине мира, пространственно-временных закономерностях, строении вещества для понимания окружающего мира и явлений природы
<b>ОПК(У)-4</b>	Способность понимать значения информации в развитии современного информационного общества, сознание опасности и угрозы, возникающей в этом процессе, способность соблюдать основные требования информационной безопасности, в том числе защиты государственной тайны
<b>ОПК(У)-5</b>	Владение основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, навыками работы с компьютером как средством управления информацией
<b>ОПК(У)-6</b>	Владение основными методами защиты производственного персонала и населения от возможных последствий аварий, катастроф, стихийных бедствий

<b>Код компетенции</b>	<b>Наименование компетенции</b>
<b>Дополнительно сформированные общепрофессиональные компетенции университета</b>	
<b>ДОПК(У)-1</b>	Способность разрабатывать технологическую и конструкторскую документацию
<b>Профессиональные компетенции</b>	
<b>ПК(У)-1</b>	Способность осуществлять технологический процесс в соответствии с регламентом и использовать технические средства для измерения основных параметров биотехнологических процессов, свойств сырья и продукции
<b>ПК(У)-2</b>	Способность к реализации и управлению биотехнологическими процессами
<b>ПК(У)-3</b>	Готовность оценивать технические средства и технологии с учетом экологических последствий их применения
<b>ПК(У)-4</b>	Способность обеспечивать выполнение правил техники безопасности, производственной санитарии, пожарной безопасности и охраны труда
<b>ПК(У)-8</b>	Способность работать с научно-технической информацией, использовать российский и международный опыт в профессиональной деятельности
<b>ПК(У)-9</b>	Владение основными методами и приемами проведения экспериментальных исследований в своей профессиональной области; способность проводить стандартные и сертификационные испытания сырья, готовой продукции и технологических процессов
<b>ПК(У)-10</b>	Владение планированием эксперимента, обработки и представления полученных результатов
<b>ПК(У)-11</b>	Готовность использовать современные информационные технологии в своей профессиональной области, в том числе базы данных и пакеты прикладных программ

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

Школа Инженерная школа новых производственных технологий  
 Направление подготовки (специальность) 19.03.01 Биотехнология, профиль Биотехнология  
 Отделение школы (НОЦ) Научно-образовательный центр Н.М. Кижнера

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

 25.01.2021 Лесина Ю.А.  
 (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
4Д71	Ковальской Екатерине Сергеевне

Тема работы:

<b>Получение и исследование новых DES-растворителей с участием ЭДТА и ДТПА</b>	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	№ 34-53/с от 03.02.2021

Срок сдачи студентом выполненной работы:

	<i>06.06.2021</i>
--	-------------------

### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	
<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 style="text-align: center;">Объектом исследования являются            глубокоэвтектические растворители на основе            ЭДТА и ДТПА.</p>

<p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b></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"> <li>• Литературный обзор</li> <li>• Объект и методы исследования</li> <li>• Экспериментальная часть</li> <li>• Результаты проведенного исследования</li> <li>• Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</li> <li>• Социальная ответственность</li> <li>• Заключение</li> </ul>
--	--

**Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы**

*(с указанием разделов)*

Раздел	Консультант
<b>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</b>	Доцент ОСГН ШБИП ТПУ, Спицына Л.Ю., к.э.н.
<b>Социальная ответственность</b>	Ассистент, Черемискина М.С.

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	<i>25.01.2021г.</i>
---	---------------------

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор НОЦ Н.М. Кижнера	Филимонов В.Д.	д.х.н., профессор		<i>25.01.21г.</i>

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д71	Ковальская Екатерина Сергеевна		<i>25.01.21г.</i>

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

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
4Д71	Ковальской Екатерине Сергеевне

<b>Школа</b>	<b>ИШНПТ</b>	<b>Отделение школы (НОЦ)</b>	<b>НОЦ Н.М. Кижнера</b>
<b>Уровень образования</b>	Бакалавр	<b>Направление/специальность</b>	19.04.01 Биотехнология

**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>Стоимость материальных ресурсов и специального оборудования определены в соответствии с рыночными ценами г. Томска Тарифные ставки исполнителей определены штатным расписанием НИ ТПУ</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>Норма амортизационных отчислений на специальное оборудование 12897,43; максимальный бюджет исследования 281133,49 руб.; минимальное значение интегрального показателя ресурсоэффективности 4,4.</i>
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>Отчисления во внебюджетные фонды 27,1 %</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>Расчет конкурентоспособности. SWOT – анализ.</i>
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	<i>Структура работ. Определение трудоемкости. Разработка графика проведения исследования. Расчет бюджетной стоимости НИР</i>
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	<i>Интегральный финансовый показатель разработки; Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки; Интегральные показатели эффективности; Сравнительная эффективность вариантов исполнения.</i>

**Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):**

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. График проведения научно-исследовательской работы

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

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Спицына Любовь Юрьевна	К.Э.Н.		02.02.21

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
4Д71	Ковальская Екатерина Сергеевна		02.02.21

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
4Д71	Ковальской Екатерине Сергеевне

Школа	Инженерная школа новых производственных технологий	Отделение (НОЦ)	НОЦ Н.М. Кижнера
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	19.03.01 Биотехнология

Тема ВКР:

Получение и исследование новых DES-растворителей с участием ЭДТА и ДТПА	
<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<p>Объектом исследования являются эвтектические смеси на основе комплексонов ДТПА и ЭДТА. Рабочая зона – лаборатория НОЦ Н.М. Кижнера ТПУ, аудитория 311.</p> <p>Для проведения научно-исследовательской работы используются: лабораторная электрическая плитка с перемешивающим устройством, газовый хромато-масс-спектрометр, весы аналитические.</p> <p>Область применения исследования – химическая и фармацевтическая промышленность, тонкий органический синтез.</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 29.12.2020);</li> <li>2. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования;</li> <li>3. ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования.</li> </ol>
<b>2. Производственная безопасность:</b> 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<p>Опасные и вредные факторы:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. выделение раздражающих, токсичных и канцерогенных веществ;</li> <li>2. отклонение показателей микроклимата на рабочем месте;</li> <li>3. недостаточная освещенность рабочей зоны;</li> <li>4. превышение уровня шума;</li> <li>5. повышенная температура поверхностей оборудования;</li> </ol>
<b>3. Экологическая безопасность:</b>	Воздействие на атмосферу: попадание в атмосферу летучих токсичных веществ.

	<p>Воздействие на гидросферу: загрязнение стоков в результате удаления реагентов в канализационную сеть.</p> <p>Воздействие на литосферу: утилизация бытовых отходов.</p>
<b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b>	<p>Перечень возможных ЧС:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>– техногенного характера: пожары, обрушения зданий, аварии на тепловых сетях (системах горячего водоснабжения) в холодное время года;</li> <li>– природного характера: землетрясения, метеорологические опасные явления;</li> <li>– биолого-социального и социального характера: инфекционные заболевания людей, массовые беспорядки.</li> </ul> <p>Наиболее типичная ЧС в лаборатории: возникновение пожара.</p>

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Черемискина Мария Сергеевна	-		11.02.21

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д71	Ковальская Екатерина Сергеевна		11.02.21

## **Реферат**

Выпускная квалификационная работа состоит из 90 с., 18 рис., 25 табл., 49 источников, 1 прил.

Ключевые слова: глубокоэвтектические растворители, ЭДТА, ДТПА, комплексоны, водородные связи, diazonium соли.

Объектом исследования являются глубокоэвтектические растворители на основе ЭДТА и ДТПА.

Цель работы – получение глубокоэвтектических растворителей на основе ЭДТА и ДТПА и исследование их физико-химических свойств и возможностей практического применения.

В процессе исследования проводилось получение глубокоэвтектических растворителей на основе ЭДТА и ДТПА, исследование их физических свойств и особенностей получения, исследование стабильности diazonium солей и возможности приведения реакции арилирования по свободно-радикальному механизму в данных системах, исследование растворимости ЭДТА и ДТПА в полученных ранее DES на основе оксикарбоновых кислот и третичных солей аммония.

В результате работы были получены глубокоэвтектические растворители на основе ЭДТА и ДТПА и исследованы их физические свойства, проведены реакции diazotирования и арилирования в данных системах, определена растворимость ЭДТА и ДТПА в DES на основе оксикарбоновых кислот и третичных солей аммония.

Степень внедрения: лабораторная разработка.

Область применения: тонкий органический синтез, химическая и фармацевтическая промышленность.

Значимость работы: получены новые глубокоэвтектические растворители на основе ЭДТА и ДТПА, исследована стабильность diazonium солей в DES, исследована возможность проведения реакции арилирования по свободно-радикальному механизму в DES, впервые показан

способ получения водных растворов ДТПА и ЭДТА без предварительного перевода их в щелочные соли.

В будущем планируется дальнейшее исследование полученных глубоководных растворителей, исследование полученных растворов ЭДТА и ДТПА в DES, поиск новых глубоководных растворителей, содержащих комплексообразующие кислоты.

## **Определения, обозначения и сокращения**

Сокращения:

DES – deep eutectic solvents, глубокоэвтектические растворители

ГХ-МС – газовая хроматография–масс-спектрометрия

ИК – инфракрасная спектроскопия

ТСХ - тонкослойная хроматограмма

ДТПА – диэтилентриаминпентауксусная кислота

ЭДТА – этилендиаминтетрауксусная кислота

## Оглавление

Введение.....	15
1. Глубокоэвтектические растворители .....	17
1.1. Классификация глубокоэвтектических растворителей .....	17
1.2. Получение глубокоэвтектических растворителей .....	19
1.3. Свойства глубокоэвтектических растворителей .....	21
1.4. Применение глубокоэвтектических растворителей.....	22
1.5. Краткие сведения о свойствах и применении ЭДТА и ДТПА.....	24
2. Объект и методы исследования .....	28
3. Экспериментальная часть.....	29
4. Результаты проведенного исследования .....	33
4.1. Получение систем DES с ЭДТА, ДТПА.....	33
4.2. Физические свойства полученных систем .....	34
4.3. Исследование стабильности diazonиевых солей в DES на основе ЭДТА и ДТПА.....	35
4.4. Исследование возможности прохождения реакции арилирования ароматических соединений diazonиевыми солями в системах DES на основе ЭДТА и ДТПА .....	37
4.5. Растворимость ДТПА в DES.....	42
5. Финансовый менеджмент.....	45
5.1. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения .....	46
5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования .....	46
5.1.2. Анализ конкурентных технических решений.....	47

5.1.3. SWOT-анализ.....	48
5.2. Планирование научно-исследовательских работ .....	50
5.2.1. Структура работ в рамках научного исследования .....	50
5.2.2. Определение трудоемкости выполнения работ .....	52
5.2.3. Разработка графика научного исследования.....	52
5.2.4. Бюджет научного исследования .....	56
5.3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования .....	62
5.3.1. Интегральный финансовый показатель .....	62
5.3.2. Интегральный показатель ресурсоэффективности.....	63
5.3.3. Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки.....	64
6. Социальная ответственность .....	65
6.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности ..	66
6.1.1. Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	66
6.1.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя .....	67
6.2. Профессиональная социальная безопасность.....	68
6.2.1. Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований .....	69
6.2.2. Обоснование мероприятий по защите исследователя от действия опасных и вредных факторов .....	73
6.3. Экологическая безопасность .....	74

6.3.1. Анализ влияния объекта и процесса исследования на окружающую среду.....	74
6.3.2. Обоснование мероприятий по защите окружающей среды .....	74
6.4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях .....	75
6.4.1. Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований.....	75
6.4.2. Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС .....	75
Выводы .....	77
Список публикаций студента.....	78
Список использованных источников .....	79
Приложение А. Спектры ИК.....	85

## **Введение**

В настоящее время все большее внимание уделяется принципам зелёной химии, а именно – стремлению проводить химические процессы таким образом, чтобы уменьшить или исключить использование или образование веществ, опасных для человека и окружающей среды. По этой причине поиск экологичных, безопасных и рентабельных растворителей, способных заменить токсичные и часто вредные летучие органические растворители, сегодня как никогда актуален.

Это объясняет заметный в последние годы рост интереса к глубоководным растворителям, рассматриваемым как новый, доступный и перспективный аналог ионных жидкостей, который представляет собой экологически чистые и устойчивые среды, пригодные для проведения различных синтезов.

На протяжении многих лет в НОЦ им. Н.М. Кижнера ведется работа по разработке и совершенствованию методик получения стабильных и доступных в использовании ароматических солей диазония. Несмотря на то, что глубоководные растворители всё более широко используются в различных областях органического синтеза, их применение в химии диазониальных соединений почти неизвестно, в частности, фактически отсутствуют данные о поведении диазониальных солей в системах DES.

Было отмечено, что в качестве доноров водородных связей в глубоководных растворителях могут использоваться комплексообразующие органические кислоты. Применение подобных систем, возможно, позволит увеличить время существования арилдиазоний катиона в нативном виде в отсутствие противоиона.

Известно, что комплексоны ЭДТА и ДТПА являются широко используемыми, но плохо растворимыми соединениями, в связи с чем была поставлена задача выяснить, могут ли они растворяться в глубоководных растворителях. Кроме того, целесообразно определить, могут ли ЭДТА и ДТПА стабилизировать диазониальные соли. Для этого

необходимо подобрать общий растворитель, которым может оказаться какой-либо DES.

Исходя из этого, целью научно-исследовательской работы является получение глубокоэвтектических растворителей на основе ЭДТА и ДТПА и исследование их физико-химических свойств и возможностей практического применения.

Данная работа является частью комплексного исследования различных глубокоэвтектических растворителей, выполненного научной группой студентов ТПУ в составе Ивановой С. С., Ковальской Е. С., Люляева А. В. под руководством профессора НОЦ Н. М. Кижнера Филимонова В. Д.

## 1. Глубокоэвтектические растворители

Глубокоэвтектические растворители (Deep eutectic solvents, DES) представляют собой системы, образованные из акцептора и донора водородной связи. Они получаются при смешении одного или несколько соединений с образованием эвтектики и имеют температуру плавления намного ниже, чем любой из отдельных компонентов.

Первые жидкости, названные глубокоэвтектическими растворителями, были описаны в 2001 году в исследовании [1], в ходе которого ряд солей четвертичного аммония нагревали с  $ZnCl_2$  и измеряли температуру замерзания полученных жидкостей. Самая низкая температура –  $23-25^\circ C$  – была получена при использовании хлорида холина в качестве соли аммония. Термин DES относится к жидкостям, содержащими эвтектические соотношения компонентов, т. е. имеющие самую низкую температуру плавления.

Один из наиболее значимых глубокоэвтектических растворителей – смесь хлорида холина и мочевины в молярном соотношении 1:2. Она имеет температуру плавления  $12^\circ C$ , что намного ниже, чем температура плавления хлорида холина ( $302^\circ C$ ) и мочевины ( $133^\circ C$ ), что делает ее жидкой при комнатной температуре [2].

Таким образом, эвтектическая смесь представляет собой смесь двух или более компонентов, которые обычно не взаимодействуют друг с другом. При определенных соотношениях соединения, участвующие в образовании эвтектики, подавляют процесс кристаллизации друг друга, в результате чего смесь имеет более низкую температуру плавления, чем любой из компонентов, вследствие чего смесь частично или полностью разжижается [3].

### 1.1. Классификация глубокоэвтектических растворителей

Глубокоэвтектические растворители можно описать общей формулой



где  $\text{Cat}^+$  – катион аммония, фосфония или сульфония;

$\text{X}^-$  – основание Льюиса, обычно галогенид-анион.

Сложные анионные частицы образуются между  $X^-$  и кислотой Льюиса или Бренстеда  $Y$  ( $z$  означает количество молекул  $Y$ , которые взаимодействуют с анионом). Большинство исследований было сосредоточено на катионах четвертичного аммония и имидазолия, особое внимание было уделено более практичным системам с использованием хлорида холина,  $[ChCl, HOC_2H_4N^+(CH_3)_3Cl^-]$ .

DES в значительной степени классифицируются в зависимости от природы используемого комплексообразователя. Различают 4 типа эвтектических растворителей:

1. четвертичная аммониевая соль + хлорид металла;
2. четвертичная аммониевая соль + гидрат хлорида металла;
3. четвертичная аммониевая соль + донор водородной связи;
4. гидрат хлорида металла + донор водородной связи.

Глубокоэвтектические растворители типа I можно рассматривать как аналог хорошо изученным системам галогенид металла/соли имидазолия. Примеры эвтектики типа I включают хорошо изученные расплавы хлоралюминатов и имидазолиевых солей и менее распространенные ионные жидкости, образованные солями имидазолия и галогенидами различных металлов, включая  $AgCl$ ,  $CuCl$ ,  $LiCl$ ,  $CdCl_2$ ,  $CuCl_2$ ,  $SnCl_2$ ,  $ZnCl_2$ ,  $LaCl_3$ ,  $YCl_3$  и  $SnCl_4$  [4].

Диапазон негидратированных галогенидов металлов, которые имеют достаточно низкую температуру плавления для образования эвтектики типа I, ограничен; однако количество глубокоэвтектических растворителей может быть увеличено за счет использования гидратированных галогенидов металлов и хлорида холина, образующих эвтектику II типа. Относительно низкая стоимость многих гидратированных солей металлов в сочетании с характерной для них нечувствительностью к воздуху и влаге позволяет использовать их в крупномасштабных промышленных процессах.

Глубокоэвтектические растворители типа III, образованные из хлорида холина и доноров водородных связей, представляют интерес за счёт их

способности сольватировать широкий спектр разновидностей переходных металлов, включая хлориды и оксиды [5, 6]. На сегодняшний день изучен ряд доноров водородных связей для образования эвтектики данного типа, в частности, различные амиды, карбоновые кислоты и спирты. Эти жидкости просты в приготовлении и фактически не реагируют с водой; многие из них поддаются биологическому разложению и имеют относительно низкую стоимость. Широкий спектр доступных доноров водородных связей означает, что глубокоэвтектические растворители данного типа особенно универсальны. Их физические свойства зависят от донора водородной связи и могут быть адаптированы для конкретных целей.

Большинство ионных жидкостей, которые являются жидкими при температуре окружающей среды, образуются с использованием органического катиона, обычно основанного на фрагментах аммония, фосфония и сульфония. Неорганические катионы обычно не образуют эвтектику с низкой температурой плавления из-за их высокой плотности заряда, однако недавние исследования показали, что смеси галогенидов металлов с мочевиной могут образовывать эвтектики с температурой плавления ниже  $150^{\circ}\text{C}$  [7, 8]. Было обнаружено, что ряд переходных металлов может быть включен в эвтектику при температуре окружающей среды, их назвали глубокоэвтектическими растворителями типа IV. Наиболее яркий пример – образование эвтектики хлорида цинка(II) с мочевиной, ацетамидом, этиленгликолем и 1,6-гександиолом [9].

## **1.2. Получение глубокоэвтектических растворителей**

Обычно химический синтез включает одну или несколько химических реакций между двумя или более реагентами с образованием продукта. Однако DES получают простым смешиванием акцептора и донора водородных связей [1]. Следовательно, DES готовятся, а не синтезируются, поскольку не происходит никакой химической реакции между компонентами.

Вне зависимости от цели перед использованием DES следует учитывать несколько факторов, таких как чистота, содержание воды в отдельных компонентах акцептора и донора водородных связей, а также хранение и сушка. Несоответствие этих факторов может привести к значительным изменениям физико-химических свойств DES и в конечном итоге оказать пагубное влияние на получаемый продукт [10].

Обычно эвтектические смеси получают путем простого смешивания по меньшей мере двух компонентов (как правило, при умеренном нагревании), которые способны образовывать новую эвтектическую фазу (которая представляет собой жидкость при температуре ниже 100°C), посредством самоассоциации, вызванной водородными связями. Таким образом, один из компонентов должен быть акцептором водородных связей, второй - донором водородных связей. Примеры структур некоторых акцепторов и доноров водородных связей показаны на рисунке 1 [11].

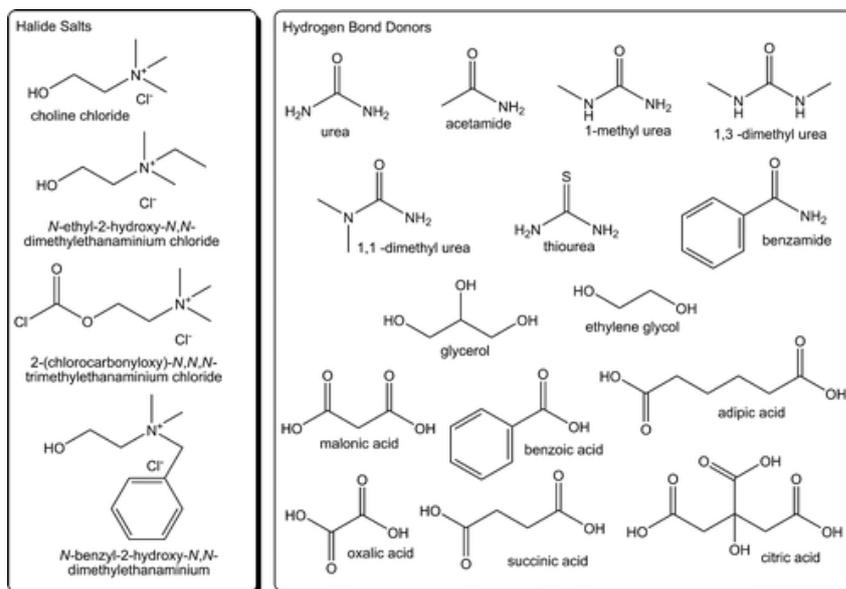


Рисунок 1 – Структуры некоторых акцепторов и доноров водородных связей, используемых при образовании глубокоэвтектических растворителей.

Глубокоэвтектические растворители также могут быть получены путем смешения трех компонентов. Было отмечено, что тройные эвтектические смеси имеют более низкие температуры плавления, чем двойные. Можно

ожидать, что в дальнейшем будут описаны многокомпонентные глубокоэвтектические растворители со специфическими свойствами [12].

### **1.3. Свойства глубокоэвтектических растворителей**

Важным отличительным свойством глубокоэвтектических растворителей является потенциал их использования в качестве адаптируемых к различным реакциям растворителей. Также они отличаются низким давлением паров и негорючестью, простотой приготовления и легкой доступностью из относительно недорогих компонентов.

#### Фазовое поведение

Разница температуры замерзания бинарной эвтектической смеси по сравнению с температурой замерзания теоретической идеальной смеси, связана со степенью взаимодействия между отдельными её компонентами. Чем оно больше, тем больше разница температур  $\Delta T_f$ . Это схематично показано на рисунке 2.

Рассмотрим эвтектику типа I: взаимодействие между различными галогенидами металлов и галогенид-анионом из четвертичной аммониевой соли будут давать одинаковые разновидности галометаллатов с аналогичными энтальпиями образования. Это говорит о том, что значение  $\Delta T_f$  должно быть от 200 до 300° С. Было замечено, что для образования эвтектики примерно при температуре окружающей среды, галогенид металла должен иметь температуру плавления примерно 300 ° С или меньше.

Глубокоэвтектические растворители типа II были разработаны в попытке включить другие металлы в состав систем DES. Было обнаружено, что гидраты галогенидов металлов имеют более низкие температуры плавления, чем соответствующие безводные соли. Очевидно, вода снижает температуру плавления солей металлов, потому что они уменьшают энергию кристаллической решетки. Как показано на рисунке 1, более низкая температура плавления чистой соли металла приведет к меньшему снижению температуры замерзания  $\Delta T_f$ .

Эвтектические смеси типа III зависят от образования водородных связей между галогенид-анионом соли и донором водородных связей: там, где эти доноры являются многофункциональными, точка эвтектики стремится к молярному соотношению соли и донора водородных связей 1:1. Также было отмечено, что понижение температуры замерзания связано с массовой долей донора водородных связей в смеси [13].

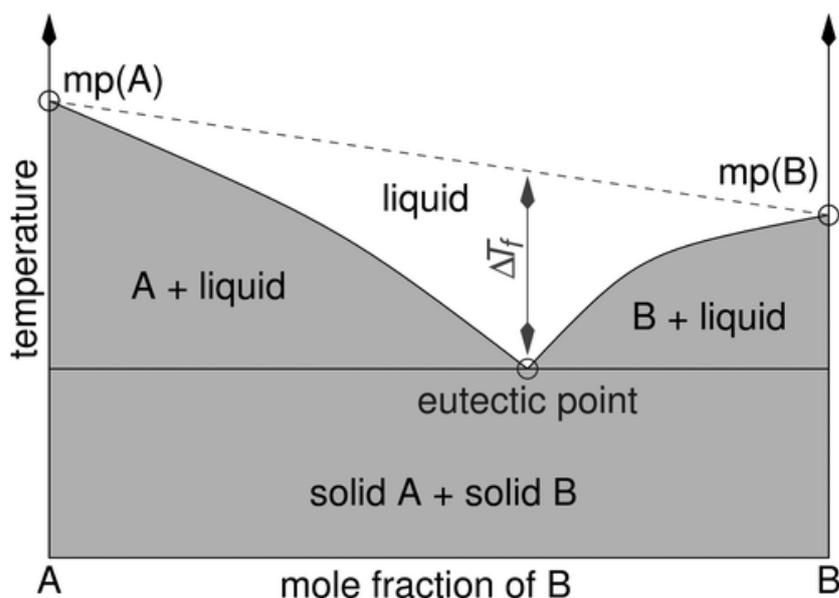


Рисунок 2 – Схематическое изображение эвтектической точки на двухкомпонентной фазовой диаграмме

#### 1.4. Применение глубокоэвтектических растворителей

Основные сферы применения глубокоэвтектических растворителей – катализ, растворители для органического синтеза, электрохимия, экстракция, разделение и ряд других областей химии и химической промышленности [16].

Ранее наиболее широко глубокоэвтектические растворители применялись в качестве альтернативных сред для обработки металлов. Ключевыми преимуществами использования глубокоэвтектических растворителей по сравнению с водными электролитами являются высокая растворимость солей металлов, отсутствие воды и высокая проводимость по сравнению с неводными растворителями. Всё это стало основаниями для их

широкого использования для электроосаждения металлов, электрополировки металлов, извлечения металлов и обработки оксидов металлов [17].

За последние несколько лет количество групп, исследующих потенциал систем DES в качестве альтернативных растворителей для органического синтеза, заметно возросло, и, следовательно, количество публикаций в этой области постоянно увеличивается.

Первоначально была предложена методика применения глубокоэвтектического растворителя на основе хлорида холина и хлорида цинка в качестве недорогих и доступных альтернатив ионных жидкостей в синтезе. Эта система была успешно использована для множества синтетических реакций, включая циклоприсоединение Дильса-Альдера, аннелирование индола по Фишеру и полимеризацию. [18] После этих экспериментальных доказательств принципа другие исследовательские группы продолжили изучение пригодности глубокоэвтектических растворителей в реакциях синтеза, и работа в этой области продолжается. Известно использование систем DES для селективного N-алкилирования ароматических первичных аминов, позволяющее избежать получения большого количества побочных продуктов алкилирования, которые могут образовываться при использовании полярных органических растворителей при высоких температурах реакции. Более того, после синтеза DES можно переработать и использовать повторно как минимум пять раз [19].

Еще одна важная область применения глубокоэвтектических растворителей – адсорбция и связывание CO<sub>2</sub> – актуальная тема, направленная на снижение последствий глобального потепления. Большие усилия сосредоточены на разработке источников энергии, не выделяющих CO<sub>2</sub>, однако эти исследования еще не на той стадии, на которой они могут быть реализованы в больших масштабах. Важной задачей является разработка устойчивого синтетического процесса для получения пригодных для повторного использования твердых сорбентов, которые

демонстрируют повышенную сорбирующую способность. Использование глубокоэвтектических растворителей для подготовки этих материалов представляется многообещающим с точки зрения эффективности и устойчивости [20].

Новая область исследований DES – их использование в биотрансформациях – это химических модификациях, производимых организмом или ферментом. Организм также использует биотрансформацию для превращения абсорбированного лекарства в активный агент или для преобразования токсинов в организме в менее вредные вещества, которые могут выводиться из организма. Традиционно биотрансформации проводят в водных растворителях; однако биокатализ также проводился в полярных органических растворителях, таких как ацетон, метанол или ДМСО, хотя полярные органические растворители могут денатурировать ферменты. Замена полярных органических растворителей на глубокоэвтектические растворители позволяет субстратам растворяться без деактивации ферментов. Глубокоэвтектические растворители можно использовать тремя различными способами: в качестве соразтворителя с водой, чтобы помочь неполярным субстратам раствориться в водном растворе, в качестве второй фазы в смеси вода-DES или в качестве нелетучей замены неводного растворителя. Таким образом, глубокоэвтектические растворители представляет собой технически и экономически жизнеспособную альтернативу органическим растворителям [21].

### **1.5. Краткие сведения о свойствах и применении ЭДТА и ДТПА**

Этилендиаминтетрауксусная кислота (ЭДТА) и диэтилентриаминпентауксусная кислота (ДТПА, сокр. от диэтилентриаминпентаацетат) представляют собой полиаминокарбоновые кислоты, широко используемые в качестве комплексообразующих агентов. Молекула ДТПА может рассматриваться как расширенная версия ЭДТА, имеет схожие с ней свойства и используется аналогичным образом. Оба

соединения – белые мелкокристаллические негигроскопичное вещества, малорастворимые в воде и этаноле.

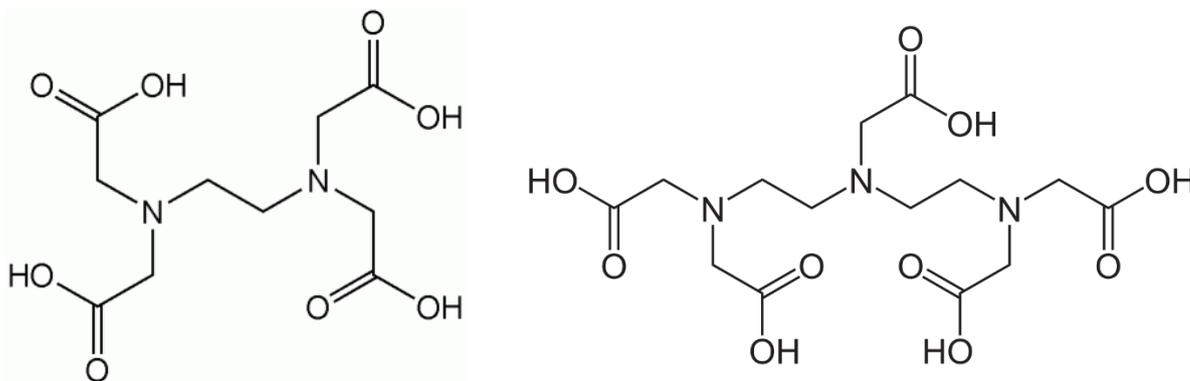


Рисунок 3 – Структурные формулы ЭДТА и ДТПА соответственно.

### Применение ЭДТА

В промышленности ЭДТА в основном используется для связывания ионов металлов в водном растворе. Также ЭДТА добавляют в некоторые продукты питания в качестве консерванта или стабилизатора для предотвращения каталитического окислительного обесцвечивания, которое катализируется ионами металлов [22].

Снижение жесткости воды в прачечных и растворение накипи в бойлерах основаны на ЭДТА и родственных комплексообразователях, которые связывают  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ , а также ионы других металлов. После связывания с ЭДТА эти комплексы металлов с меньшей вероятностью будут образовывать осадки или мешать действию мыла и детергентов. По тем же причинам чистящие растворы часто содержат ЭДТА [23].

ЭДТА и ее производные широко применяются в медицине: натрий кальций эдетат, используется для связывания ионов металлов в практике хелатной терапии, например, для лечения отравлений ртутью и свинцом, а также для удаления излишков железа из организма для лечения осложнений

повторных переливаний крови [24]. В стоматологии используется при эндодонтической обработке каналов зуба.

ЭДТА широко используется при анализе крови. Это антикоагулянт для образцов для общего анализа крови, где ЭДТА хелатирует кальций, останавливая процесс свертывания и сохраняя морфологию клеток крови [25].

В лаборатории ЭДТА широко используется для улавливания ионов металлов: в биохимии и молекулярной биологии истощение запасов ионов обычно используется для деактивации металл-зависимых ферментов, либо в качестве анализа их реакционной способности, либо для подавления повреждения ДНК, белков и полисахаридов [26]. В аналитической химии ЭДТА используется при комплексометрическом титровании и анализе жесткости воды или в качестве маскирующего агента для связывания ионов металлов, которые могут помешать анализу.

#### Особые свойства ДТПА

Константы образования комплексов пентаниона ДТПА<sup>5-</sup> примерно в 100 больше, чем у ЭДТА [27]. В качестве хелатирующего агента ДТПА захватывает ион металла, образуя до восьми связей. Его комплексы также могут иметь дополнительную молекулу воды, которая координирует ион металла [28]. Переходные металлы, однако, обычно образуют менее восьми координационных связей, поэтому после образования комплекса с металлом ДТПА все еще обладает способностью связываться с другими реагентами [29].

ДТПА активно применяется для выведения из организма радиоактивных материалов, таких как плутоний, америций и другие актиноиды [30]. Эти комплексы более склонны выводиться с мочой.

ДТПА также используется в качестве контрастирующего агента для магнитно-резонансной томографии, она улучшает разрешение МРТ за счет образования растворимого комплекса с ионом гадолиния ( $Gd^{3+}$ ), который

изменяет магнитно-резонансное поведение протонов ближайших молекул воды и увеличивает контраст изображения [31].

Несмотря на широкий спектр применения данных комплексонов, их ограниченная растворимость в воде (для ЭДТА она составляет 0,5 г/л [32], для ДТПА – 4,2 г/л [33]), создает значительные ограничения в их применении за счет невозможности получения водных растворов в кислой и нейтральной среде.

## 2. Объект и методы исследования

Анализ методом ГХ-МС проводился на газовом хроматографе Agilent 7890A с масс-селективным детектором Agilent 5975C (70 эВ), газ-носитель – гелий.

Контроль за ходом реакции и чистотой полученных продуктов вели методом тонкослойной хроматографии на пластинках Silufol UV-254 и Merck, silica gel 60, F254. Детектирование пятен проводили УФ-светом при длине волны 254 нм, а также качественными реакциями на раствор 2-нафтола.

Контроль образования глубокоэвтектических растворителей проводился посредством инфракрасной спектроскопии на настольном ИК-спектрометре Agilent Cary 630.

Получение глубокоэвтектических растворителей в условиях микроволнового нагрева производилось при помощи микроволновой системы для органического синтеза Discover SP.

Вязкость и плотность глубокоэвтектических растворителей была измерена при 20 °С на вибрационном вискозиметре "Реокинетика".

### Характеристика использованных веществ

Ледяную уксусную кислоту, этилацетат, этанол, ацетон использовали марки «хч» без предварительной очистки. 2-нафтол, нафталин марки «ч» использовали без предварительной очистки, KI, ДТПА, ЭДТА, 3-амино-1-пропанол марки «чда». Трет-бутилнитрит, триэтиламин, 4-нитроанилин являются коммерческими продуктами компании «Sigma Aldrich». 4-нитробензолдиазоний тозилат был получен в лаборатории научно-образовательного центра Н.М. Кижнера и был очищен и осушен по стандартным методикам.

## **5. Финансовый менеджмент**

### **Введение**

На сегодняшний день перспективность научного исследования определяется не столько масштабом открытия, оценить который на первых этапах жизненного цикла высокотехнологического и ресурсоэффективного продукта бывает затруднительно, сколько коммерческой ценностью разработки, которая напрямую зависит как от её научно-технических преимуществ и новизны, так и от её финансово-экономических характеристик, таких как рыночный спрос, конечная стоимость, бюджет, сроки проведения и реализации на рынке.

Целью данного раздела является оценка целесообразности научного исследования и определение коммерческой выгоды конечной продукции, получаемой в рамках данной работы.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- провести оценку коммерческого потенциала и перспективности научно-исследовательской работы;
- составить календарный план научно-исследовательских работ;
- провести оценку ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования;

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

### 5.1.1. Потенциальные потребители результатов исследования

Эвтектические растворители нашли широкое применение в различных сферах науки и промышленности. Изначально они использовались в основном в качестве электролитов при электрообработке металлов, а также при производстве и очистке биодизеля, однако дальнейшие исследования открыли широкие возможности их применения в химической и фармацевтической промышленности, технологии тонкого органического синтеза. Синтез в рамках данной работы проводился с целью получения новых глубокоэвтектических растворителей и использования их как среды для проведения химических реакций.

Предположительно, потенциальными потребителями результатов описанных исследований можно считать предприятия химической и фармацевтической промышленности и научно-исследовательские лаборатории тонкого органического синтеза.

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

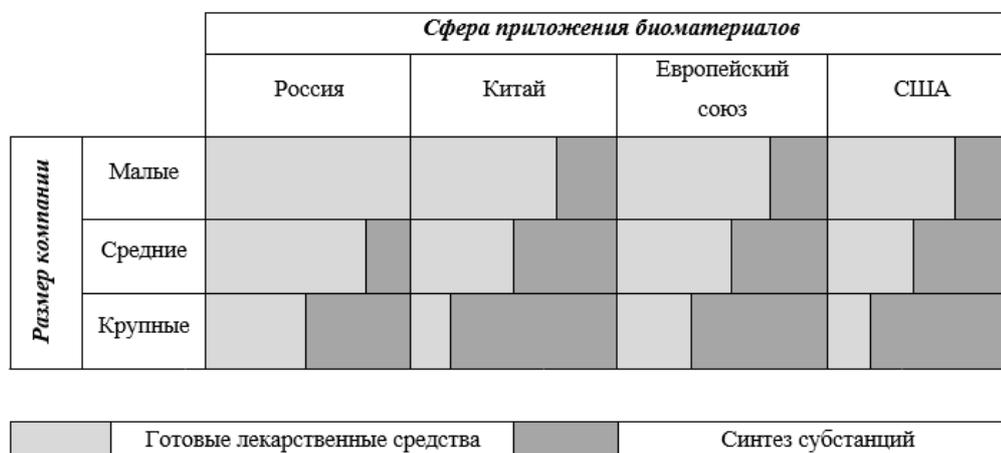


Рисунок 16 – Карта сегментирования рынка

Из рисунка 16 можно сделать вывод, что российский фармацевтический рынок по большей части составляет производство готовых лекарственных средств. Разрабатываемые наши глубокоэвтектические растворители могут быть применены в синтезе лекарственных субстанций на территории Российской Федерации, соответственно, необходимо ориентироваться на поставку продуктов в основном средним и крупным фармацевтическим компаниям.

### 5.1.2. Анализ конкурентных технических решений

Для оценки сравнительной эффективности и повышения конкурентоспособности продукта исследования необходимо выявить и проанализировать сильные и слабые стороны разработок конкурентов.

В ходе научно-исследовательской работы были получены и исследованы глубокоэвтектические растворители на основе комплексобразующих кислот. В данном анализе рассмотрим две другие группы глубокоэвтектических растворителей

Экспертная оценка производится по техническим характеристикам и экономическим показателям по 5 бальной шкале, где 1 - наиболее низкая оценка, а 5 - наиболее сильная. Общий вес всех показателей в сумме должен составлять 1.

Таблица 5.1 – Оценочная карта для сравнения технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		$B_{\phi}$	$B_{к1}$	$B_{к2}$	$K_{\phi}$	$K_{к1}$	$K_{к2}$
1	2	3	4	5	6	7	8
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>							
1. Простота синтеза	0,2	5	4	3	1,0	0,8	0,6
2. Стабильность при комнатной температуре	0,3	5	3	4	1,5	0,9	1,2
3. Допустимый интервал температур	0,1	5	4	4	0,5	0,4	0,4
4. Удобство в использовании в качестве среды для проведения реакций	0,2	3	5	5	0,6	1,0	1,0
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>							
1. Стоимость реагентов	0,2	5	5	3	1,0	1,0	0,6
<b>Итого</b>	<b>1</b>				<b>4,6</b>	<b>4,1</b>	<b>3,8</b>

Ф - продукт научно-исследовательской работы;

К<sub>1</sub> – полученные и исследованные нашей научной группой ранее глубокоэвтектические растворители на основе оксикарбоновых кислот и триэтиламмония хлорида;

К<sub>2</sub> – описанные в статье, результаты которой были воспроизведены нашей научной группой, глубокоэвтектические растворители на основе оксикарбоновых кислот и холина хлорида, для которых доказана возможность успешного использования в качестве среды для получения стабильных diazonиевых солей [34].

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum V_i \cdot B_i \quad (5.1)$$

где K- конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

V<sub>i</sub>- вес показателя (в долях единицы);

B<sub>i</sub>- балл i-го показателя;

Проведенный анализ конкурентных технических решений показал, что продукт научно-исследовательской работы является конкурентоспособным и коммерчески выгодным, так как отличается простотой синтеза и имеет особое преимущество в виде высокой стабильности при длительном хранении в широком интервале температур.

### 5.1.3. SWOT-анализ

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

Таблица 5.2 – SWOT-анализ

	<b>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</b> С1. Простота синтеза С2. Высокая стабильность С3. Научная ценность	<b>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</b> Сл1. Сложность выделения продукта реакции из данных систем
--	---	--

Продолжение таблицы 5.2

	С4. Коммерческая доступность реагентов	Сл2. Высокая вязкость, за счет которой более сложно работать с системами Сл3. Образование побочных продуктов при проведении синтезов в данных системах Сл4. Сложность переноса проекта на большие масштабы
<b>Возможности:</b> В1. Появление спроса на продукт у химико-фармацевтических компаний В2. Возможность участия в грантах В3. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ	В1С1С2С4. Высокий интерес фармацевтических компаний в использовании разработки за счет ее преимуществ. Следует продолжать выпуск по разработанной методике, постепенно увеличивая объем производства в соответствии с растущим спросом. В2В3С2С3. Научная ценность и перспективность разработки способствуют привлечению новых материальных ресурсов и возможности использования высокотехнологичного оборудования, что позволит провести более глубокие исследования и в перспективе улучшить методику, устраняя слабые стороны продукта.	В1Сл1Сл2Сл3Сл4. Сотрудничество с химико-фармацевтическими компаниями, привлечение их специалистов и оборудования к исследованиям, направленным на повышение применимости разработки к использованию в промышленности. В2В3Сл1Сл2Сл3. Продвижение продукта с акцентированием внимания на его достоинствах, уникальности и необходимости дальнейших исследований его совершенствования.
<b>Угрозы:</b> У1. Недостаточное материально-техническое оснащение для дальнейших исследований полученных систем У2. Появление конкурирующих аналогов в ближайшее время за счет активного исследования темы У3. Отсутствие спроса на новые технологии производства.	У1С3. Продвижение продукта с акцентированием внимания на его научной ценности и перспективности для привлечения дополнительных ресурсов. У2У3С1С2С4. Продвижение продукта с акцентированием внимания на его высокую конкурентоспособность и перспективность в использовании в промышленности, активное продолжение научных исследований.	У2Сл2. Доработка продукта, рассмотрения оптимальных способов снижения вязкости в зависимости от его дальнейшего применения. У3Сл1Сл2Сл3Сл4. Активное продолжение научных исследований и доработка продукта, поиск новых партнеров и альтернативных источников финансирования.

Анализ соответствия сильных и слабых сторон проекта внешним условиям окружающей среды отражён в интерактивной матрице проекта.

Таблица 5.3 – Интерактивная матрица проекта

<b>Сильные стороны проекта</b>					
<b>Возможности проекта</b>		C1	C2	C3	C4
	B1	+	+	-	+
	B2	-	+	+	-
	B3	-	+	+	-
<b>Угрозы</b>		C1	C2	C3	C4
	У1	-	-	+	-
	У2	+	+	-	+
	У3	+	+	-	+
<b>Слабые стороны проекта</b>					
<b>Возможности проекта</b>		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	B1	+	+	+	+
	B2	+	+	+	-
	B3	+	+	+	0
<b>Угрозы</b>		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	У1	-	-	0	-
	У2	0	+	0	-
	У3	+	+	+	+

На основе SWOT-анализа были сформулированы различные направления реализации проекта в зависимости от благоприятных и неблагоприятных внешних условий. По результатам анализа можно сделать вывод о том, что разрабатываемая технология достаточно стабильна и имеет высокие шансы на дальнейшее развитие, продвижение и практическое применение.

## **5.2. Планирование научно-исследовательских работ**

### **5.2.1. Структура работ в рамках научного исследования**

Для выполнения научных исследований была сформирована рабочая группа, в состав которой входят научный руководитель и инженер (бакалавр).

Таблица 5.4 – Рабочая группа проекта

<b>ФИО, основное место работы, должность</b>	<b>Роль в проекте</b>	<b>Функции</b>
Филимонов Виктор Дмитриевич, д.х.н, профессор ИШНПТ, НОЦ Н.М. Кижнера, НИ ТПУ, научный руководитель	Руководитель	Координация деятельности, проверка и анализ результатов работы
Ковальская Екатерина Сергеевна, инженер ИШНПТ НИ ТПУ	Инженер	Выполнение проекта

Далее был составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования и проведено распределение исполнителей по видам работ.

Таблица 5.5 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

<b>Основные этапы</b>	<b>№ раб</b>	<b>Содержание работ</b>	<b>Должность исполнителя</b>
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
Выбор направления исследований	2	Выбор направления исследований	Руководитель, инженер
	3	Подбор и изучение материалов по теме исследования	Руководитель, инженер
	4	Календарное планирование работ	Руководитель, инженер
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Инженер
	6	Проведение экспериментов в лаборатории	Инженер
	7	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Руководитель, инженер
Обобщение и оценка результатов	8	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, инженер
	9	Определение целесообразности проведения ВКР	Руководитель, инженер
	10	Оформление раздела «Социальная ответственность»	Инженер
	11	Оформление раздела «Финансовый менеджмент»	Инженер
Оформление документации	12	Составление пояснительной записки	Инженер

### 5.2.2. Определение трудоемкости выполнения работ

Определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования является важным пунктом, поскольку трудовые затраты в большинстве случаев составляют основную часть стоимости разработки.

Трудоемкость выполнения научного исследования оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов. Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости  $t_{ожі}$  используется формула:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{min} + 2t_{max}}{5}, \quad (5.2)$$

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

$t_{min}$  – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной работы, чел.-дн.;

$t_{max}$  – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной работы, чел.-дн.;

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях  $T_p$ , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожі}}{ч_i}, \quad (5.3)$$

где  $T_{pi}$  – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{ожі}$ ; – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.;

$ч_i$  – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну работу на данном этапе, чел.

### 5.2.3. Разработка графика научного исследования

Для простого и наглядного представления графика проведения научного исследования была построена диаграмма Ганта. Для удобства её построения

длительность каждого из этапов переведена в календарные дни по следующей формуле:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (5.4)$$

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:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (5.5)$$

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

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

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

Коэффициент календарности для шестидневной рабочей недели составляет:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 66 - 14} = 1,28$$

Все полученные значения в календарных днях округляются до целого числа.

Таблица 5.6 – Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоемкость работ						Длительность работ в рабочих днях, $T_{pi}$		Длительность работ в календарных днях $T_{ki}$	
	$t_{\text{min}}$ , чел-дни		$t_{\text{max}}$ , чел-дни		$t_{\text{ож}}$ , чел-дни					
	Руководитель	Инженер	Руководитель	Инженер	Руководитель	Инженер	Руководитель	Инженер	Руководитель	Инженер

Продолжение таблицы 5.6

Составление и утверждение технического задания	1	-	2	-	1,4	-	1,4	-	2	-
Выбор направления исследований	1	1	2	2	1,4	1,4	0,7	0,7	1	1
Подбор и изучение материалов по теме исследования	2	10	4	14	2,8	11,6	1,4	5,8	2	7
Календарное планирование работ	1	-	3	-	1,4	-	1,4	-	2	-
Проведение теоретических расчетов и обоснований	-	10	-	14	-	11,6	-	11,6	-	15
Проведение экспериментов в лаборатории	-	30	-	50	-	38,0	-	38,0	-	49
Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	2	7	4	10	2,8	8,2	1,4	4,1	2	5
Оценка эффективности полученных результатов	2	2	4	4	2,8	2,8	1,4	1,4	2	2
Определение целесообразности проведения ВКР	2	7	4	10	2,8	8,2	1,4	4,1	2	5
Оформление раздела «Социальная ответственность»	-	5	-	10	-	7,0	-	7,0	-	8
Оформление раздела «Финансовый менеджмент»	-	5	-	10	-	7,0	-	7,0	-	8
Составление пояснительной записки	-	10	-	15	-	12,0	-	12,0	-	10
<b>Итого</b>							<b>9,1</b>	<b>91,7</b>	<b>13</b>	<b>110</b>

На основе данных из таблицы 5.6 строится календарный план-график в форме диаграммы Ганта.

Таблица 5.7 – Календарный план-график проведения научно-исследовательской работы

Вид работ	Исполнители	Т <sub>кi</sub> , кал, дн.	Продолжительность выполнения работ													
			февр			март			апрель			май			июн	
			1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2
Составление ТЗ	Руководитель	2	■													
Выбор направления исследований	Руководитель, инженер	1 1	■													
Изучение материалов	Руководитель, Инженер	2 7	■	■												
Календарное планирование	Руководитель	2	■													
Проведение теор. расчетов	Инженер	15		■	■											
Проведение экспериментов	Инженер	49				■	■	■	■	■	■					
Сопоставление результатов	Руководитель, инженер	2 5										■	■			
Оценка эффективности	Руководитель, инженер	2 2											■	■		
Определение целесообразности проведения ВКР	Руководитель, инженер	2 5												■		
Оформление раздела «Соц. ответственность»	Инженер	8												■		
Оформление раздела «Фин. менеджмент»	Инженер	8												■		
Составление ПЗ	Инженер	10													■	■

■ – руководитель, ■ – инженер

## 5.2.4. Бюджет научного исследования

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

### 5.2.4.1. Расчет материальных затрат научного исследования

Данная статья расходов включает стоимость всех материалов, используемых при разработке проекта, а именно, стоимость реактивов, необходимых для выполнения экспериментальной части исследования.

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + k_t) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расхи}, \quad (5.6)$$

где  $m$  – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;

$N_{расхи}$  – количество материальных ресурсов  $i$ -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м<sup>2</sup> и т.д.);

$k_T$  – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы (15%).

Таблица 5.8 – Материальные затраты

Наименование	Количество	Используемое количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, ( $Z_m$ ), руб.
3-амино-1-пропанол	100 мл	30 мл	1172,32	351,70
Винная кислота	100 г	20 г	155,00	31,00
ДТПА	1000 г	100 г	243,00	24,30
Калия йодид	100 г	20 г	522,66	104,53
Лимонная кислота	200 г	10 г	65,52	3,26
Натрия нитрит	1000 г	20 г	213,42	4,27
Нафталин	500 г	5 г	530,00	5,30
п-Нитроанилин	100 г	10 г	1073,88	107,9
Соляная кислота 37 %	1000 мл	10 мл	2486,34	24,86
т-Бутилнитрит	100 мл	5 мл	3500,00	175,00
Толуол	1000 мл	5 мл	201,24	1,01
Триэтиламин	700 мл	15 мл	1010,00	21,64
Уксусная кислота ледяная	1000 мл	10 мл	371,46	3,71

Продолжение таблицы 5.8

ЭДТА	1000 г	100 г	204,00	20,40
Этанол	1000 мл	200 мл	240,00	48,00
Этилацетат	1000 мл	500 мл	453,06	226,53
Всего за материалы, руб.				1153,41
Транспортно-заготовительные расходы, руб.				173,01
<b>Итого по статье</b>				<b>1326,42</b>

**5.2.4.2. Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ**

В данную статью включаются все затраты, связанные с приобретением специального оборудования. Стоимость оборудования, имеющегося в научно-технической организации, учитывается в калькуляции в виде амортизационных отчислений.

Таблица 5.9 – Затраты на приобретение инструментов для научных работ

Наименование оборудования	Кол-во единиц	Цена единицы, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
Наконечники для дозаторов	500	0,38	190,00
Пластинки для тонкослойной хроматографии	15	9,41	141,21
Палочки стеклянные	10	13,46	134,6
Флакон пенициллиновый	60	1,50	90,00
Шпатель	2	74,00	148,00
Итого			703,81

Таблица 5.10 – Затраты на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Срок полезного использования, лет	Время использования, дни.	Сумма амортизационных отчислений, руб.
Весы аналитические HTR-120CEShinko	75400	5	35	1446,03

Продолжение таблицы 5.10

Газовый хроматограф Agilent 7890A	3727994	15	12	8170,95
Настольный ИК-спектрометр Agilent Cary 630	750000	10	5	1027,40
Настольный ЯМР-спектрометр NMReady-60PRO	10815210	15	1	1975,38
Электроплитка с магнитной мешалкой HP-20D-Unit	18500	10	37	187,53
УФ лампа EN-280L (8 Вт)	23500	10	14	90,14
<b>Итого по статье</b>				<b>12897,43</b>

Расчет амортизации был проведен следующим образом:

Норма амортизации:

$$H_A = \frac{1}{n}, \quad (5.7)$$

где  $n$  – срок полезного использования в количестве лет.

Амортизация:

$$A = \frac{H_A I}{365} \cdot t, \quad (5.8)$$

где  $I$  – итоговая сумма, руб.;  $t$  – время использования, дни.

Итоговое значение затрат на специальное оборудование составляет 13601,24 руб.

### 5.2.4.3. Основная заработная плата исполнителей темы

В данную статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Расходы по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок в НИ ТПУ.

Заработная плата включает в себя основную заработную плату и дополнительную заработную плату:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (5.9)$$

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

$Z_{доп}$  – дополнительная заработная плата (12-20 % от  $Z_{осн}$ ).

Основная заработная плата ( $Z_{осн}$ ) одного работника:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p \quad (5.10)$$

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d} \quad (5.11)$$

где  $Z_m$  – месячный должностной оклад работника, руб.;

$M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года:  $M=10,4$  месяца для 6-дневной недели;

$F_d$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (табл. 5.11).

Таблица 5.11 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	52
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	48
- невыходы по болезни	1	1
Действительный годовой фонд рабочего времени	250	250

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{тс} \cdot (1 + k_{пр} + k_d) \cdot k_p, \quad (5.12)$$

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

$k_{пр}$  – премиальный коэффициент, равный 0,3;

$k_d$  – коэффициент доплат и надбавок, который составляет 0,2 – 0,5;

$k_p$  – районный коэффициент, равный 1,3 для г. Томска.

Таблица 5.12 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	$Z_{ге}$ , руб.	$k_p$	$k_{пр}$	$k_d$	$Z_m$ , руб.	$Z_{дп}$ , руб.	Тр, раб. дн.	$Z_{осн}$ , руб.
Руководитель	26300	1,3	0,3	0,3	54704	2275,69	9,1	20708,80
Инженер	17000	1,3	0,3	0,3	35360	1470,98	91,7	134888,50
<b>Итого по статье</b>								<b>155597,30</b>

#### 5.2.4.4. Дополнительная заработная плата исполнителей темы

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

Расчет дополнительной заработной платы ведется по формуле:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн} \quad (5.13)$$

где  $k_{доп}$  - коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0,15).

Дополнительная заработная плата руководителя составила:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн} = 0,15 \cdot 20708,80 = 3106,32$$

Дополнительная заработная плата инженера:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн} = 0,15 \cdot 134888,50 = 20233,28$$

Общая сумма составила 23339,60 руб.

#### 5.2.4.5. Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$З_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}), \quad (5.14)$$

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

Для учреждений, осуществляющих научную и образовательную деятельность, размер страховых взносов составляет 27,1%.

Величина отчислений во внебюджетные фонды представлена в таблице 5.13.

Таблица 5.13 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная зарплатная плата, руб.	Дополнительная зарплатная плата, руб.	Отчисления во внебюджетные фонды, руб.
Руководитель	20708,80	3106,32	6453,90
Инженер	134888,50	20233,28	42038,00
<b>Итого по статье</b>			<b>48491,90</b>

#### 5.2.4.6. Накладные расходы

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

$$З_{\text{накл}} = (\text{сумма статей } 1 \div 5) \cdot k_{\text{нр}}, \quad (5.15)$$

где  $k_{\text{нр}}$  – коэффициент, учитывающий накладные расходы, который составляет 16 %.

Величина накладных расходов данной работы составляет 38777,03 руб.

#### 5.2.4.7. Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

На основании проведенных расчетов по отдельным статьям затрат был сформирован бюджет научно-исследовательской работы по форме,

приведенной в таблице 5.14. В качестве аналога рассмотрена известная ионная жидкость BMIM-PF<sub>6</sub>, обладающая схожими с получаемыми глубоководными свойствами и также используемая в качестве среды для проведения синтезов [37]. Основное отличие – по статье материальных затрат.

Таблица 5.14 – Расчет бюджета затрат научно-исследовательской работы

№	Наименование статьи	Сумма, руб.		Примечание
		Текущий проект	Аналог	
1	Материальные затраты НТИ	1326,42	5748,24	Пункт 2.4.1
2	Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	13601,24	13601,24	Пункт 2.4.2
3	Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	155597,30	155597,30	Пункт 2.4.3
4	Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	23339,60	23339,60	Пункт 2.4.4
5	Отчисления во внебюджетные фонды	48491,90	48491,90	Пункт 2.4.5
6	Накладные расходы	38777,03	39484,52	Пункт 2.4.6
<b>Бюджет затрат ВКР</b>		<b>281133,49</b>	<b>286262,80</b>	<b>Сумма ст. 1-6</b>

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

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

#### 5.3.1. Интегральный финансовый показатель

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (5.16)$$

где  $\Phi_{pi}$  – стоимость  $i$ -го варианта исполнения;

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

$$I_{\text{финр}}^{\text{тек}} = \frac{\Phi_{\text{текущ.}}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{281133,49}{286262,80} = 0,982$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.1}} = \frac{\Phi_{\text{исп.1}}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{286262,80}{286262,80} = 1$$

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

### 5.3.2. Интегральный показатель ресурсоэффективности

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования определен следующим образом:

$$I_{pi} = \sum a_i b_i, \quad (5.17)$$

где  $I_{pi}$  – интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов;

$a_i$  – весовой коэффициент  $i$ -го параметра;

$b_i$  – бальная оценка  $i$ -го параметра для аналога и разработки.

Таблица 5.15 – Сравнительная оценка характеристик вариантов ВКР

Объект исследования / Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог
1. Стабильность системы	0,3	5	4
2. Сложность получения	0,3	5	3
3. Удобство в использовании	0,2	3	5
4. Экологичность	0,2	4	5
Итого	1	4,4	4,1

$$I_{тек} = 5 \cdot 0,3 + 5 \cdot 0,3 + 3 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,2 = 4,4$$

$$I_{ан} = 4 \cdot 0,3 + 3 \cdot 0,3 + 5 \cdot 0,2 + 5 \cdot 0,2 = 4,1$$

### 5.3.3. Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки

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

$$I_{исп.i} = \frac{I_{р-исп.i}}{I_{фин.p}}, \quad (5.18)$$

$$I_{текущ.} = \frac{4,4}{0,982} = 4,5; \quad I_{ан} = \frac{4,1}{1} = 4,1$$

Для определения сравнительной эффективности проекта и выбора наиболее целесообразного варианта из предложенных интегральные показатели эффективности каждого варианта исполнения проекта сравнивались с интегральными показателями эффективности другого варианта (таблица 5.16).

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}, \quad (5.19)$$

$$\mathcal{E}_{cp,1} = \frac{4,5}{4,1} = 1,10, \quad \mathcal{E}_{cp,2} = \frac{4,1}{4,5} = 0,91.$$

Таблица 5.16 – Сравнительная эффективность разработки

Показатели	Текущий проект	Аналог
Интегральный финансовый показатель разработки	0,982	1
Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,4	4,1
Интегральный показатель эффективности	4,5	4,1
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,10	0,91

На основе сравнения средних интегральных показателей сопоставляемых вариантов можно сделать вывод о том, что более финансово- и ресурсоэффективным является текущий проект.

### Список публикаций студента

1. Ковальская Е.С. Получение, исследование физико-химических свойств и возможностей практического применения глубокоэвтектических растворителей на основе ДТПА и ЭДТА / Е.С. Ковальская, С.С. Иванова, А.В. Люляев // Химия и химическая технология в XXI веке. – 2021. – Т. 1. – С. 194-195.
2. Люляев А.В. Получение и исследование физико-химических свойств глубокоэвтектических смесей. Получение гетероарилдиазониевых солей и их производных в глубокоэвтектических смесях / А.В. Люляев, С.С. Иванова, Е.С. Ковальская // Химия и химическая технология в XXI веке. – 2021. – Т. 1. – С. 207-208.