

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

Школа _____ Инженерная школа природных ресурсов
 Направление подготовки _____ 18.04.01. Химическая технология
 Отделение школы _____ Отделение химической инженерии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Синтез сополимеров на основе лактида

УДК 678.764-13

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ01	Савинцова Татьяна Владиславовна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Волгина Т.Н.	К.х.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Былкова Т.В.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Сечин А.А.	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Гавриленко М. А.	д.х.н., доцент		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ОПП «ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ»

Универсальные компетенции	
УК(У)-1	способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действия
УК(У)-2	способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	готовность к коммуникации в устной и письменной формах на русском и иностранном языках для решения задач профессиональной деятельности
ОПК(У)-2	готовность руководить коллективом в сфере своей профессиональной деятельности, толерантно воспринимая социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОПК(У)-3	способность к профессиональной эксплуатации современного оборудования и приборов в соответствии с направлением и профилем подготовки
ОПК(У)-4	готовность к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез
ОПК(У)-5	готовность к защите объектов интеллектуальной собственности и коммерциализации прав на объекты интеллектуальной собственности
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	способность организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок, разрабатывать задания для исполнителей

ПК(У)-2	готовность к поиску, обработке, анализу и систематизации научно-технической информации по теме исследования, выбору методик и средств решения задачи
ПК(У)-3	способность использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
Профессиональные компетенции университета	
ДПК(У)-1	готовность к решению профессиональных производственных задач – контролю технологического процесса, разработке параметров проведения технологического процесса, разработке технологических расходных коэффициентов сырья и материалов, энергоресурсов, к выбору основного и вспомогательного оборудования
ДПК(У)-2	способность использовать математические модели и пакеты прикладных программ для описания и прогнозирования различных явлений
ДПК(У)-3	способность проводить технологические и технические расчеты по проектам, технико-экономический анализ проекта
ДПК(У)-4	способность разрабатывать учебно- методическую документацию

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

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

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
Гавриленко М. А.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

магистерской диссертации

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ01	Савинцовой Татьяне Владиславовне

Тема работы:

Утверждена приказом директора (номер, дата)	№31-65/с, 31.01.2022
---	----------------------

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>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>	<p>Объект исследование – методы полимеризации лактида и сополимеризация лактида с капролактамом и гликолидом. Сырье: полилактид товарный, капролактамы, гликолевая кислота, катализаторы: ZnO, октоат олова.</p>
---	---

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <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>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Обзор литературы 2. Объекты и методы исследования 3. Экспериментальные результаты и их обсуждение. 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение. 5. Социальная ответственность. 6. Выводы по работе
--	---

<p>Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	<p>Презентация</p>
--	--------------------

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы *(с указанием разделов)*

Раздел	Консультант
<ol style="list-style-type: none"> 1. Литературный обзор 2. Объекты и методы исследования 3. Результаты и обсуждения 	<p>к.х.н., доцент, Волгина Т.Н.</p>
<ol style="list-style-type: none"> 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение 	<p>к.эк.н., доцент, Былкова Т.В.</p>
<ol style="list-style-type: none"> 5. Социальная ответственность 	<p>к.т.н., доцент, Сечин А.А.</p>
<p>Раздел на иностранном языке</p>	<p>к.фил.н., доцент, Швагрукова Е.В.</p>

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

<p>Раздел 1. Литературный обзор (Literaturereview)</p>
<p> </p>

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

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
<p>доцент</p>	<p>Волгина Т.Н.</p>	<p>К.х.н.</p>	<p> </p>	<p> </p>

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
<p>2ДМ01</p>	<p>Савинцова Т.В.</p>	<p> </p>	<p> </p>

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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
 Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
 Уровень образования высшее образование – магистратура
 Отделение школы Отделение химической инженерии
 Период выполнения 2020/2022 учебного года

Форма представления работы:

Магистерская диссертация
(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

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

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела
05.10.2020-10.02.2020	Работа с научно-технической и нормативной литературой, проведение патентного поиска по теме	20
10.02.2020-01.02.2022	Проведение экспериментальных исследований	50
01.02.2022-01.03.2022	Обсуждение полученных экспериментальных результатов. Написание тезисов докладов по материалам работы	15
01.03.2022-05.06.2022	Написание магистерской диссертации. Выполнение разделов «Социальная ответственность» и «Финансовый менеджмент». Подготовка демонстрационных материалов и доклада для защиты	15
01.06.2022	Сдача готовой работы	100

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОХИ ИШПР	Волгина Т. Н.	к.х.н.		01.10.2020

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОХИ ИШПР	Гавриленко М. А.	д.х.н., профессор		01.10.2020

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

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ01	Савинцова Татьяна Владиславовна

Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение школы (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Стоимость материальных ресурсов и специального оборудования определены в соответствии с рыночными ценами России; тарифные ставки исполнителей определены штатным расписанием НИ ТПУ
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	1,3 районный коэффициент
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	Отчисления во внебюджетные фонды – 30,2%

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	Провести предпроектный анализ
2. <i>Разработка устава научно-технического проекта</i>	Представить Устав проекта: 1. Цели и результат проекта. 2. Организационная структура проекта. 3. Организация и допущения проекта
3. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	Разработать план управления НТИ
4. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	Оценить абсолютную эффективность НИ и сравнительную эффективность НИ

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

<ol style="list-style-type: none"> 1. Сегментирование рынка 2. Диаграмма Исикава 3. Матрица SWOT 4. Иерархическая структура работ проекта 5. Диаграмма Ганта 6. Группировка затрат по статьям 7. Реестр рисков 8. Расчет чистой текущей стоимости по проекту 9. Дисконтированный срок окупаемости 10. Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта 11. Сравнительная эффективность разработки

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН ШБИП	Былкова Т.В.	канд.экон.наук		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ01	Савинцова Т.В.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа		ФИО	
2ДМ01		Савинцова Татьяна Владиславовна	
Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение (НОЦ)	
Уровень образования	магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Тема ВКР:

Синтез сополимеров на основе лактида

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<p>Введение</p> <ul style="list-style-type: none"> – Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения. – Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации 	<p><i>Объект исследования: получение лактида, который служит исходным компонентом для получения полилактида, сополимеризация лактида с различными мономерами</i></p> <p><i>Область применения: медицина, упаковка, тканная инженерия</i></p> <p><i>Рабочая зона: лаборатория</i></p> <p><i>Размеры помещения: 6*15 м</i></p> <p><i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны: установка для вакуумной перегонки, роторный испаритель, ИК-спектрометр, прибор для определения температуры плавления MeltingPoint M-560</i></p>
--	---

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при эксплуатации:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p>Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ Федеральный закон от 28.12.2013 № 426-ФЗ «О специальной оценке условий труда» ГОСТ 12.2.033-78. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования</p>
<p>2. Производственная безопасность при эксплуатации:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов – Расчет уровня опасного или вредного производственного фактора 	<p>Опасные факторы:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Действие химических веществ; 2. Поражение электрическим током; 3. Возникновение пожара. <p>Вредные факторы:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Повышенный уровень шума; 2. Недостаток необходимого искусственного освещения; 3. Производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего; 4. Нервно-психические перегрузки, монотонность трудового процесса.

	<p>Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов: защитные очки, респиратор, резиновые перчатки, халат, приточно-вытяжная вентиляция, шумопоглощающие средства, люминесцентные лампы.</p> <p>Расчет: расчет системы искусственного освещения</p>
3. Экологическая безопасность при эксплуатации	<p>Воздействие на литосферу: бытовые отходы</p> <p>Воздействие на гидросферу: производственные сточные воды</p> <p>Воздействие на атмосферу: выбросы из вентиляционных систем, содержащие вредные вещества</p>
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при эксплуатации	<p>Возможные ЧС:</p> <p>Природные катастрофы (наводнение, землетрясение)</p> <p>Техногенные аварии (пожар, воздействие ядовитых веществ, террористические акты)</p> <p>Наиболее типичная ЧС: воздействие ядовитых веществ</p>
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ01	Савинцова Татьяна Владиславовна		

Реферат

Выпускная квалификационная работа включает 138 страниц, 28 рисунков, 56 таблиц, 53 литературных источников, 2 приложения

Ключевые слова: лактид, полилактид, гликолид, капролактам, сополимеризация, деполимеризация, поликонденсация.

Объектами исследования являются методы полимеризации лактида и сополимеризация лактида с капролактамом и гликолидом.

Цель работы – исследование процесса сополимеризации лактида, полученного из некондиционного сырья, с капролактамом и гликолидом.

В процессе исследования проводился синтез лактида, гликолида, полимеров и сополимеров на их основе в присутствии катализаторов.

В результате исследования идентифицированы продукты сополимеризации, изучено их строение, а также определены условия их получения.

Область применения: сополимеры на основе лактида могут быть рекомендованы для изготовления медицинских изделий, экологических покрытий и упаковочных материалов.

Работа является экономически эффективной и конкурентноспособной.

Определения, обозначения, сокращения

В данной работе применены следующие термины с соответствующими определениями:

Биоразлагаемый полимер: Полимерный материал, самопроизвольно разрушающийся в результате естественных микробиологических и химических процессов.

Некондиционные полимерные материалы: Отходы производства полимеров, изделия с истекшим сроком годности или вышедшие из употребления.

Сополимеризация: Цепной процесс совместной полимеризации двух и более различных мономеров, который приводит к образованию высокомолекулярных соединений (сополимеров), содержащих в цепных макромолекулах звенья исходных мономеров.

Нормативные ссылки

В настоящей работе использованы ссылки на следующие стандарты:

1. ГОСТ 10262-73. Реактивы. Цинк окись. Технические условия. [Текст]. – введ. 01.01.74. – М.: Государственный стандарт союза СССР, 1989. – 19с.
2. ГОСТ 12.2.033-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования: издание официальное: принят Постановлением Государственного комитета стандартов Совета Министров СССР от 26.04.1978 № 1100: дата введения 01.01.1979. – Москва: Изд-во стандартов, 1986. – переизд.2001. – 9с.
3. ГОСТ 12.0.003-2015. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация: принят Межгосударственным советом по стандартизации, метрологии и сертификации от 10.12.2015г № 48-2015: дата введения 01.03.2017. – переизд. 2019.
4. ГОСТ 12.1.003-2014. ССБТ. Шум. Общие требования безопасности: издание официальное: принят Межгосударственным Советом по стандартизации, метрологии и сертификации от 5.12.2014г № 46-2014: дата введения 01.11.2015. – Москва: Стандартинформ, 2015. – переизд.2019. – 27с.
5. ГОСТ 12.1.019-2017. ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты: издание официальное: принят Межгосударственным советом по стандартизации, метрологии и сертификации от 30.11.2017 № 52: дата введения 01.01.2019.
6. ГОСТ 12.1.007-76. ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности: издание официальное: утвержден и введен в действие Постановлением Государственного комитета СССР по стандартам от 10.03.1976г № 579: дата введения 01.01.1977. – Москва: Стандартинформ, 2007. – 7с.

Оглавление

Введение.....	17
1 Обзор литературы	18
1.1 Основные характеристики полимеров на основе лактида	18
1.1.1 Полилактид	18
1.1.2 Полигликолид.....	18
1.1.3 Поликапролактам	19
1.2 Способы синтеза полимеров на основе лактида	19
1.2.1 Катализаторы синтеза полимеров на основе лактида	23
1.3 Циклические диэфиры гликолевой и молочной кислоты, циклический амид аминокaproновой кислоты	23
1.3.1 Лактид.....	23
1.3.2 Гликолид	24
1.3.3 Капролактам	24
1.4 Способы получения циклических диэфиров, циклического амида	25
1.4.1 Способы получения лактида.....	25
1.4.2 Способы получения гликолида.....	26
1.4.3 Способы получения капролактама.....	27
1.5 Синтез сополимеров на основе лактида.....	29
1.5.1 Синтез сополимеров лактида с капролактамом.....	29
1.5.2 Синтез сополимеров лактида с гликолидом.....	30
1.6 Применение полимеров на основе лактида	31
2 Объекты и методы исследования	32
2.1 Характеристика сырья.....	32
2.2 Характеристика катализаторов	33
2.3 Характеристика растворителей.....	34
2.4 Методики проведения эксперимента	35
2.4.1 Методика получения олигомера гликолевой кислоты.....	35
2.4.2 Методика получения лактида и гликолида	36
2.4.3 Методика очистки синтезированного лактида и гликолида.....	37

2.4.4	Методика полимеризации лактида.....	38
2.4.5	Методика сополимеризации лактида с различными мономерами..	38
2.4.6	Методика определения температуры плавления	39
2.4.7	Методика определения молекулярной массы методом концевых групп.....	39
2.4.8	Методика проведения исследований методом ИК-спектроскопии..	40
3	Результаты и их обсуждение.....	41
3.1	Получение олигомера гликолевой кислоты.....	41
3.2	Деполимеризация олигомера гликолевой кислоты.....	41
3.3	Очистка гликолида.....	42
3.4	Деполимеризация олигомера молочной кислоты.....	43
3.5	Очистка лактида.....	44
3.6	Полимеризация лактида.....	44
3.7	Сополимеризация лактида с гликолидом и лактида с капролактамом..	45
3.8	Определение молекулярной массы методом кислотноосновного титрования.....	47
3.9	Расшифровка ИК-спектров.....	48
	Вывод.....	53
4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	55
4.1	Предпроектный анализ	55
4.1.1	Потенциальные потребители результатов исследования	55
4.1.2	Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения.....	56
4.1.3	Диаграмма Исикава.....	57
4.1.4	SWOT – анализ	60

4.1.5	Оценка готовности проекта к коммерциализации.....	61
4.1.6	Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования.....	63
4.2	Инициация проекта научным руководителем	63
4.3	Планирование управления научно-техническим проектом.....	65
4.3.1	Иерархическая структура работ проекта.....	65
4.3.2	Контроль события проекта.....	67
4.3.3	План проекта.....	67
4.3.4	Бюджет научного исследования.....	72
4.3.5	Организационная структура проекта	81
4.3.6	Матрица ответственности	81
4.3.7	План управления коммуникациями проекта.....	82
4.3.8	Реестр рисков проекта	83
4.4	Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования .	84
4.4.1	Оценка абсолютной эффективности исследования.....	84
4.4.2	Оценка сравнительной эффективности исследования.....	87
5.	Социальная ответственность	91
5.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	92
5.2	Производственная безопасность.....	94
5.2.1	Химические вещества.....	96
5.2.2	Отклонение показателей микроклимата в закрытом помещении...97	
5.2.3	Превышение уровня шума.....	98
5.3.4	Недостаточная освещенность рабочей зоны.....	98
5.3.5	Нервно-психические перегрузки, монотонность трудового процесса.....	102
5.3.6	Поражение электрическим током.....	103
5.3.7	Возникновение пожара.....	104
5.3	Экологическая безопасность.....	106
5.3.1	Атмосфера.....	106

5.3.2 Гидросфера.....	107
5.3.3 Литосфера.....	107
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	108
5.4.1 Чрезвычайные ситуации природного характера.....	108
5.4.2 Чрезвычайные ситуации техногенного характера.....	109
5.4.3 Чрезвычайные ситуации биолого-социального характера.....	111
Список публикаций студента.....	112
Список литературы.....	113
Приложение А (обязательное).....	121
Приложение Б. Расчет искусственного освещения.....	134

Введение

В настоящее время применение и производство пластиковых материалов увеличилось до больших объемов. По этой причине поднимается проблема переработки и утилизации продукции из полимеров, отходов производства после истечения срока использования таких материалов и изделий на их основе. Наибольший интерес ученых вызывает создание биоразлагаемых полимерных материалов, которые сохраняют свои свойства при их использовании, а после разлагаются на безвредные для окружающей среды компоненты [1]. Процесс утилизации и переработки таких полимеров является дорогостоящим. Для каждого вида полимера необходим свой подход. Решением данной проблемы является введение в переработку некондиционных биоразлагаемых полимерных материалов в качестве сырья.

Актуальность работы состоит в получении сополимеров, мономеры которых синтезируются из отходов производства. Таким образом, снижается стоимость сополимеров, производство которых дороже, чем получение полимеров из углеводородного сырья.

Цель работы: исследование процесса сополимеризации лактида, полученного из некондиционного сырья, с капролактамом и гликолидом.

Задачи исследования:

1. Провести аналитический обзор существующих методов синтеза сополимеров на основе лактида;
2. Подобрать оптимальные условия сополимеризации лактида с капролактамом и гликолидом;
3. Исследовать полученные соединения.

Практическая значимость работы состоит в том, что методом полимеризации с раскрытием цикла можно синтезировать сополимеры лактида (выделанного из некондиционного сырья) с гликолидом /капролактамом для дальнейшего применения в различных областях промышленности.

1 Обзор литературы

Полилактоны – это класс материалов с регулируемым сроком эксплуатации. В зависимости от состава, микроструктуры и надмолекулярной организации полилактоны – аморфные или частично кристаллические вещества со сроками разложения от нескольких месяцев до нескольких лет [2].

1.1 Основные характеристики полимеров на основе лактида

1.1.1 Полилактид

Полилактид – высокомолекулярное соединение из звеньев молочной кислоты [3]; температура стеклования 55 °С; температура плавления 215 °С (фактическая температура плавления 160 – 180 °С из-за наличия оптической активности) [2].

Полилактид – это бесцветный, прозрачный, термопластичный полимер [4], растворимый в органических и хлорированных растворителях, бензоле, ацетонитриле.

Полилактид подвергается термическому разложению при температуре более 200°С (например, термодеструкция *L*-полилактида начинается при 310°С и заканчивается к 400 °С). Разложение зависит от таких факторов как, температура, наличие примесей, концентрация катализатора (присутствие катализатора и примесей уменьшают температуру разложения, увеличивают скорость разложения, изменяют вязкость, ухудшают механические свойства) [5].

Полилактид имеет молекулярную массу 80000-500000 г/моль [3].

1.1.2 Полигликолид

Полигликолид – высокомолекулярное соединение из звеньев гликолевой кислоты [3].

Полигликолид имеет температура плавления 225-230°С, температуру стеклования 35-40°С [2], молекулярную массу более 10000 - 300000 г/моль [3].

Полигликолид не растворяется в органических растворителях (исключение - высокофторированные соединения) [2].

1.1.3 Поликапролактам

Поликапролактан (капрон, поли-ε-капроамид, найлон-6, полиамид 6) – синтетическое волокно, продукт полимеризации капролактама.

Поликапролактан – бело-прозрачное, очень прочное вещество.

Поликапролактан гигроскопичен, характеризуется высокой износостойкостью и механической прочностью: прочность при изгибе - 90 Мн/м², ударная вязкость 150-170 кдж/м².

Недостатками поликапролактама являются:

- неустойчивость к воздействию кислот (макромолекулы поликапролактама подвергаются гидролизу по месту амидных связей);

- низкая теплостойкость;

Температура плавления составляет 215 °С[6].

Поликапролактан имеет молекулярную массу 10000 – 35000 г/моль.

1.2 Способы синтеза полимеров на основе лактида

Известны следующие способы синтеза полимеров на основе лактида (рис. 1.1) [2,7]:

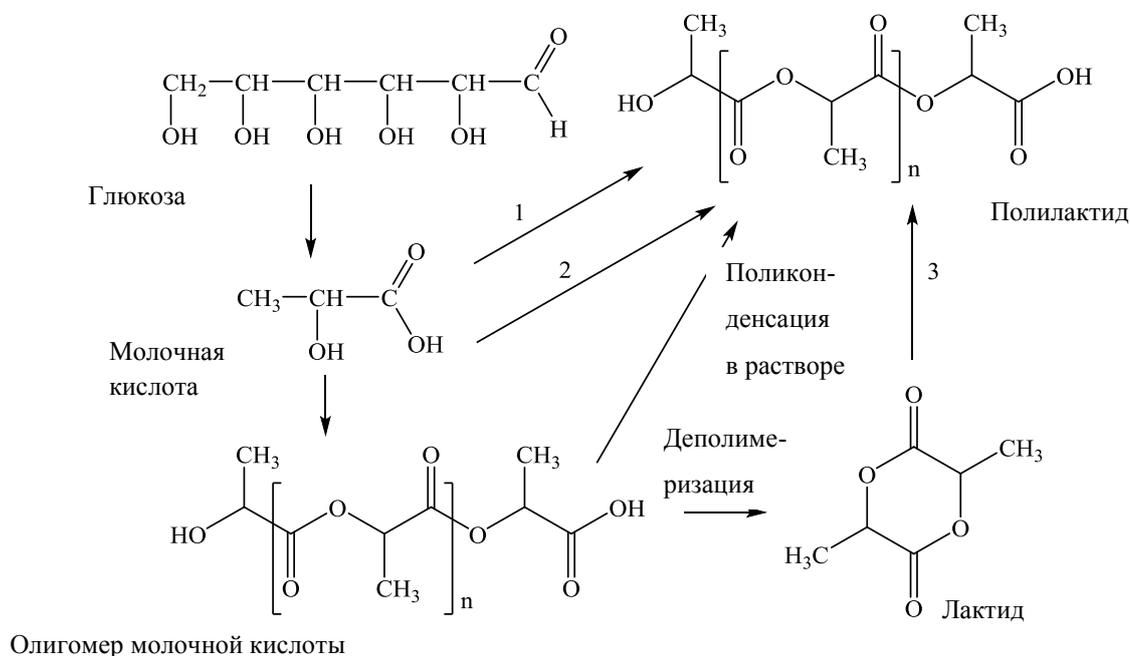


Рисунок 1.1 – Методы получения полимеров на основе лактида (на примере полилактида): 1 – Прямая поликонденсация; 2 – Азеотропная поликонденсация; 3 – Полимеризация с раскрытием цикла

В таблице 1.1 приведены достоинства и недостатки методов получения полимеров на основе лактида

Таблица 1.1 – Достоинства и недостатки методов получения полимеров на основе лактида

№	Метод	Достоинства	Недостатки
1	Прямая поликонденсация	Одностадийность	- получение низкомолекулярного полимера (1-5 кДа); - низкий выход продукта из-за увеличения вязкости реакционной среды; - затрудненное удаление воды
2	Азеотропная поликонденсация	Получение высокомолекулярного полимера (300 кДа)	- продолжительность реакции (около 72 часов); - дорогостоящий и вредный для экологии метод из-за использования больших объемов органических растворителей; - Трудно- и энергозатратный метод из-за осуществления вспомогательных стадий для извлечения полимера из растворителя
3	Полимеризация с раскрытием цикла	- контроль реакции (возможность варьировать температуру, концентрацию мономера); - получение полимера с высокой молекулярной массой; - узкое молекулярно-	- необходимость отделения растворителя и сушки полимера; - необходимость регенерации растворителя

		массовое распределение полимера	
--	--	---------------------------------	--

Наиболее часто используют 3-ий метод из-за высокой чистоты исходного димера.

Полимеризация может быть проведена по следующим механизмам:

Координационный механизм

Механизм координационной полимеризации представлен на рисунке 1.2 [9]:

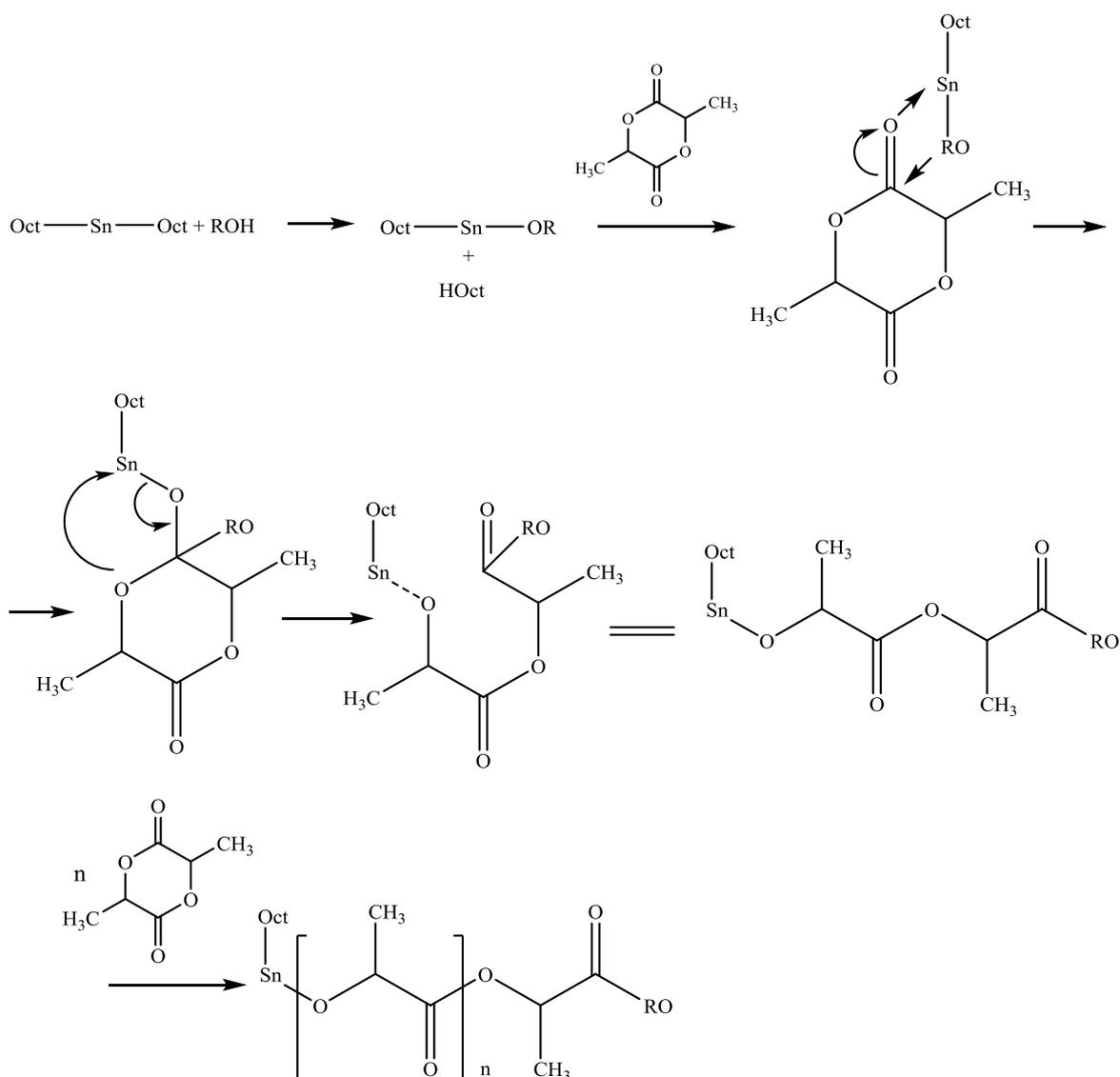
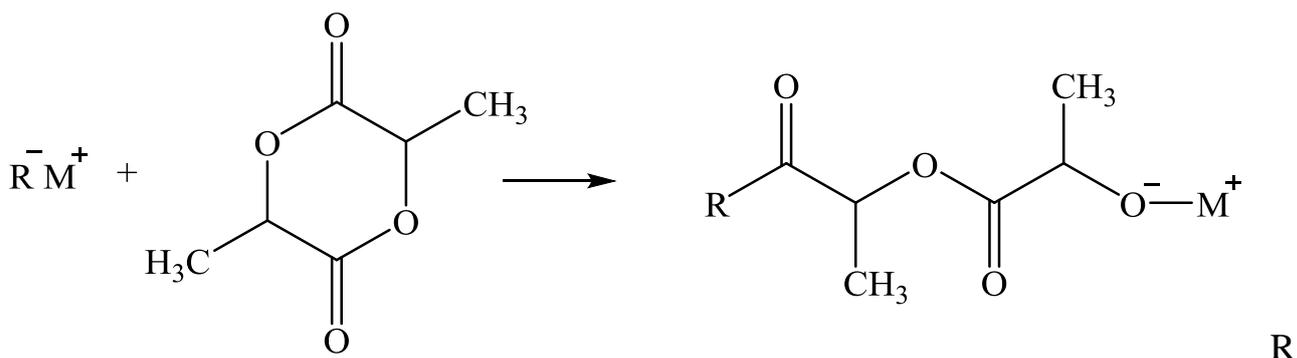


Рисунок 1.2 – Механизм координационной полимеризации с раскрытием цикла (катализатор – октоат олова)

В начале реакции катализатор (октоат олова) вступает во взаимодействие с гидроксильными группами инициатора с образованием алкоксида олова. Затем происходит взаимодействие образовавшегося алкоксида олова с карбонильной группой мономерного кольца, в результате чего происходит открытие кольца и приобретение молекулой линейного вида. Далее мономер вставляется в связи между оловом и кислородом алкоксида олова (процесс повторяющийся), что приводит к увеличению полимерной цепи и молекулярной массы [10].

Анионный механизм

Анионная полимеризация с раскрытием цикла лактида происходит через ацильное расщепление (рис.1.3). Иницирование происходит за счет раскрытия циклического кольца с помощью нуклеофильной атаки.



– алкил, аокси;

M – Li. K. Mg

Рисунок 1.3 – Механизм анионной полимеризации

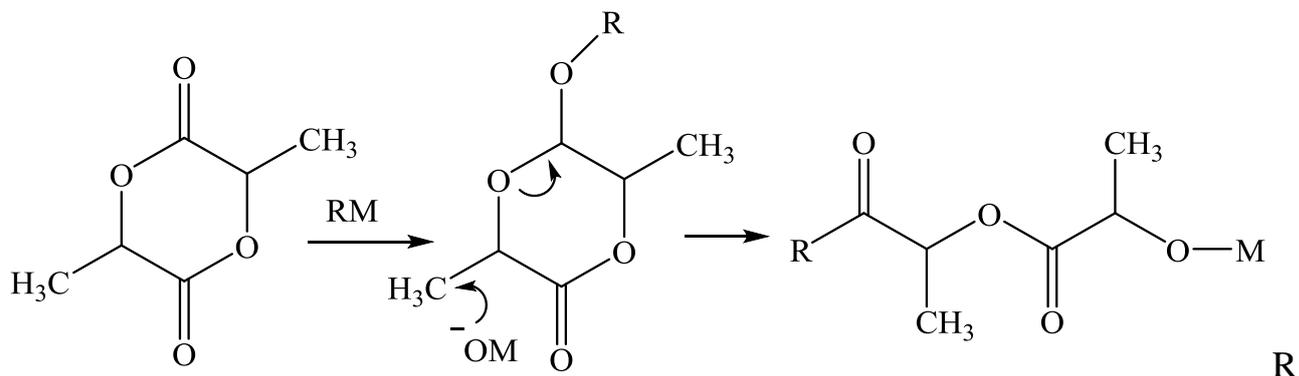
Для проведения анионной полимеризации типичными катализаторами являются метоксид калия, трет-бутилат калия[9].

Катионный механизм

Катионная полимеризация представляет наименьший интерес относительно других способов полимеризации.

Эффективными катализаторами в катионной полимеризации является трифторметансульфокислота, метилтрифторметансульфонат, толуолсульфокислота, трехфтористые и трифторуксусные кислоты.

Полимеризация происходит путем расщепления алкил-кислородных связей (рис.1.4) [9].



– H, Me;

M – CF₃SO₄

Рисунок 1.4 – Механизм катионной полимеризации лактида

1.2.1 Катализаторы синтеза полимеров на основе лактида

Для синтеза полилактонов используют следующие катализаторы::

- Кислоты (серная, метансульфоновая, толуолсульфокислота);
- Оксиды металлов Zn, Sn, Al;
- Различные комплексы металлов (Li, Zn, Al, Ti, Mg, Ca);
- Металлы IV, V или VIII групп и их соединения [7].

Часто используемый в качестве катализатора для проведения полимеризации октоат олова характеризуется высокой активностью, доступностью, растворимостью в органических растворителях и в расплаве мономера.

1.3 Циклические диэфиры гликолевой и молочной кислоты, циклический амид аминокaproновой кислоты

1.3.1 Лактид

Лактид (2,5-дикето-3,6-диметил-1,4-диоксан) – внутренний циклический эфир (дилактон) молочной кислоты[11]; белый кристаллический эфир, легко растворимый в органических растворителях, гидролизуеться до молочной кислоты, сополимеризуется с лактонами [5].

Лактид проявляет оптическую активность. Имеет 3 изомерных формы: *L*-лактид, *D*-лактид и мезо-лактид (рис. 1.5)[12]. Помимо того, эквивалентная смесь *L*-лактида и *D*-лактид образует рацемическую смесь [7].

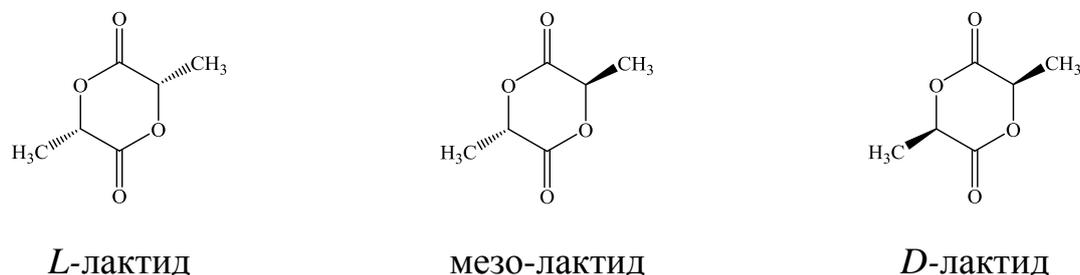


Рисунок 1.5 – изомерные формы лактида

Физические характеристики лактида представлены в таблице 1.2 [6].

Таблица 1.2 - Физические характеристики лактида

	Размерность	<i>D</i> -лактид	<i>L</i> -лактид	мезо-лактид	Рац-лактид
Молекулярный вес	г/моль	144,12			
Температура плавления	°С	96-97	96	53	125
Теплота плавления	Дж/г		146	128	185
Плотность	г/см ³	1,32-1,38			

1.3.2 Гликолид

Гликолид (2,5-дикето-1,4-диоксан) – это внутренний циклический эфир (дилактон) гликолевой кислоты; белое кристаллическое вещество [9].

У гликолида одна оптическая форма с температурой плавления 85 °С [2], температура сублимации равна 80-84 °С.

Гликолид растворим в бензоле, этилацетате и органических растворителях, полимеризуется и сополимеризуется с этиленом, лактонами, лактамами и циклическими аминами [9].

1.3.3 Капролактам

Капролактам – циклический амид (лактам) аминокaproновой кислоты; кристаллическое вещество белого цвета, маслянистое на ощупь; является осушителем воздуха; при воздействии кислорода воздуха и солнечной радиации желтеет.

Капролактам хорошо растворим в воде, спирте, бензоле и плохо растворим в алифатических углеводородах, полимеризуется [13,14].

1.4 Способы получения циклических диэфиров, циклического амида

1.4.1 Способы получения лактида

Известны следующие способы синтеза лактида (рис. 1.6):

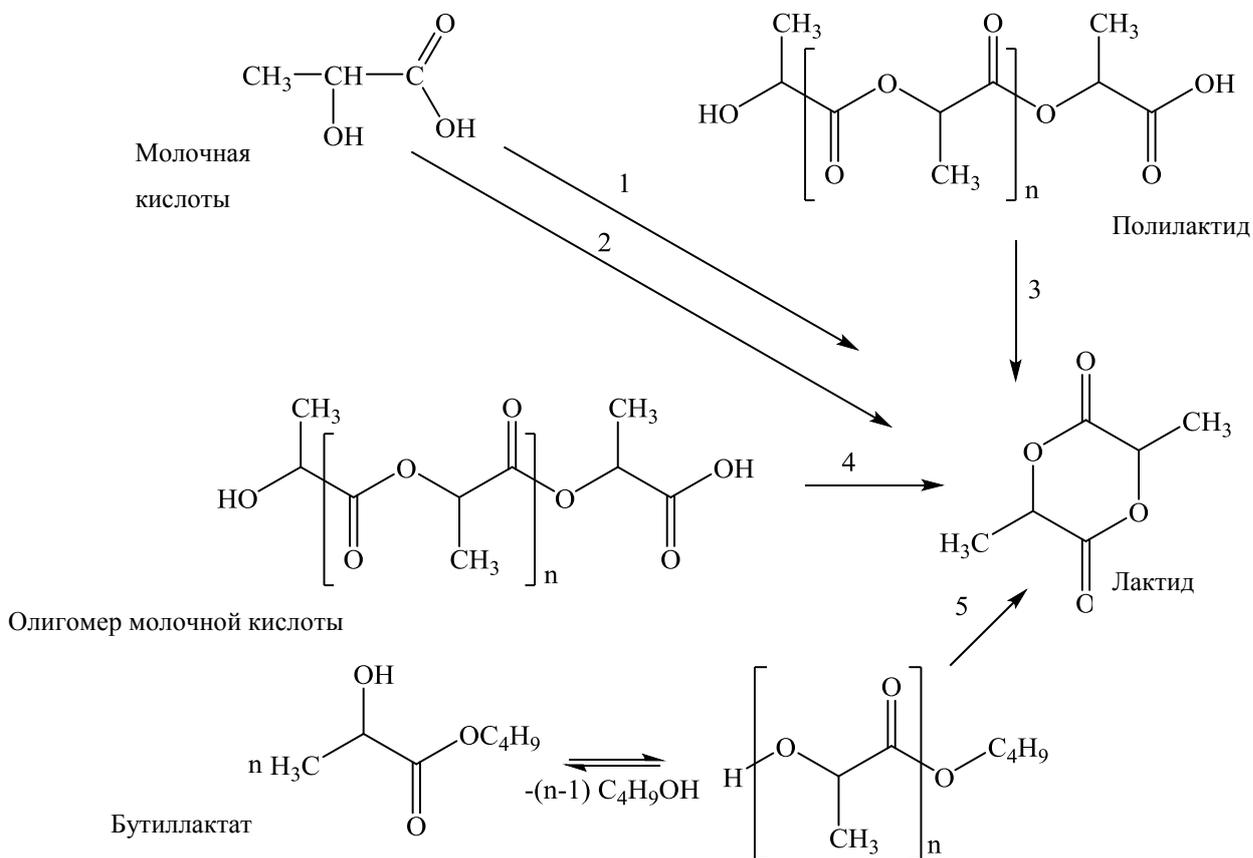


Рисунок 1.6 – Схема получения лактида: 1 - Дегидратация раствора молочной кислоты; 2 - Гетерогенно-каталитическая дегидратация раствора молочной кислоты в газовой фазе; 3 - Термическая деструкция отходов полилактоида; 4 - Деполимеризация олигомера молочной кислоты; 5 - Синтез из бутиллактата.

1. Дегидратация раствора молочной кислоты

Плюсами синтеза лактида в растворе считается то, что процесс можно осуществлять в 1-ом реакторе и при разном давлении. Однако использование растворители для извлечения образовавшегося мономера из раствора делает этот метод не эффективным.

2. Гетерогенно-каталитическая дегидратация раствора молочной кислоты в газовой фазе

Синтез лактида в газовой фазе характеризуется невысокими выходами лактида (до 13%), помимо этого необходимо большое потребление газоносителя.

3. Термическая деструкция отходов полилактида и изделий из него.

При использовании данного метода решается проблема утилизации отходов полимерного производства. Однако, при деструкции полимерные отходы разлагаются на разнообразные продукты, что делает полученный мономер грязным и в дальнейшем необходима его очистка [7].

4. Деполимеризация олигомера молочной кислоты

Полученный при деполимеризации мономер можно использовать для получения полимера даже без предварительно очистки.

Минусами метода является:

- удаление лактида вместе с примесями (линейные эфиры молочной кислоты, молочная кислота) из-за глубокого вакуума;
- высокие концентрации катализатора (0,35 масс. % в расчете на чистое олово).

5. Синтез из бутиллактата

Один из методов получения лактида считается олигомеризация бутиллактата с дальнейшей деполимеризацией олигомера. В качестве катализатора используют хлорид олова (IV).

Для смещения равновесия в сторону формирования олигомеров процесс проводят при постоянном удалении паров бутанола и постепенном увеличении температуры от 180 до 200 °С. Через реакционную массу пропускают азот [5].

1.4.2 Способы получения гликолида

Методы синтеза гликолида меньше исследованы из-за высокой гидрофильности вещества [5].

Известны следующие методы синтеза гликолида:

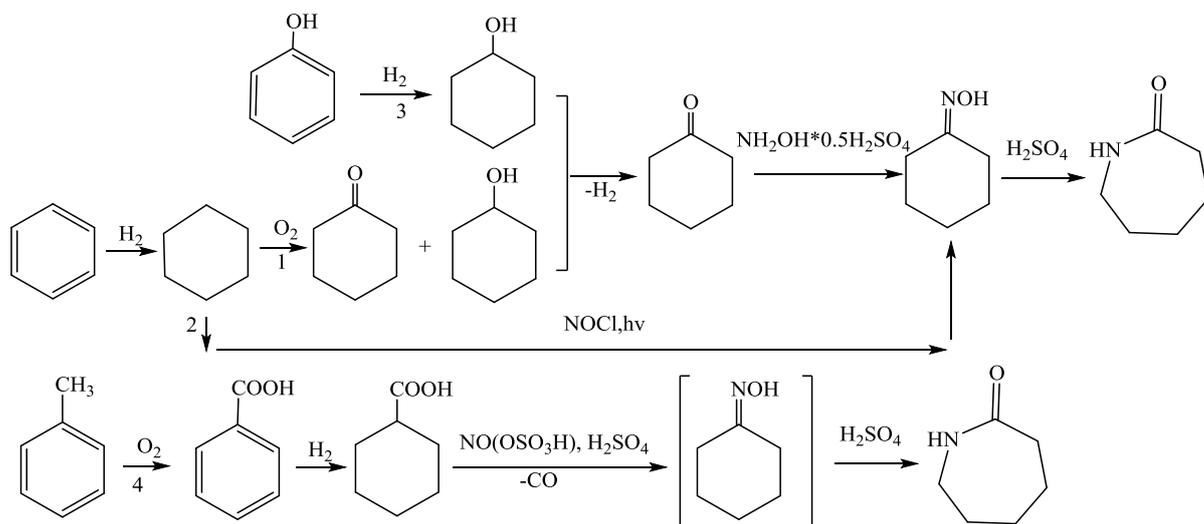


Рисунок 1.9 – Схема получения капролактама:

1 – окислительный метод; 2 – фотохимический метод; 3 – фенольный метод; 4 – толуольный метод

1. Окислительный метод

Достоинства метода: доступное сырье.

Недостатки метода: низкий выход капролактама (66-68 %); высокие затраты на рецикл.

2. Фотохимический метод

Достоинства метода: малостадийность.

Недостатки метода: требуется специальное оборудование; сильная коррозия под действием NOCl.

3. Фенольный метод

Выход капролактама составляет 86-88%.

Достоинства метода: большая селективность; чистота продукта.

Недостатки метода: высокая стоимость фенола по сравнению с углеводородами.

4. Толуольный метод

Выход капролактама составляет 71%.

Достоинства метода: дешевое сырье [14,16].

Недостатки метода: сложная очистка продукта; высокий расход олеума.

Наибольший интерес представляет получение капролактама из отходов производства полиамида (водного раствора капролактамно-олигомерного экстракта и твердых поликапроамидных отходов): в начале происходит деполимеризация поликапроамида, затем выделение лактама перегонкой или обработкой перегретым водяным паром [17].

Достоинства метода: решается проблема утилизации отходов полимерного производства.

Недостатки метода: низкий выход продукта.

1.5 Синтез сополимеров на основе лактида

Для получения сополимеров на основе лактида используют 2 метода:

1. поликонденсация: в качестве сырья используют оксикислоты (гликолевую, молочную, аминакапроновую и т.д.), процесс проводят при температуре 160 °С в течение 40 часов в присутствии катализатора (соединения олова) и сокатализатора (лауриловый спирт).

Недостатки метода: выделение воды (которую необходимо удалять), многостадийность, длительность процесса, получение низкомолекулярных продуктов.

2. полимеризация: в качестве сырья используют циклические сложные эфиры (гликолид, лактид, капролактамы и т.д.), синтез проводят при температуре 120-220 °С в течение 8 часов в присутствии катализатора (соединения олова). Реакция протекает без выделения воды, что позволяет получить сополимеры большей молекулярной массы.

В промышленности сополимеры на основе лактида, в основном, получают полимеризацией. Рассмотрим несколько способов полимеризации лактида с гликолидом/капролактамом.

1.5.1 Синтез сополимеров лактида с капролактамом

В работе [18] синтез сополимеров проводили при соотношении лактид: капролактамы = 50:50 (рис. 1.10) в сушильном шкафу при температуре 170-180 °С

в присутствии октоата олова (катализатор) и лаурилового спирта (сокатализатор) и длительностью синтеза 24 часа.

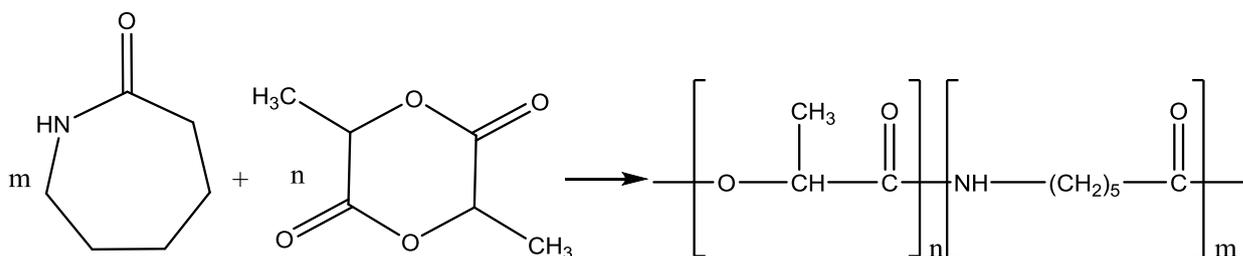


Рисунок 1.10 – Схема сополимеризации лактида с капролактамом

Проводили 3 синтеза:

- 1) в присутствии октоата олова (0,13 масс. %) при температуре 170 °С.
- 2) в присутствии октоата олова (0,13 масс. %) и лаурилового спирта (0,17 масс. %) при температуре 170 °С.
- 3) в присутствии октоата олова (0,23 масс. %) при температуре 180 °С.

Во всех синтезах получили соолигомеры капролактама с *L*-лактидом, представляющие собой воскоподобные вещества желто-оранжевого цвета. Но сополимер, полученный во 2-ом синтезе имел большую молекулярную массу.

В работе [19] исследована сополимеризация лактида и капролактамом при 130 °С и различных соотношениях, в качестве катализатора использовался октоат олова. На начальных стадиях реакции во всех случаях были обогащены лактидом. Синтезированные сополимеры имеют высокую полидисперсность ($D > 2,0$).

1.5.2 Синтез сополимеров лактида с гликолидом

В работе [20] сополимеризацию лактида с гликолидом (мольное соотношение лактид : гликолид = 1:1) проводили в ампулах из термостойкого стекла в термостате при температуре 170 °С в присутствии катализатора четыреххлористого олова (0,1 масс. %). В результате синтеза получен сополимер, строение которого исследована ЯМР 1Н-спектроскопией (присутствуют квартеты и дуплеты соответствующие лактидным, синглеты – гликолидным фрагментам сополимера).

Синтез, описанный в работе [21] проводился по следующей схеме: в реактор, снабженный мешалкой загружают гликолид и лактид (соотношение гликолид: лактид = 99:1), октоат олова (II) и лауриловый спирт (0,02 – 0,05 мол.%). Смесь выкумуировали 15 минут (температура 50 °С, давление 1-5 мм.рт.ст.). Затем вакуум заполняли азотом, включали мешалку, нагревали смесь до 80 °С и держали при данной температуре 5 минут. Далее реакционную смесь нагревали до 190 °С, выдерживали 5 минут. Затем нагревали до 210 °С и проводили полимеризацию 30-50 минут. В результате получили сополимер гликолида с лактидом с молекулярной массой 200-400 кДа и логарифмической вязкостью 1,5-2,5 дл/г.

1.6 Применение полимеров на основе лактида

В конце 20 века были получены шовные нити на основе полигликолида. С этого момента полимеры на основе лактонов нашли применение в медицине в качестве материалов для изготовления крепежных изделий для травматологии и ортопедии, сосудистых стентов, противоспаечных пленок, систем контролируемого высвобождения лекарств на основе наночастиц. Системы контролируемой и адресной доставки препаратов на основе полилактонов активно разрабатываются в настоящее время. Так же полилактоны находят применение в качестве замены неразлагающихся полимеров при изготовлении упаковки, контейнеров, одноразовой посуды. Из-за своей биосовместимости, доступности и способности регулировать свойства, полилактоны применяются для получения новых функциональных материалов и изделий для медицины [2, 22, 23].

2 Объекты и методы исследования

2.1 Характеристика сырья

В качестве сырья использовали некондиционный полилактид, гликолевую кислоту (70%), товарный капролактан, этилацетат, оксид цинка, октоат олова, изопропиловый спирт, хлороформ, этиловый спирт, гидроксид калия, хлористый кальций.

Полилактид – биоразлагаемый, биосовместимый, термопластичный, алифатический полиэфир, мономером которого является молочная кислота [24].

Основные физико-химические свойства полилактида представлены в таблице 2.1 [24, 4].

Таблица 2.1 – Физико-химические свойства полилактида

Систематическое наименование	Поли((3,6-диметил-1,4- диоксан-2,5-дион)
Сокращения	ПЛА
Химическая формула	$(C_3H_6O_3)_x$
Состояние	Бесцветный, прозрачный
Молекулярная масса, г/моль	$(72)_n$
Плотность, г/см ³	1,290 (кристаллический) 1,248 (аморфный)
Температура, °С: плавления стеклования размягчения	170-180 (100% L-ПЛА) 54-58 (L-ПЛА) 50-53 (L, D-ПЛА) 50
Прочность, МПа: на изгиб на разрыв	55,3 57,8
Растворимость в: органических растворителях	Растворим

Гликолевая кислота - простейшая гидроксикислота.

Физико-химические свойства гликолевой кислоты представлены в таблице 2.2 [25].

Таблица 2.2– Физико-химические свойства гликолевой кислоты

Систематическое наименование	Гликолевая кислота
Рациональное название	гидроксиуксусная кислота, гидроксиэтановая кислота
Химическая формула	HOOCCH ₂ OH
Брутто-формула	C ₂ H ₄ O ₃
Состояние	Бесцветные кристаллы
Молекулярная масса, г/моль	76,05
Плотность, г/см ³	1,27
Температура, °С: плавления	+79
Прочность, МПа: на изгиб на разрыв	55,3 57,8
Растворимость в: воде спирте эфирах	Растворима Растворима Растворима

Капролактam (азепан-2-он) - циклический амид (лактam) аминокaproновой кислоты [26].

Физические свойства капролактама представлены в таблице 2.3 [26].

Таблица 2.3 – Физические свойства капролактама

Систематическое наименование	Азепан-2-он
Традиционное название	Капролактam
Состояние	Твердое
Молекулярная формула	C ₆ H ₁₁ ON
Молекулярная масса, г/моль	113,16
Плотность (при 70 ⁰ С), г/см ³	1,01
Температура, °С: кипения плавления	270 68,8

2.2 Характеристика катализаторов

Оксид цинка (ZnO) – белый/желтоватый порошок, нерастворимый в воде, растворим в минеральных кислотах, уксусной кислоте, растворах ще-

лочей, аммиака и углекислого аммония; желтеет при нагревании и возгоняется при 1800 °С. Молекулярная масса 81,38 г/моль, плотность 5,7 г/см³, показатель преломления 2,015 - 2,068 [27].

Октоат олова (SnOct₂) – прозрачная светло-желтая жидкость, растворимая в полиолах в органических растворителях, не растворимая в спиртах и в воде. Температура плавления 21,6 °С, температура кипения 400 °С, молекулярная масса 405,12 г/моль, плотность 1,251 г/см³ [28].

2.3 Характеристика растворителей

Этилацетат (этиловый эфир уксусной кислоты (C₄H₈O₂)) – летучая, бесцветная жидкость с резким запахом эфира. Молярная масса 88,11 г/моль, температура плавления минус 83,6 °С, температура кипения 77,1 °С, плотность 0,9001 г/см³, показатель преломления 1,3724. Растворяется в воде, в этаноле, диэтиловом эфире, бензоле, хлороформе; образует двойные азеотропные смеси с водой, этанолом, метанолом, изопропанолом, CCl₄, циклогексаном [29].

Этанол (этиловый спирт (C₂H₅OH)) – летучая, легко воспламеняющаяся, бесцветная прозрачная жидкость с характерным запахом и сладковато-жгучим вкусом. Легче воды (плотность 0,789 г/см³). Является растворителем органических веществ и неорганических солей. Молекулярная масса 46,07 г/моль, температура кипения 78,39 °С, температура замерзания минус 114,15 °С. Смешивается с бензолом, водой, глицерином, диэтиловым эфиром, ацетоном, метанолом, уксусной кислотой, хлороформом [30].

Хлороформ (трихлорметан (CHCl₃)) – бесцветная жидкость со слабым запахом, растворимая в органических растворителях. Температура плавления минус 63,5 °С, температура кипения 61,1 °С, плотность 1,483 г/см³, молекулярная масса 119,38 г/моль [31].

Изопропиловый спирт (пропан-2-ол, изопропанол (CH₃CH(OH)CH₃)) – прозрачная, бесцветная жидкость с резким характерным запахом и мягким горьким вкусом. Хорошо растворяет многие эфирные масла, алкалоиды, некоторые синтетические смолы, некоторые виды пластмасс и резины. Изо-

пропиловый спирт растворим в ацетоне, в бензоле, с остальными растворителями (вода, органические) смешивается в любых соотношениях. Смеси паров изопропанола с воздухом образуют взрывчатые смеси. С водой образует азеотропную смесь 87,9%-го изопропилового спирта с температурой кипения 80,2 °С. Температура плавления минус 89,5 °С, температура кипения 82,4 °С, плотность 0,7851 г/см³, молекулярная масса 60,09 г/моль, показатель преломления 1,3776 [32].

2.4 Методики проведения эксперимента

2.4.1 Методика получения олигомера гликолевой кислоты

Навеску водного раствора гликолевой кислоты (70 %) помещали в выпарную колбу роторного испарителя (рис.2.1).

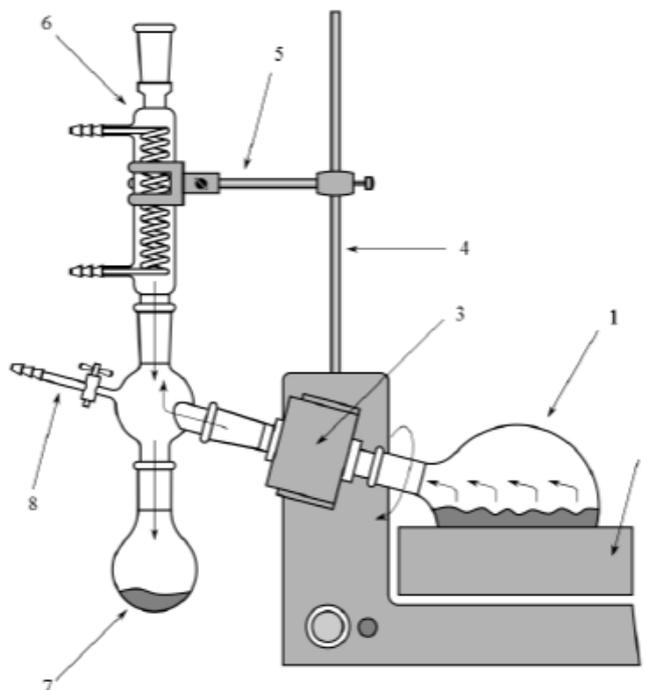


Рисунок 2.1 – Роторный испаритель:

1 – круглодонная колба, 2 – баня с силиконовым маслом 3 – привод вращения, 4 – штатив, 5 – лапка (или держатель), 6 – обратный холодильник, 7 – приемник, 8 – кран для сброса вакуума.

Задавали следующие начальные условия синтеза: температура 130°С и давление 500мбар. В ходе синтеза последовательно изменяли значения температуры и давления (табл.2.4).

Таблица 2.4 – Условия получения олигомера гликолевой кислоты

Время	Температура, °С	Давление, мбар
0	130	500
80	150	500
100	180	500
120	180	300
140	180	100

Первые 80 минут наблюдали отгонку растворной воды. При температуре 180 °С и давлении 100 мбар наблюдали отгонку реакционной воды, выделяющейся в ходе реакции поликонденсации. По истечении 2,5 часов синтез останавливали.

2.4.2 Методика получения лактида и гликолида

Для синтеза лактида и гликолида использовали установку, представленную на рис. 2.2.

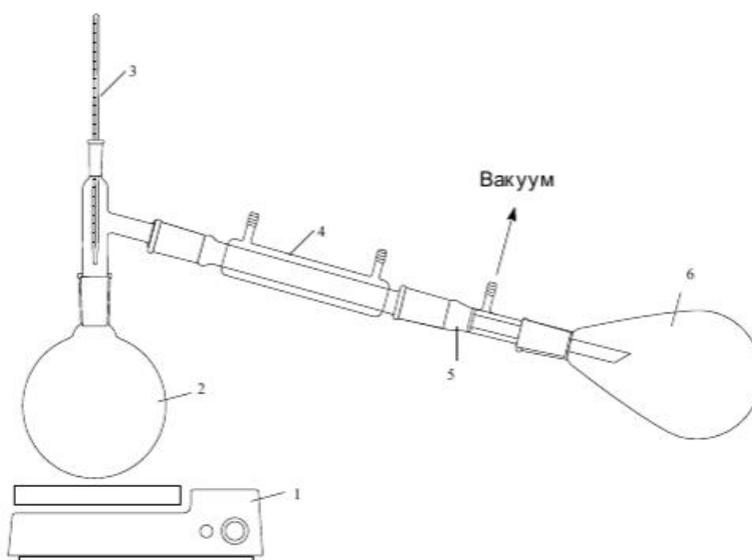


Рисунок 2.2 – Лабораторная установка для термической деструкции полилактида:

1 – электрическая плита, 2 – круглодонная колба, 3 – термометр, 4 – воздушный холодильник, 5 – аллонж, 6 – приемник

Полилактид товарный, олигомер гликолевой кислоты и катализатор (ZnO) в количестве 1-2% (масс.) от массы полилактида загружали в реактор. В качестве реактора и приёмника использовали круглодонные колбы, кото-

рые изначально взвесели для определения массы сырца по окончании синтеза. Для предотвращения забивания протока холодильника сырцом использовали термофен, для прогревания зон застывания сырца.

Синтез проводили при температуре процесса 140-190 °С (зона паров) и давлении 10 мбар. Синтез вели до полного разложения сырья. По окончании синтеза разбирали установку и проводили взвешивание приемника для определения массы синтезированного циклического диэфира-сырца. Отбирали пробы сырца для их исследования методом ИК-спектроскопии.

2.4.3 Методика очистки синтезированного лактида и гликолида

Полученные лактид-сырец и гликолид-сырец содержат преимущественно остатки молочной кислоты и гликолевой кислоты, соответственно, и олигомеры, которые при дальнейшем синтезе могут значительно ухудшить свойства полимера. Поэтому для дальнейшего использования мономеров необходима стадия очистки.

Для очистки сырца использовался метод перекристаллизации из этилацетата. Перекристаллизацию проводили на стандартной установке (рис.2.3). Нагрев массы осуществлялся до полного растворения сырца.

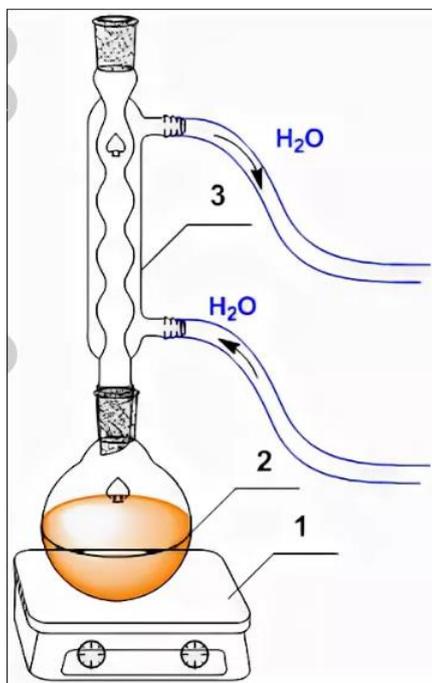


Рисунок 2.3 – Установка для перекристаллизации:

1 – колбонагреватель; 2 – колба; 3 – обратный холодильник

В колбу с сырцом приливали рассчитанное количество (в зависимости от массы сырца) этилацетата, затем нагревали до полного растворения сырца и выдерживали 30 мин при слабом кипячении. После этого раствор охлаждали сначала при комнатной температуре, затем в холодильнике до выпадения кристаллов циклического диэфира.

Для фильтрации использовали лабораторную установку для фильтрации в вакууме, состоящей из колбы Бунзена, воронки Бюхнера и вакуумного насоса.

Сушку продукта проводили в вакуумном сушильном шкафу.

2.4.4 Методика полимеризации лактида

Полимеризацию лактида проводили на роторном испарителе (см. рис. 2.1).

Синтезированный мономер (лактид) помещали в круглодонную колбу роторного испарителя. Добавляли катализатор (октоат олова) в количестве 1,5 % от массы лактида. Условия эксперимента указаны в таблице 2.5.

Таблица 2.5 – Условия эксперимента полимеризации лактида

Время, мин	Температура, °С	Давление, мбар	Обороты колбы, об/мин
0	120	25	60
30	140	150	45
70	160	300	30
130	170	450	15
250	180	600	10

По истечении 6 часов синтез останавливали.

2.4.5 Методика сополимеризации лактида с различными мономерами

Сополимеризацию лактида с различными мономерами проводили по двум методикам:

1. на роторном испарителе (см. рис. 2.1).

Соотношения лактид:гликолид = 1:1 (мас).

Соотношение лактид:капролактан = 80:20 (мас).

Синтезированный лактид помещали в круглодонную колбу роторного испарителя. Добавляли гликолид или капролактam, катализатор (октоат олова) в количестве 1% от массы мономеров. Условия эксперимента указаны в таблице 2.5.

По истечении 6 часов синтез останавливали.

2. в сушильном шкафу.

Соотношения лактид:гликолид = 1:1 (масс).

Соотношение лактид:капролактam = 1:1 (масс).

К рассчитанному количеству мономеров добавляли 0,13 масс.% октоата олова и выдерживали в сушильном шкафу при 180 °С в течение 24 часов.

2.4.6 Методика определения температуры плавления

Высушенные образцы веществ, измельчённые при необходимости, помещались в стандартные капилляры и утрамбовались. Визуальное определение температуры плавления проводилось на приборе MeltingPoint M-560 (рис.2.4) при скорости нагрева 1°С в минуту с установкой нижнего предела контролируемого нагрева на 20 °С ниже предполагаемой температуры плавления.



Рисунок 2.4 – Прибор для определения температуры плавления MeltingPoint M-560

2.4.7 Методика определения молекулярной массы методом концевых групп

Навеску анализируемого вещества 0,1 г помещали в колбу. Добавляли 7,5 мл этанола и 1-2 капли спиртового раствора фенолфталеина. Титрование

проводили раствором КОН (0,1 н) до появления малиновой окраски в растворе, не исчезающей в течение 30 секунд. Параллельно проводили холостой опыт.

По полученным данным рассчитывали кислотное число (КЧ) олигомера по формуле:

$$KЧ = \frac{(a - б) \cdot 0,0056 \cdot K}{g} \quad (1)$$

где а – объем 0,1 н раствора КОН, пошедший на титрование анализируемого вещества, мл; б – объем 0,1 н раствора КОН, пошедший на титрование холостой пробы, мл; 0,0056 – число грамм КОН в 1 мл 0,1 н раствора КОН; К – поправка на 0,1 н раствор КОН; g – навеска анализируемого вещества, г.

По величине кислотного числа определяли среднюю молекулярную массу по формуле:

$$\overline{M}_n = \frac{56,11 \cdot 1000}{KЧ} \quad (2)$$

2.4.8 Методика проведения исследований методом ИК-спектроскопии

Для проведения анализа на ИК-спектрометре проводили пробоподготовку исследуемых образцов: полученные соединения предварительно очищали от примесей перекристаллизацией из этилацетата.

В результате проведенного анализа получали ИК-спектры образцов, которые расшифровывали с помощью аналитических таблиц, определив основные полосы поглощения для функциональных групп, содержащихся в исследуемом веществе.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Получение сополимеров на основе лактида является коммерчески привлекательным проектом, так как продукты, получаемые в результате полимеризации лактида с различными мономерами, востребован рынком (получаемые продукты биосовместимы с организмом человека, не токсичны, что позволяет широко использовать эти полимеры в медицине в качестве шовного материала, имплантов различного назначения, а также в фармакологии как матрицы для пролонгирования лекарственных препаратов, в пищевой промышленности для изготовления самоутилизируемых упаковок и пленок).

Таким образом, целью раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» является определение эффективности научно-исследовательского проекта.

4.1 Предпроектный анализ

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Для анализа потребителей результатов исследования целесообразно выбрать два наиболее значимых критерия: размер компании и вид продукции (табл.4.1).

Таблица 4.1 – Карта сегментирования рынка производства сополимеров на основе лактида

		Вид производственной продукции					
		Упаковочные изделия	Шовный материал для медицины, импланты	Нити для 3D-печати	Одноразовая посуда	Фармацевтические препараты	Средства гигиены
Размер компании	Крупные						
	Средние						
	Мелкие						

BBCA&Galactic (Китай)	NatureWorks (США)	TotalCorbion (Нидерланды)	Германия, Франция, Италия
--------------------------	----------------------	------------------------------	---------------------------------

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Оценочная карта конкурентных товаров и разработок представлена в таблице 4.2.

Таблица 4.2 - Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерий оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Выход сополимера	0,50	3	5	4	1,50	2,50	2,00
2. Молекулярная масса	0,20	4	5	4	0,80	1,00	0,80
3. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,07	4	5	5	0,28	0,35	0,35

Продолжение таблицы 4.2

4. Безопасность (отсутствие в сополимере катализатора, растворителей)	0,05	5	5	5	0,25	0,25	0,25
5. Физико - механические свойства	0,03	5	5	5	0,15	0,15	0,15
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,02	5	5	5	0,10	0,10	0,10
2. Уровень проникновения на рынок	0,01	3	5	5	0,03	0,05	0,05
3. Цена	0,08	3	4	4	0,24	0,32	0,32
4. Предполагаемый срок эксплуатации	0,02	5	5	5	0,10	0,10	0,10
5. Финансирование научной разработки	0,02	4	5	5	0,08	0,10	0,10
Итого	1	41	49	47	3,53	4,92	4,22
Примечание: Б _ф – разработка НИ ТПУ; Б _{к1} – испанская разработка [33]; Б _{к2} – французская разработка [34].							

Разработка НИ ТПУ суммарный балл конкурентоспособности минимален. Это связано с тем, что применяемый нами метод полимеризации лактида с различными мономерами дает наименьший выход в сравнении с другими разработками. Для увеличения конкурентоспособности разработки НИ ТПУ необходимо увеличить ее финансирование. Но получаемые продукты данной разработки являются дешевле. Это связано с тем, что в нашей разработке для проведения процесса полимеризации используется лактид, полученный некондиционного полимера на основе полилактида.

4.1.3 Диаграмма Исикава

Диаграмма причины-следствия Исикавы (Cause-and-Effect-Diagram) - это графический метод анализа и формирования причинно-следственных связей,

инструментальное средство для систематического определения причин проблемы и последующего графического представления [35].

Причинно-следственная диаграмма Исикава представлена на рисунке 4.1.

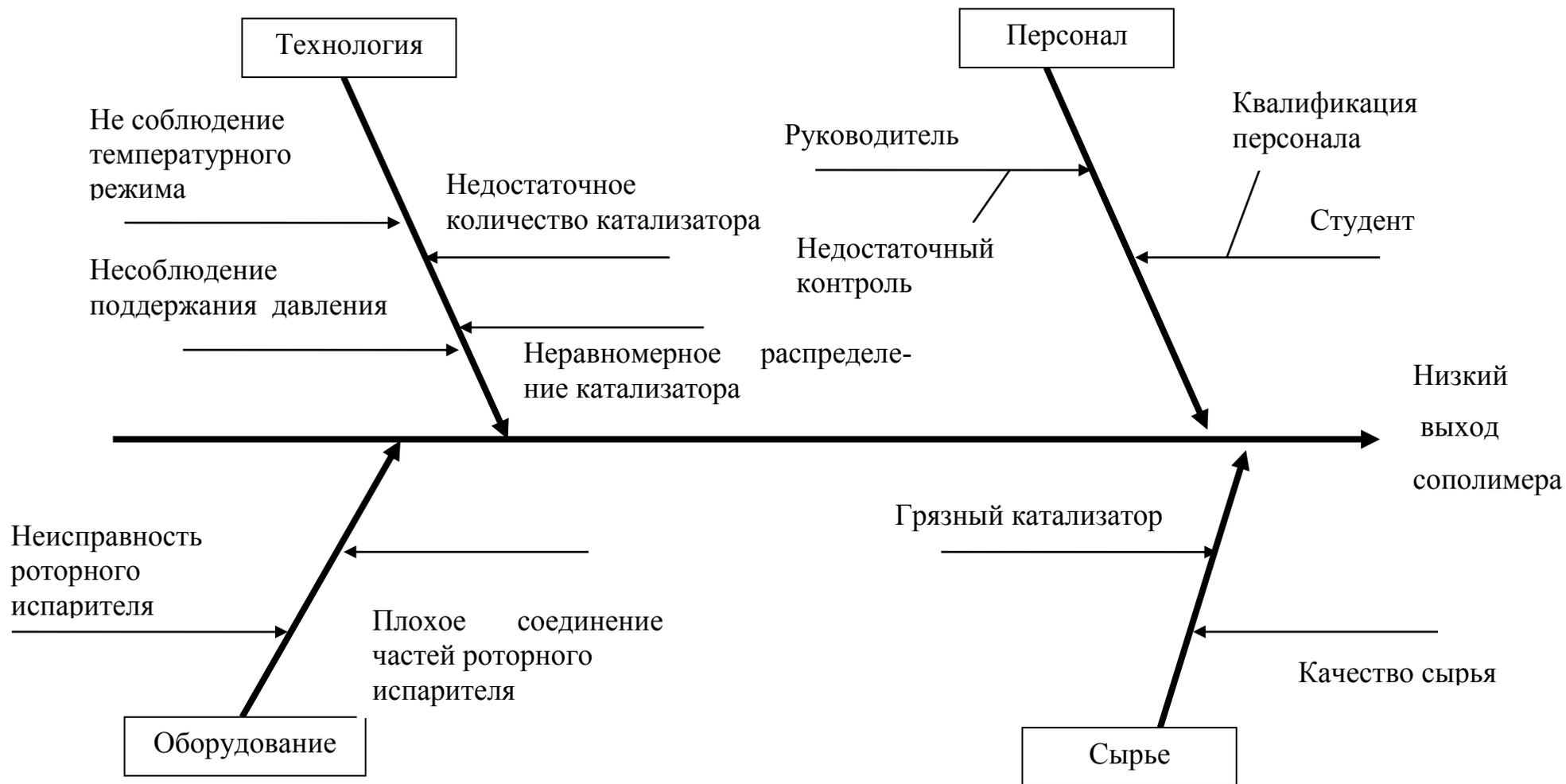


Рисунок 4.1 – Причинно-следственная диаграмма низкого выхода сополимеров при проведении полимеризации

4.1.4 SWOT – анализ

Результаты проведенного SWOT – анализа представлены в таблице 4.3.

Таблица 4.3 – Матрица SWOT

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Использование некондиционного полимера на основе лактида для получения лактида.</p> <p>С2. Более низкая стоимость по сравнению с другими технологиями.</p> <p>С3. Наличие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца.</p> <p>С4. Наличие бюджетного финансирования.</p> <p>С5. Экологичность технологии.</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл.1. Сложность изготовления в больших объемах.</p> <p>Сл.2. Отсутствие необходимой квалификации персонала</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Использование инновационной инфраструктуры НИ ТПУ.</p> <p>В2. Появление спроса на продукт.</p> <p>В3. Появление дополнительного спроса на новый продукт.</p>	<p>Так как в качестве сырья для получения лактида используется некондиционный полимер на основе полилактида у данной научной разработки есть шанс выйти на рынок.</p> <p>Необходимо заинтересовать инвесторов, чтобы данная разработка нашла практическое применение в медицинской отрасли, пищевой промышленности для изготовления самоутилизируемых</p>	<p>Несмотря на достоинства разработки и на наличие возможности ее реализации, она не развита на рынке из-за отсутствия промышленных установок на территории России. Из-за незаинтересованности потенциальных потребителей отсутствует финансирование и необходимое оборудование для дальнейшего развития.</p>

	упаковок и пленок.	
Угрозы: У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства. У2. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции. У3. Ограничение на экспорт технологии.	Производство сополимеров на основе лактида не развито на территории России, высокая конкуренция на мировом рынке препятствует продвижению отечественного продукта.	Отсутствие финансирования и незаинтересованность потенциальных потребителей в научной разработке является проблемой для дальнейшего ее развития. Необходимо продвигать полученные сополимеры на рынок.

4.1.5 Оценка готовности проекта к коммерциализации

Оценка готовности научной разработки к коммерциализации представлена в таблице 4.4.

№ п/п	Наименование	Степень проработки научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1	Определен имеющийся научно-технический задел	4	4
2	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	5	4
3	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	3
4	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	3
5	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	4
6	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	2

Продолжение таблицы 4.4

7	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	4	2
8	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	2
9	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	2	2
10	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	3	4
11	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	2	2
12	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	2	2
13	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	2	2
14	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	3	4
15	Проработан механизм реализации научного проекта	4	4
	Итого баллов	48	44

Полученные значения итоговых баллов позволяет говорить о мере готовности разработки и ее разработчика к коммерциализации. Значения итоговых баллов получились от 59 до 44, следовательно, перспективность разработки считается выше среднего. Необходимо проработать вопросы в области маркетинговых исследований, финансирования коммерциализации научной разработки, вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот.

4.1.6 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Для продвижения на рынок полученных полимеров и сополимеров при полимеризации лактида и сополимеризации лактида с гликолидом или капролактамом выберем методы коммерциализации научной разработки. Применительно к исследуемому процессу подходят такие методы коммерциализации как торговля патентными лицензиями, инжиниринг, передача интеллектуальной собственности, организация собственного предприятия.

Торговля патентными лицензиями и передача интеллектуальной собственности предполагает использование объектов исследования на лицензионной основе. Так же возможно будет распространять разработки и на предприятия, и в научно-исследовательские университеты.

С помощью инжиниринга возможно будет внедрить разработки непосредственно на производство.

Имея начальный капитал, возможна организация собственного предприятия в разных направлениях: медицина – шовные материалы, импланты различного назначения; пищевая промышленность – изготовление самоутилизируемых упаковок и пленок.

4.2 Инициация проекта научным руководителем

Устав научного проекта:

1. Цели и результат проекта.

Информация по заинтересованным сторонам проекта представлена в таблице 4.5.

Таблица 4.5 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Поставщики некондиционного полилактида	Решается экологическая проблема захоронения отходов, т.к. некондиционный полилактид является сырьем для получения лактида.
Производители полимерных материалов	Получение полилактида и сополимеров лактида с различными мономерами для

	производства упаковок, пленок, посуды, шовных нитей, имплантов и т.д.
Научно – исследовательские институты	Изучение свойств полученных сополимеров и выявление новых областей применения.

В таблице 4.6 представлена информация об иерархии целей проекта и критериях достижения целей.

Таблица 4.6 – Цели и результаты проекта

Цели проекта:	<ol style="list-style-type: none"> 1) Получение сополимеров на основе лактида, синтезированного из некондиционного полимера на основе полилактида и дальнейшая его полимеризация и сополимеризация с различными мономерами. 2) С минимальными ресурсозатратами провести полимеризацию лактида и сополимеризацию лактида с различными мономерами, с получением максимального выхода целевых продуктов.
Ожидаемые результаты проекта:	<ol style="list-style-type: none"> 1) Проведение деполимеризации некондиционного полилактида до целевого продукта – лактида. 2) Проведение полимеризации полученного лактида до полилактида с максимальным выходом. 3) Проведение сополимеризации полученного лактида с различными мономерами до получения сополимеров с максимальным выходом.
Критерии приемки результата проекта:	<ol style="list-style-type: none"> 1) Решение экологической проблемы полимерного мусора. 2) Выход полилактида и сополимеров лактида с различными мономерами не менее 60% от массы сырья.
Требования к результату проекта:	Требование:
	1) Минимальное использование дополнительных реактивов (этилацетата для очистки лактида, катализатора).
	2) Максимальный выход целевых продуктов.

2. Организационная структура проекта.

Организационная структура проекта и роль каждого участника в данном проекте представлена в таблице 4.7.

Таблица 4.7 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудовые затраты, час
1.	Волгина Т.Н., НИ ТПУ, Доцент, к.х.н.	Руководитель проекта	Координирует деятельность участника проекта	200
2.	Савинцова Т.В. НИ ТПУ, студент	Исполнитель по проекту	Выполняет отдельные работы по проекту: проводит деполимеризацию полилактида, полимеризацию лактида, сополимеризацию лактида с различными мономерами, обрабатывает полученные данные, выдает результат.	216

4.3 Планирование управления научно-техническим проектом

4.3.1 Иерархическая структура работ проекта

Иерархическая структура работ (ИСР) – детализация укрупненной структуры работ. В процессе создания ИСР структурируется и определяется содержание всего проекта. На рисунке 4.2 представлена иерархическая структура по проведению синтеза сополимеров на основе лактида.



Рисунок 4.2 – Иерархическая структура работ по научной работе по синтезу сополимеров на основе лактида

4.3.2 Контроль события проекта

Ключевые события проекта, их даты и результаты представлены в таблице 4.8.

Таблица 4.8 – Контрольные события проекта

№ п/п	Контрольные события	Дата	Результат (подтверждающий документ)
1	Синтез лактида. Получение полилактида	24.12.2020	Отчет по научно-исследовательской работы
2	Синтез и исследование полилактида	09.06.2021	Отчет по научно-исследовательской работе
3	Синтез лактида. Получение гликолида.	09.09.2021	Отчет по научно-исследовательской работе
4	Синтез сополимеров на основе лактида (сополимеризация лактида с гликолидом, лактида с капролактамом)	29.12.2021	Отчет по научно-исследовательской работе
5	Синтез сополимеров на основе лактида	16.05.2022	Участие в XXIII Международной научно-практической конференции «Химия и химическая технология в XXI веке»
6	Защита магистерской диссертации по теме «Синтез сополимеров на основе лактида»	?	Магистерская диссертация

4.3.3 План проекта

Линейный график проекта представлен в таблице 4.9.

Таблица 4.9 – Календарный план проекта

Код работы (из ИСР)	Название	Деятельность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников (ФИО ответственных исполнителей)
1.	Определение и утверждение темы диссертации	6	01.09.2020	07.09.2020	Волгина Т.Н. Савинцова Т.В.

Продолжение таблицы 4.9

2.	Проведение литературного поиска по теме исследования	21	08.10.2020	29.10.2020	Савинцова Т.В.
2.1.	Методы получения лактида	2	08.10.2020	10.10.2020	Савинцова Т.В.
2.2.	Методы получения полилактида	2	10.10.2020	12.10.2020	Савинцова Т.В.
2.3.	Методы получения гликолида	2	12.10.2020	14.10.2020	Савинцова Т.В.
2.4.	Методы сополимеризации лактида с различными мономерами	10	14.10.2020	24.10.2020	Савинцова Т.В.
2.5.	Методы анализа получаемых продуктов	5	24.10.2020	29.10.2020	Савинцова Т.В.
3.	Проведение экспериментальных работ	27	08.02.2021	07.03.2021	Савинцова Т.В.
3.1.	Проведение деполимеризации некондиционного полилактида	2	08.02.2021	10.02.2021	Савинцова Т.В.
3.2.	Проведение полимеризации лактида	10	10.02.2021	20.02.2021	Савинцова Т.В.
3.3.	Проведение поликонденсации гликолевой кислоты	2	20.02.2021	22.02.2021	Савинцова Т.В.
3.4.	Проведение сополимеризации лактида с гликолидом	13	22.02.2021	07.03.2021	Савинцова Т.В.

Продолжение таблицы 4.9

4.	Аналитический контроль получаемых продуктов	27	06.09.2021	03.10.2021	Савинцова Т.В.
4.1.	Определение содержания молочной кислоты	7	06.09.2021	13.09.2021	Савинцова Т.В.
4.2.	Определение температуры плавления	7	13.09.2021	20.09.2021	Савинцова Т.В.
4.3.	Проведение ИК-спектроскопии	13	20.09.2021	03.10.2021	Савинцова Т.В.
5.	Представление полученных данных	68	08.04.2022	15.06.2022	Савинцова Т.В.
5.1.	Выступление на конференциях по теме работы	10	08.04.2022	18.04.2022	Савинцова Т.В.
5.2.	Написание диссертации	48	18.04.2022	05.06.2022	Савинцова Т.В.
5.3.	Защита магистерской диссертации по теме работы	10	05.06.2022	15.06.2022	Савинцова Т.В.
	Итого	149			

На основе таблицы 10 строим календарный план – график (табл.4.10).

Сетевой график – графическое отображение комплекса работ по теме с установленными между ними взаимосвязями. Составление сетевого плана графика основывается на методе критического пути [33].

Ранее начало каждой работы:

$$t_{\text{рн}}(j) = \max[t_{\text{рн}}(i) + T(i)],$$

где $t_{\text{рн}}(i)$ - ранее начало предшествующей работы; $T(i)$ – продолжительность выполнения i -ой работы в календарных днях.

Ранее окончание работы:

$$t_{po}(i) = t_{pn}(i) + T(i),$$

Критический путь:

$$T_{кр} = T[L_{max}(1, зав.)],$$

где $L_{max}(1, зав.)$ - максимальный путь от первой работы до завершающей.

Позднее начало каждой работы:

$$t_{пн}(i) = \min[t_{пн}(j) + T(i)],$$

где $t_{пн}(j)$ - минимальная величина позднего начала j-ой работы.

Позднее окончание работы:

$$t_{по}(i) = \min t_{пн}(j),$$

Резерв времени полного пути:

$$R(L_n) = T_{кр} - T(L_n),$$

где $T_{кр}$ - продолжительность критического пути; $T(L_n)$ - продолжительность любого другого пути.

Полный резерв времени работы:

$$R_{п}(i) = \min t_{пн}(j) - t_{по}(i),$$

Свободный резерв времени работы:

$$R_{с}(i) = t_{pn}(j) - t_{pn}(i),$$

где $t_{pn}(j)$ - ранее начало последующей работы; $t_{pn}(i)$ - ранее начало предшествующей работы.

Параметры сетевого графика рассчитаны графическим способом (рис.4.3). Данные, полученные при расчете параметров сети сведены в табл.4.11.

Таблица 4.11 – Параметры сетевого графика

Название работы	№ раб.	$T_{кал}$	t_{pn}	t_{po}	$t_{пн}$	$t_{по}$	$R_{п}$	$R_{с}$
Определение и утверждение темы диссертации	1	6	0	6	6	0	6	
Проведение литературного поиска по теме исследования	2	21	6	27	27	6	21	6

Продолжение таблицы 4.11

Проведение экспериментальных работ	3	27	27	54	54	27	27	21
Аналитический контроль получаемых продуктов	4	27	54	81	81	54	27	27
Представление полученных данных	5	68	81	149	149	81	68	27
Итого:	6	149						
Резерв времени полного пути $R(L_n) = 649$								
Критический путь $T_{кр} = 649$								

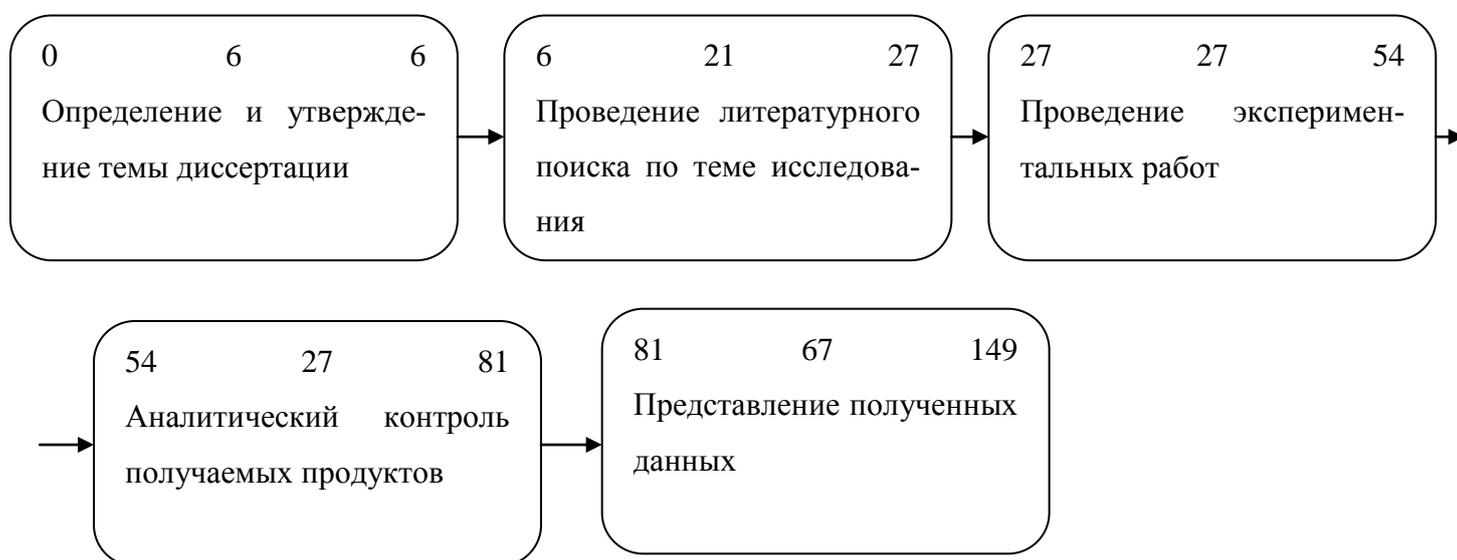


Рисунок 4.3 – Сетевой план-график выполнения НИР

4.3.4 Бюджет научного исследования

В процессе формирования бюджета, планируемые затраты группируются по статьям, представленным в таблице 4.12.

Таблица 4.12 – Группировка затрат по статьям

Статьи									
Вид работ	Сырье, материалы (за вычетом возвратных отходов), покупные изделия и полуфабрикаты	Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	Основная заработная плата	Дополнительная заработная плата	Страховые взносы	Научные и производственные командировки	Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями	Накладные расходы	Итого бюджет проекта
	16110,7	147230,0	246990,0	29638,8	83541,9	27662,9	2766,3	221303,0	775243,6

Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты (за вычетом отходов)

В эту статью включаются затраты на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по данной теме. Количество потребных материальных ценностей определяется по нормам расхода [35].

Расчет стоимости материальных затрат представлен в таблице 4.13.

Таблица 4.13 – Сырье, материалы, комплектующие изделия и покупные полуфабрикаты

Наименование	Марка, размер	Кол-во	Цена за единицу, руб	Сумма, руб
Полилактид товарные	гранулы	1 кг	1500	1500
Катализатор ZnO	порошок	0,1 кг	1700	170
Катализатор	жидкость	0,1 кг	500	50
Этилацетат	жидкость	2 л	99	198
Гликолевая кислота 70%	порошок	1 кг	1800	1800
Капролактam	кристаллы	1 кг	250	250
Хлороформ	жидкость	1 л	1000	1000
Изопропиловый спирт	жидкость	2 л	350	700
Этанол	жидкость	2 л	3000	6000
Гидроксид калия	жидкость	3 л	800	2400
Глицерин	жидкость	0,5 л	1500	750
Всего за материалы				14818
Транспортно-заготовительные расходы (4%)				592,7
Оформление документации				700
Итого по статье С _м				16110,7

Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стенов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной теме (табл.4.14).

Таблица 4.14 – Расчет затрат по статье «Спецоборудование для научных работ»

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс.руб.	Норма амортизации, %	Амортизация, тыс.руб.	Общая стоимость оборудования, тыс.руб.
1	Колба круглодонная со шлифом на 50 мл	10	0,250	-	-	2,5
2	Плита нагревательная	1	4,5	15	0,675	0,675
3	Термометр на 250°С	1	8	-	-	8
4	Обратный холодильник	1	2	-	-	2
5	Изогнутый 75аллонж АИО-19/26-14/23-50 с отводом	1	0,4	-	-	0,4
6	Мембранный вакуумный насос	1	60	10	6	6
7	Весы лабораторные	1	20	5	1	1

Продолжение таблицы 4.14

8	Воронка Бюхнера	1	1	-	-	1
9	Колба Бунзена со шлифом на 200 мл	1	1	-	-	1
10	Круглодонная колба на 250 мл	5	0,850	-	-	4,25
11	Роторный испаритель Heidolph	1	60	15	9	9
12	Колба коническая со шлифом на 10 мл	10	0,3	-	-	3
13	Термопистолет	1	5	-	-	5
14	Бюретка с краном	1	0,7	-	-	0,7
15	Прибор для определения точки плавления М-560	1	600	10	60	60
16	Спектрофотометр	1	170	5	8,5	8,5
17	Пипетки градуированные на 10 мл	5	0,15	-	-	15
	Всего за оборудование					128,03
	Затраты на доставку и монтаж (15%)					19,2
	Итого по статье С _{об}					147,23

Основная заработная плата

В настоящую статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, рабочих макетных мастерских и опытных производств, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме [35].

Статья основная заработная плата:

$$C_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп} ,$$

где $Z_{осн}$, $Z_{доп}$ - основная и дополнительная заработная плата соответственно.

Основная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} * T_{раб} ,$$

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m * M}{F_d} ,$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб; M - количество месяцев работы без отпуска в течение года, $M = 10,4$ месяца; F_d - действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн (табл.4.15).

Таблица 4.15 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Исполнитель
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней: - выходные дни/праздничные дни	66	66
Потери рабочего времени: - отпуск/невыходы по болезни	68	82
Действительный годовой фонд рабочего времени	134	148

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_b * (k_{пр} + k_d) * k_p ,$$

где Z_b - базовый оклад, руб; $k_{пр}$ - премиальный коэффициент; k_d - коэффициент доплат и надбавок; k_p - районный коэффициент, $k_p = 1,3$.

Расчет основной заработной платы приведен в табл. 4.16.

Таблица 4.16 - Расчет основной заработной платы

Исполнители	Z_b , руб.	$k_{пр}$	k_d	k_p	Z_m , руб.	$Z_{дн}$, руб.	$T_{раб}$, раб.дн.	$Z_{осн}$, руб
Руководитель	27700	1,0	0,2	1,3	43212	3353,8	6	20123
Исполнитель	13890				21668,4	1522,6	149	226867

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

В данную статью включается сумма выплат, предусмотрены законодательством о труде (в среднем – 12 % от суммы основной заработной платы).

Дополнительная заработная плата:

$$Z_{доп} = k_{доп} * Z_{осн} ,$$

где $k_{доп}$ - коэффициент дополнительной зарплаты[35].

В табл.4.17 приведена форма расчет основной и дополнительной заработной платы.

Таблица 4.17 - Заработная плата исполнителей НТИ

Заработная плата	Руководитель	Исполнитель	Итого
Основная зарплата	20123	226867	24699,0
Дополнительная зарплата (12%)	2414,8	27224,0	29638,8
Итого по статье $C_{зп}$	22537,8	254091,0	276628,8

Отчисления во внебюджетные фонды (страховые взносы)

Статья включает в себя отчисления во внебюджетные фонды [35].

Расчет производится по формуле:

$$C_{в\ неб} = k_{в\ неб} * (Z_{осн} + Z_{доп}),$$

где $k_{в\ неб}$ - коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.), $k_{в\ неб} = 0,302$.

Таблица 4.18– Отчисления на страховые взносы

	Руководитель	Исполнитель	Итого
Основная зарплата	20123,0	226867,0	
Дополнительная заработная плата	2414,8	27224,0	
Итого по статье $C_{в\ неб}$	6806,4	76735,5	83541,9

Научные и производственные командировки

В эту статью включаются расходы по командировкам научного и производственного персонала, связанного с непосредственным выполнением конкретного проекта, величина которых принимается в размере 10 % от основной и дополнительной заработной платы всего персонала, занятого на выполнении данной темы [35].

Расчет расходов на научные и производственные командировки ведется по формуле:

$$C_{команд} = k_{команд} * (З_{осн} + З_{доп}),$$

где $k_{команд}$ - коэффициент командировок, $k_{команд} = 0,1$.

Таблица 4.19 – Научные и производственные командировки

	Руководитель	Исполнитель	Всего
Основная зарплата	20123,0	226867,0	
Дополнительная заработная плата	2414,8	27224,0	
Итого по статье $C_{команд}$	2253,8	25409,1	27662,9

Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями

На эту статью относится стоимость контрагентных работ, т.е. работ, выполненных сторонними организациями (Межвузовская лаборатория радиационной спектроскопии НИ ТПУ) и предприятиями по заказу данной научно-технической организации, результаты которых используются в конкретном НИИ. Кроме того, на эту статью расходов относят оплату консультаций,

использование Internet и т.д. Величина этих расходов определяется по договорным условиям [35].

Расчет оплаты работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями ведется по формуле:

$$C_{\text{к раб}} = k_{\text{к раб}} * (З_{\text{осн}} + З_{\text{доп}}),$$

где $k_{\text{к раб}}$ – коэффициент контрагентных работ, $k_{\text{к раб}} = 0,01$.

Таблица 4.20 – Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями

	Руководитель	Исполнитель	Итого
Основная зарплата	20123,0	226867,0	
Дополнительная заработная плата	2414,8	27224,0	
Расходы на контрагентные работы	225,4	2540,9	2766,3

Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание, которые могут быть отнесены непосредственно на конкретную тему. Кроме того, сюда относятся расходы по содержанию, эксплуатации и ремонту оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий, сооружений и др.

Накладные расходы составляют 80-100 % от суммы основной и дополнительной заработной платы работников, непосредственно участвующих в выполнении темы[35].

Расчет накладных расходов ведется по следующей формуле:

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

где $k_{\text{накл}}$ - коэффициент накладных расходов, $k_{\text{накл}} = 0,8$.

Таблица 4.21 – Накладные расходы

	Руководитель	Исполнитель	Итого
Основная зарплата	20123,0	226867,0	
Дополнительная заработная плата	2414,8	27224,0	
Итого по статье $C_{\text{накл}}$	18030,2	203272,8	221303,0

4.3.5 Организационная структура проекта

В практике используется несколько базовых вариантов организационных структур: функциональная, проектная, матричная [35].

Наиболее подходящей организационной структурой данной работы является проектная (рис.4.4)



Рисунок 4.4 – Проектная структура работ

4.3.6 Матрица ответственности

Для распределения ответственности между участниками проекта формируется матрица ответственности (табл.4.22).

Таблица 4.22 - Матрица ответственности

Этап проекта	Волгина Т.Н., руководитель	Сечин А.А., консультант по разделу «Социальная ответственность»	Клемашева Е.И., консультант по разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережения»	Швагрукова Е.В., консультант по иностранной части	Савинцова Т.В., магистрант
Определение и утверждение темы диссертации	О				
Проведение литературного поиска по теме исследования	О			О, С	О, И
Проведение экспериментальных работ	О				О, И
Аналитический контроль получаемых продуктов	О				О, И
Представление полученных данных	О, С	О, С	О, С	О, С	О, И
Примечание: «О» - ответственный; «И» - исполнитель; «С» - согласующее лицо					

4.3.7 План управления коммуникациями проекта

План управления коммуникациями отражает требования к коммуникациям со стороны участников проекта [35]. План управления коммуникациями приведен в табл. 4.23.

Таблица 4.23 – План управления коммуникациями

№ п/п	Какая информация передается	Кто передает информация	Кому передается информация	Когда передается информация
1	Статус проекта	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Ежеквартально (первая декада квартала)

2	Обмен информацией о текущем состоянии проекта	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Еженедельно
3	Документы и информация по проекту	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Не позже сроков графиков и к.точек
4	О выполнении контрольной точки	Исполнитель проекта	Руководителю проекта	Не позже дня контрольного события по плану управления

4.3.8 Реестр рисков проекта

Идентифицированные риски проекта включают в себя возможные неопределенные события, которые могут возникнуть в проекте и вызвать последствия, которые повлекут за собой нежелательные эффекты[1]. Информация по данному разделу сведена в таблицу 4.24.

Таблица 4.24 – Реестр рисков

№	Риск	Потенциальное воздействие	Вероятность наступления (1-5)	Влияние риска (1-5)	Уровень риска	Способы смягчения риска	Условия наступления
1	Низкое качество продуктов	Низкий выход продуктов	3	5	средний	отработка технологий синтезов	несоблюдение технологических параметров
2	Незаинтересованность	Отсутствие рынка сбыта	2	5	средний	изучение рынка сбыта	разработка конкурентами схожих более эффективных технологий

3	Финансирование	Не хватка денежных средств для проведения исследований	2	5	средний	привлечение инвесторов, расчет количества реактивов	сокращение бюджета
---	----------------	--	---	---	---------	---	--------------------

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

4.4.1 Оценка абсолютной эффективности исследования

В основе проектного подхода к инвестиционной деятельности предприятия лежит принцип денежных потоков. Для оценки общей экономической эффективности используются основные показатели:

- чистая текущая стоимость (NPV);
- индекс доходности (PI);
- внутренняя ставка доходности (IRR);
- срок окупаемости (DPP).

Расчет чистой текущей стоимости (NPV) осуществляется по формуле:

$$NPV = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_{ОП_t}}{(1+i)^t} - I_0,$$

где ЧДП – чистые денежные поступления от операционной деятельности; I_0 – разовые инвестиции, осуществляемые в нулевом году; t – номер шага расчета ($t= 0, 1, 2 \dots n$); n – горизонт расчета; i – ставка дисконтирования (желаемый уровень доходности инвестируемых средств).

Коэффициент дисконтирования рассчитывается по формуле:

$$КД = \frac{1}{(1+i)^t},$$

где i – ставка дисконтирования; t – шаг расчета.

Расчет чистой текущей стоимости представлен в таблице 4.25.

Примем продолжительность шага расчета равна одному году. Поступления денежных средств заносится в таблицу со знаком «+», а расходование (оттоки) – со знаком « - ».

Разработка проекта «Синтез сополимеров на основе лактида» будет запатентована. За первоначальные инвестиции включают затраты на основные и оборотные средства (табл.4.12). Стоимость лицензии составляет 5500 руб. Запланируем объем продаж –150 лицензий.

Таблица 4.25 – Расчет чистой текущей стоимости по проекту в целом

№	Наименование показателей	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Выручка от реализации, руб	0	825000	825000	825000	825000
2	Итого приток, руб	0	825000	825000	825000	825000
3	Инвестиционные издержки, руб	-775243,6	0	0	0	0
4	Операционные затраты, руб (20% от бюджета)	0	165000	165000	165000	165000
5	Налогооблагаемая прибыль (1-4)	0	660000	660000	660000	660000
6	Налоги 20%, руб (5*20%)	0	132000	132000	132000	132000
7	Чистая прибыль, руб (5-6)	0	528000	528000	528000	528000
8	Чистая денежный поток (ЧДП), руб (чистая прибыль + амортизация)	-775243,6	644287	644287	644287	644287
9	Коэффициент дисконтирования при $i=20\%$ (КД)	1	0,833	0,694	0,579	0,482

Продолжение таблицы 4.25

10	Чистый дисконтированный денежный поток (ЧДД), руб (8*9)	-775243,6	536905	447421	372851	310709
11	ЧДД, руб	892643,238				
12	Итого NPV, руб	117399,638				

Расчёт NPV позволяет судить о целесообразности инвестирования денежных средств. Так как $NPV = 117399,6$ (т.е. $NPV > 0$), то проект оказывается эффективным.

Индекс доходности (PI) рассчитывается по формуле:

$$PI = \sum_{t=1}^n \frac{ЧДП_t}{(1+i)^t} / I_0 > 1,$$

$$PI = \frac{822302,658}{563492} = 1,46$$

где ЧДП - чистый денежный поток, руб.; I_0 – начальный инвестиционный капитал, руб.

Индекс доходности по расчетам получился $PI > 1$, что говорит о том, что проект является эффективным.

Внутренняя ставка доходности (IRR) - значение ставки, при которой обращается в нуль. Формальное определение «внутренней ставки доходности» заключается в том, что это та ставка дисконтирования, при которой суммы дисконтированных притоков денежных средств равны сумме дисконтированных оттоков или $=0$. По разности между IRR и ставкой дисконтирования i можно судить о запасе экономической прочности инвестиционного проекта. Чем ближе IRR к ставке дисконтирования i , тем больше риск от инвестирования в данный проект.

Дисконтированный срок окупаемости. Наиболее приемлемым методом установления дисконтированного срока окупаемости является расчет кумулятивного (нарастающим итогом) денежного потока (таблица 4.26).

Таблица 4.26 – Дисконтированный срок окупаемости

№	Наименование показателя	Шаг расчета				
		0	1	2	3	4
1	Дисконтированный чистый денежный поток, руб.	-775244	536905,45	447421,2	372851,01	310709,17
2	То же нарастающим итогом, руб.	-775244	-238338,2	209083,1	581934,07	892643,24
3	Дисконтированный срок окупаемости	0,47				

Срок окупаемости, отсчитанный от начала нулевого периода, составляет 2,47 года. Если же отсчитывать срок окупаемости от начала операционной деятельности (конец нулевого периода), он окажется равным 1,47 года.

4.4.2 Оценка сравнительной эффективности исследования

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности [35].

В таблице 4.27 представим плановый объем затрат для каждого варианта исполнения проекта. На основе полученных данных рассчитаем интегральный финансовый показатель.

Таблица 4.27 – Группировка затрат по статьям разработки и аналогов

Наименование статьи	Сумма, руб		
	Разработка	Аналог 1	Аналог 2
1. Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты	16110,7	16110,7	16110,7
2. Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	147230,0	147230,0	147230,0
3. Основная заработная плата	246990,0	246990,0	246990,0
4. Дополнительная заработная плата	29638,8	29638,8	29638,8
5. Взносы в социальные внебюджетные фонды	83541,9	83541,9	83541,9

6. Научные и производственные командировки	27662,9	29050,1	25130,6
7. Затраты на оплату работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями	2766,3	2684,1	2840,2
Итого	553940,6	555245,6	550482,2

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

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

$$I_{\Phi}^p = \frac{553940,6}{555245,6} = 0,998;$$

$$I_{\Phi}^{a1} = \frac{555245,6}{555245,6} = 1;$$

$$I_{\Phi}^{a2} = \frac{550482,2}{555245,6} = 0,991$$

где Φ_{pi} - стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{max} - максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

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

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

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

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности приведен в табл. 4.28.

Таблица 4.28 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерий \ ПО	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Способствует росту производительности труда производителя	0,10	5	4	4
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,15	4	4	4
3. Помехоустойчивость	0,15	4	3	3
4. Энергосбережение	0,20	5	4	3
5. Надежность	0,25	4	4	4
6. Материалоемкость	0,15	4	4	4
Итого	1			

$$I_{\text{ТП}} = 5 * 0,10 + 4 * 0,15 + 4 * 0,15 + 5 * 0,20 + 4 * 0,25 + 4 * 0,15 = 4,30$$

$$I_{\text{аналог 1}} = 4 * 0,10 + 4 * 0,15 + 3 * 0,15 + 4 * 0,20 + 4 * 0,25 + 4 * 0,15 = 3,85$$

$$I_{\text{аналог 2}} = 4 * 0,10 + 4 * 0,15 + 3 * 0,15 + 3 * 0,20 + 4 * 0,25 + 4 * 0,15 = 3,65$$

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

$$I_{\text{фи нр}}^p = \frac{I_m^p}{I_{\text{ф}}^p} I_{\text{фи нр}}^a = \frac{I_m^a}{I_{\text{ф}}^a}$$

$$I_{\text{фи нр}}^p = \frac{4,30}{0,998} = 4,31$$

$$I_{\text{фи нр}}^{a1} = \frac{3,85}{1} = 3,85$$

$$I_{\text{фи нр}}^{a2} = \frac{3,65}{0,991} = 3,68$$

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

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{фи нр}}^{\text{р}}}{I_{\text{фи нр}}^{\text{а}}},$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{4,31}{3,85} = 1,12$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{4,31}{3,68} = 1,17$$

где $I_{\text{фи нр}}^{\text{р}}$ – интегральный показатель разработки; $I_{\text{фи нр}}^{\text{а}}$ - интегральный технико-экономический показатель аналога.

В табл.4.29 представлена сравнительная эффективность разработки.

Таблица 4.29 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатель	Аналог 1	Аналог 2	Разработка
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1	0,991	0,998
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	3,85	3,65	4,30
3	Интегральный показатель эффективности	3,85	3,68	4,31
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,12	1,17	1,00

Сравнивая значений интегральных показателей эффективности вариантов исполнения проекта, можно сделать вывод. Эффективный вариант решения поставленной в магистерской диссертации технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является текущая разработка.

Список публикаций студента

1. Савинцова Т.В. Синтез сополимеров на основе лактида// Наука – шаг в будущее: тезисы докладов XV студенческой научно-практической конференции факультета «Технологии органических веществ», Минск, 1-2 декабря 2021 г. – Минск: БГТУ, факультет ТОВ, 2021. – с.30.
2. Савинцова,Т.В. Синтез сополимеров на основе лактида// Мисские научные чтения – 2021. Передовые технологии и материалы будущего: сборник статейIV Международной научно-технической конференции: в 3 т., Минск, 9 декабря 2021 г. – Минск:БГТУ, 2021. – Т.2 – с. 155-159.
3. Савинцова, Т.В. Синтез сополимеров на основе лактида// Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XXIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулева Н.М. Кижнера, Томск, 16-19 мая 2022 г. – Томск: НИ ТПУ, 2022. – Т.2. – с. 292-293.