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

Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Синтез метилового эфира молочной кислоты

УДК _661.724:661 746.24.091_

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
9ДМ01	Полетыкина Екатерина Ярославовна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ИШХБМТ	Новиков В.Т.	к.х.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН ШБИП	Маланина В.А.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Федорчук Ю.М.	д.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП 18.04.01 Химическая технология	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Пестряков А.Н.	д.х.н.		

Томск – 2022 г.

Планируемые результаты освоения ООП «Перспективные химические и биомедицинские технологии»

Код компетенции	Наименование компетенции
Общекультурные (универсальные) компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на осно системного подхода, вырабатывать стратегию действий
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) языках (-ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способен определить 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 выпускников	
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
ПК(У)-18	Способность и готовность к созданию новых экспериментальных установок для проведения лабораторных практикумов
ПК(У)-19	Готовность к разработке учебно-методической документации для реализации образовательных программ
ДПК(У)-1	Готовность к созданию химических соединений, материалов и изделий биомедицинского назначения и (или) их физико-химического анализа с учетом требований охраны здоровья и безопасности труда, защиты окружающей среды.

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

Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
18.04.01 Химическая технология
_____ А.Н. Пестряков
14.03.2022 г.

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

магистерской диссертации

Студенту:

Группа	**ФИО**
9ДМ01	Полетыкиной Екатерине Ярославовне

Тема работы:

Синтез метилового эфира молочной кислоты	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	55-51/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	10.06.2022 г.

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе *(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).*	Объектом исследования является метиловый эфир молочной кислоты; разработка более дешевого и экологичного метода синтеза эфиров молочной кислоты; вид сырья – химические реактивы; требования к продукту – чистота и соответствие структуре; при работе с токсичными веществами необходимо использовать перчатки, очки, спецодежду; соблюдение правил пожарной безопасности и техники безопасности.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов *(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).*	Исследование существующих методов получения эфиров молочной кислоты. Разработка нового подхода к синтезу эфиров молочной кислоты на примере метиллактата.

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

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

Раздел	Консультант
Социальная ответственность	Федорчук Ю.М., профессор
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Маланина В.А., доцент ОСГН ШБИП
Раздел ВКР на иностранном языке	Зяблова Н.Н., доцент ОИЯ

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

Литературный обзор

Название раздела или разделов на русском языке

Литературный обзор; экспериментальная часть; результаты проведенного исследования; финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; социальная ответственность; заключение.

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	14.03.2022 г.

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ИШХБМТ	Новиков В.Т.	к.х.н.		14.03.2022 г.

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
9ДМ11	Полетыкина Е.Я.		14.03.2022 г.

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

Исследовательская школа химических и биомедицинских технологий
Направление подготовки 18.04.01 Химическая технология
Уровень образования магистратура
Период выполнения весенний семестр 2021/2022 учебного года

Форма представления работы:

магистерская диссертация

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	10.06.2022 г.

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
21.03.2022 г.	Разработка раздела «Введение».	10
04.04.2022 г.	Разработка раздела «Литературный обзор».	10
18.04.2022 г.	Разработка раздела «Экспериментальная часть».	10
10.05.2022 г.	Разработка разделов «Результаты проведенного исследования».	10
24.05.2022 г.	Разработка разделов «Социальная ответственность» и «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение».	10
06.06.2022 г.	Оформление ВКР.	10
14.06.2022 г.	Представление ВКР.	40

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ИШХБМТ	Новиков В.Т.	к.х.н.		14.03.2022

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП 18.04.01 Химическая технология	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Пестряков А.Н.	д.х.н.		12.03.2022

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
9ДМ01	Полетыкиной Екатерине Ярославовне

Школа	ИШХБМТ	Отделение школы (НОЦ)	–
Уровень образования	магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:	
1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Бюджет проекта – не более 1,3 млн. руб., в т.ч. затраты по оплате труда – не более 144 тыс. руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Значение показателя интегральной ресурсоэффективности – не менее 4,7 баллов из 5.
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Для г. Томска районный коэффициент равен 1,3. Для вычисления отчислений во внебюджетные фонды использовался коэффициент равный 0,302.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ	Коммерческий потенциал НТИ является высоким, так как интегральный показатель ресурсоэффективности и эффективности равны 4,7 из 5.
2. Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок	В бюджете НИ были отражены материальные затраты, затраты на зарплату исследователей, отчислений во внебюджетные фонды и оплата работ, выполняемых сторонними организациями.
3. Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности	Интегральный финансовый показатель и показатель ресурсоэффективности, равные 1 и 4,7, соответственно, показали, что газофазный метод получения метиллактата является перспективным и инвестиционно-привлекательным.
Перечень графического материала *(с точным указанием обязательных чертежей):*	
1. Сегментирование рынка 2. Оценка конкурентоспособности технических решений 3. Матрица SWOT 4. График проведения и бюджет НТИ 5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НТИ	

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	14.03.2022 г.

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН ШБИП	Маланина В. А.	к.э.н.		14.03.2022 г.

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
9ДМ01	Полетыкина Е.Я.		14.03.2022 г.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА

«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
9ДМ01	Полетыкиной Екатерине Ярославовне

ШКОЛА	ИШХБМТ	Отделение школы (НОЦ)	–
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Тема дипломной работы: «Синтез метилового эфира молочной кислоты»

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	Объектом исследования является метиловый эфир молочной кислоты. В ходе работы был разработан новый метод синтеза данного эфира. Метиловый эфир молочной кислоты нетоксичен и биоразлагаем, в качестве сырья используются возобновляемые источники, благодаря этим свойствам метиллактат относится к «зелёным» растворителям. Метиллактат применяют в косметической и фармацевтической промышленностях, а также в качестве растворителя в лакокрасочной промышленности. Рабочей зоной является лаборатория 207 аудитории Научного парка ТПУ, представляющая собой сухое отапливаемое помещение с хорошей освещенностью и вентиляцией.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Производственная безопасность 1.1. Анализ выявленных вредных факторов: • Природа воздействия • Действие на организм человека • Нормы воздействия и нормативные документы (для вредных факторов) • СИЗ коллективные и индивидуальные 1.2. Анализ выявленных опасных факторов: • Термические источники опасности • Электроопасность • Пожароопасность	1. Вредные факторы: 1.1 Недостаточная освещенность; 1.2 Нарушения микроклимата, оптимальные и допустимые параметры; 1.3 Шум, ПДУ, СКЗ, СИЗ; 1.4. Наличие токсикантов, ПДК, класс опасности, СКЗ, СИЗ; 2. Опасные факторы: 2.1 Электробезопасность; класс электроопасности помещения, безопасные номиналы I, U, $R_{заземления}$, СКЗ, СИЗ; Проведен расчет освещения рабочего места; представлен рисунок размещения светильников на потолке с размерами в системе СИ; 2.2 Пожаробезопасность, категория пожароопасности помещения, марки огнетушителей, их назначение и ограничение применения; Приведена схема эвакуации.
2. Экологическая безопасность: • Выбросы в окружающую среду	Наличие промышленных отходов (бумага-черновики, пластмасса, стекло,

• Решения по обеспечению экологической безопасности	перегоревшие люминесцентные лампы) и способы их утилизации.
3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях: • перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения; • разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; • разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.	Рассмотрены 2 ситуации ЧС: 1) природная – сильные морозы зимой, (аварии на электро-, тепло-коммуникациях, водоканале, транспорте); 2) техногенная – несанкционированное проникновение посторонних на рабочее место (возможны проявления вандализма, диверсии, промышленного шпионажа), представлены мероприятия по обеспечению устойчивой работы производства в том и другом случае.
4. Перечень нормативно-технической документации.	– ГОСТы, СанПиНы, СНиПы

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	26.03.2022 г.

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ТПУ	Федорчук Ю.М.	д.т.н.		08.04.2022 г.

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
9ДМ01	Полетыкина Е.Я.		08.04.2022 г.

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 102 с., 15 рис., 39 табл., 59 источников, 4 прил.

Ключевые слова: метиллактат, молочная кислота, этерификация, «зелёные» растворители, гетерогенные катализаторы, непрерывный газофазный синтез.

Объектом исследования являются метиллактат и разработка новых методов синтеза метиллактата.

Цель работы – разработка новых подходов синтеза эфиров молочной кислоты на примере метиллактата.

В процессе исследования проводились: разработка аналитической методики для определения метиллактата методом газовой хроматографии; исследование влияния природы катализатора на выход метиллактата; разработка нового подхода к методу синтеза метиллактата.

В результате исследования была разработана методика непрерывного газофазного синтеза метиллактата, а также методика определения качественного и количественного состава метиллактата методом газовой хроматографии.

Область применения: органический синтез.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в высоких выходах и экологичности предложенной новой методики синтеза метиллактата.

Оглавление

Введение 13

1 Литературный обзор 15

1.1 Технико-экономическое обоснование 15

1.2 Синтез эфиров молочной кислоты 20

1.3 Катализаторы процесса этерификации молочной кислоты метанолом 23

1.4 Технологические подходы процесса этерификации молочной кислоты метанолом 25

1.5 Теоретические основы физико-химических методов анализа 27

2 Экспериментальная часть 30

3 Результаты проведенного исследования 35

3.1 Методика анализа метиллактата методом газовой хроматографии 35

3.2 Исследование природы катализатора на выход метиллактата 37

3.3 Непрерывный газофазный синтез метиллактата 39

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение 47

4.1 Предпроектный анализ 47

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования 47

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения 48

4.1.3 SWOT-анализ 49

4.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации 49

4.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования 51

4.2 Инициатива проекта 51

4.2.1 Структура работ в рамках научного исследования 52

4.2.2 Определение трудоёмкости выполнения работ 53
4.2.3 Разработка графика проведения научного исследования 55
4.3 Бюджет научного исследования 57
4.3.1 Сырье и материалы 57
4.3.2 Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ 58
4.3.3 Основная заработная плата 59
4.3.4 Дополнительная заработная плата 60
4.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления) 61
4.3.6 Расчет затрат на научные и производственные командировки 61
4.3.7 Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями 61
4.3.8 Накладные расходы 62
4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования 63
5 Социальная ответственность 65
5.1 Производственная безопасность 66
5.1.1 Недостаточная освещенность рабочей зоны 67
5.1.2 Отклонение показателей микроклимата в помещении 67
5.1.3 Повышенный уровень шума 68
5.1.4 Токсические и раздражающие действия органических растворителей, химических веществ 70
5.1.5 Повышенная температура поверхностей оборудования, материалов 72
5.1.6 Электробезопасность 73
5.1.7 Расчёт освещения рабочего места 74
5.1.8 Пожаробезопасность 76

5.2 Экология 78
5.3 Безопасность в чрезвычайных ситуациях 79
5.4 Перечень нормативно-технической документации 80
Заключение 83
Список публикаций 84
Список использованных источников 85
Приложение А 93
Приложение Б 100
Приложение В 101
Приложение Г 102

Введение

На сегодняшний день растворители широко применяются во многих отраслях промышленности, и большая часть их использования приходится на лакокрасочную. В лакокрасочной промышленности в основном используют такие растворители как ксилол, толуол, бутилацетат, ацетон и др., однако данные растворители обладают высокой токсичностью для человека и окружающей среды. Также данные вещества в основном производят из невозобновляемых источников, а также их производство сопряжено с образованием большого количества побочных продуктов, которые ведут к негативному влиянию на экологию. Поэтому возникла необходимость разработки «зеленых» растворителей [1].

Уже сейчас «зелёные» растворители используются в лакокрасочной и целлюлозной промышленностях, а также в медицине и косметологии. «Зелёные» растворители не уступают классическим растворителям по свойствам, так они также обладают низким давлением паров и высокой температурой кипения. Кроме того, «зелёные» растворители нетоксичны, для их получения используют возобновляемые источники [2], а также они повержены биологическому разложению.

В качестве «зелёного» растворителя могут выступать эфиры оксикарбоновых кислот, свойства и производство которых удовлетворяют вышеназванным условиям.

Актуальность данной работы обусловлена необходимостью разработки новых дешевых методов синтеза зелёных растворителей, для повсеместного их внедрения.

Цель: разработка новых подходов синтеза эфиров молочной кислоты на примере метиллактата.

Задачи:

1. Разработка аналитической методики для определения метиллактата методом газовой хроматографии.

2. Исследование влияния природы катализатора на выход метиллактата.

3. Разработка нового подхода к методу синтеза метиллактата.

1 Литературный обзор

1.1 Технико-экономическое обоснование

Согласно, структуре потребления растворителей в Европе за 2017 год [3] 46 % приходится на лакокрасочную промышленность, 9 % на фармацевтическую промышленность, 6 % – полиграфия, косметическая и химическая промышленности и т. д. (Рисунок 1).

Рисунок 1 – Структура потребления растворителей в Европе в 2017 г. [3]

Большинство растворителей токсичны и поэтому они представляют опасность для человека и окружающей среды. Следовательно, требуется минимизация или полное предотвращение этого негативного влияния растворителей.

Для минимизации негативного влияния растворителей принимаются различные законодательные меры в результате которых подбираются растворители схожие по свойствам, но наименее вредные [4]. Так, например, в 1989 году Монреальский протокол ограничил использование тетрахлорметана, так как он приводит к разрушению озонового слоя и является парниковым газом, поэтому тетрахлорметан заменили на хлороформ и дихлорметан.

Однако, согласно оценкам IARC Всемирной организации здравоохранения, хлороформ и дихлорметан могут быть канцерогенными для человека [4], а также дихлорметан разрушает озоновый слой [5], так как он является короткоживущим галогенированнным веществом. Поэтому, в настоящее время стоит вопрос перехода на наиболее безопасные и экологичные вещества – «зелёные» растворители.

Зеленые растворители – это экологически чистые растворители или биорастворители, которые получают в результате переработки возобновляемых источников сырья [6] и производство которых соответствует принципам зелёной химии. Для описания зелёности оценивается процесс создания растворителя, его влияния на окружающею среду и человека, а также его утилизация, то есть определяется энергия, которая затрачивается на жизненный цикл растворителя. Но, несмотря на это нет чёткого определения безопасности растворителя, так как нет значений ПДК и токсичности для всех растворителей в целом [3], поэтому в основном каждый растворитель претендующий на звание зелёного проходит токсикологическую экспертизу.

В качестве идеального зелёного растворителя принято считать вещества обладающими следующими свойствами: низким давлением паров, высокой температурой кипения, нетоксичностью, подлежит биологическому разложению и должен быть получен из возобновляемых источников [2].

В последние несколько лет было предложено несколько вариантов для зелёных растворителей, среди всех многообещающими являются сверхкритические флюиды и ионные жидкости [7]. Сверхкритические флюиды (СКФ) – вещества, которые сжаты до давления и температуры выше критической точки [8], в результате чего исчезает различие между газовой и жидкой фазами. В связи с этим СКФ имеют промежуточные свойства между жидкостью и газом, так они обладают высокой плотностью и низкой вязкостью, но самое главное их способность к растворению, которая находится в широком диапазоне, из-за возможности варьировать свойствами путём изменения температуры или давления флюида [9]. Наибольшее распространения в

качестве «зелёных» растворителей получили сверхкритический диоксид углерода и сверхкритическая вода [9], так как они не канцерогенны, нетоксичны, не обладают мутагенными свойствами, негорючи и термодинамически стабильны. Ионные жидкости – это соли, температура плавления которых ниже температуры кипения воды, чаще всего это легкоплавкие полуорганические соли [10]. Ионные жидкости относятся к «зелёным» растворителям [10] благодаря наличию таких свойств, как минимальное давление паров даже при повышенных температурах, негорючесть, термическую и окислительную стабильность, а также широкий электрохимический диапазон, эффективное поглощение и перенос микроволн. Самой распространённой ионной жидкостью является 1-бутил-3-метилимидазолий гексафторфосфат.

Хоть характеристики сверхкритических флюидов и ионных жидкостей пророчат им быть достойной заменой широкому спектру растворителей, широкого применения в промышленности данные растворители так и не нашли [7]. Более того, технологическая и экономическая целесообразность этих альтернативных растворителей находится под вопросом. Крупнотоннажному использованию данных растворителей мешает отсутствие всесторонней информации о их свойствах, что требует систематического и дорогостоящего изучения. Но стоит отметить, что замена традиционных растворителей на альтернативные органические растворители может быть более быстрой, беря во внимание, что необходимый уровень развития химической технологии для их широкого производства уже достигнут, но ключевым вопросом, все же, остается экономическая целесообразность их широкого применения.

Среди прочих альтернативных “зеленых” органическеских растворителей можно выделить сложные эфиры оксикарбоновых кислот. По своим химическим характеристикам и свойствам наиболее перспективными считаются эфиры молочной кислоты.

Согласно [11] за 2021 г. лидерами по производству эфиров молочной кислоты являются Северная Америка и Азиатско-тихоокеанский регион, 40 % и

30 % соответственно. Наиболее широкое распространение получили (Рисунок 2) бутиллактат, этиллактат, метиллактат и др.

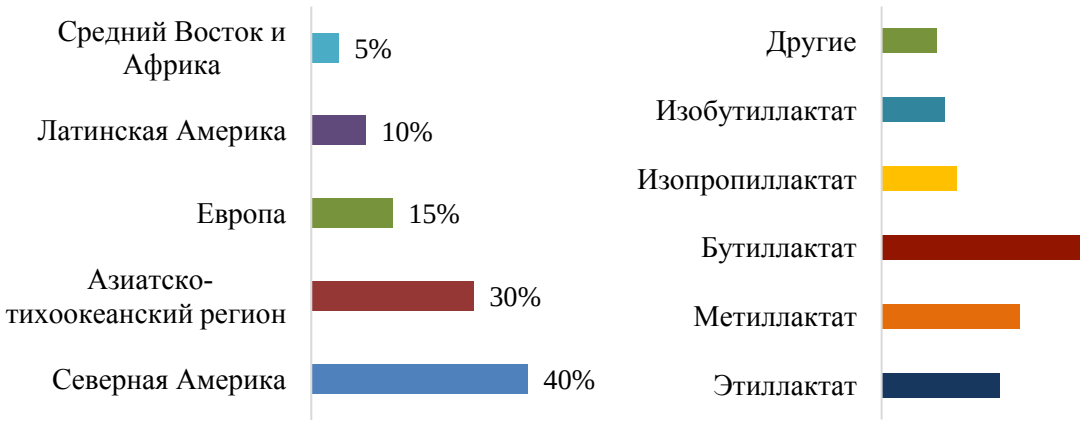


Рисунок 2 – Структура производства эфиров молочной кислоты [11]

Бутиллактат используется в качестве растворителя и химического сырья, так он является растворителем для нитроцеллюлозы, этилцеллюлозы, масел, красителей, натуральных смол, многих синтетических полимеров, лаков, жидкостей для химической чистки и т.д. Бутиллактат используется в парфюмерной промышленности и в качестве ароматизатора ряда молочных продуктов. Данный эфир одобрен в качестве пищевой добавки Управлением по санитарному надзору за качеством пищевых продуктов и медикаментов США (FDA), он метаболизируется до молочной кислоты, которая, в свою очередь, метаболизируется до н-бутанола, н-бутиральдегида и н-масляной кислоты. [12]

Этиллактат обладает низкой токсичностью [13], поэтому его используют [14] в качестве пищевой добавки, ароматизатора в парфюмерии, в фармацевтической промышленности в качестве растворяющего и диспергирующего наполнителя для различных биологически активных соединений без нарушения фармакологической активности активного ингредиента. Этиллактат может растворить многие смолы и производные целлюлозы, используется в качестве покрытия для различных поверхностей. Этиллактат заменяет растворители [14], такие как N-метилпирролидон (NMP), толуол, ацетон и ксилол, использование этиллактата вместо данных растворителей делает производство и рабочее место более безопасным. Также

данный эфир обладает высокой растворяющей способностью (Таблица 1) и высокой температурой кипения, низким давлением паров и низким поверхностным натяжением, что делает его достойной заменой классических растворителей.

Таблица 1 – Сольватирующие свойства этиллактата и N-метилпирролидона [14]

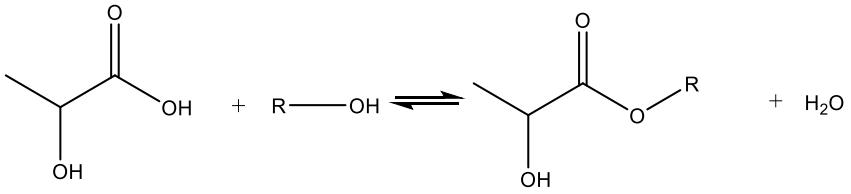
Параметры растворимости	Этиллактат	N-метилпирролидон
Каури-бутаноловый показатель	>1000	350
Параметр Хильдебранда	21,3	23,1
Параметр дисперсии Хансена	7,8	8,8
Полярный параметр Хансена	3,7	6,0

Другие области применения этиллактата – это чистящее средство, которое эффективно удаляет жиры, масла, клеи и твердое топливо с металлических поверхностей.

Метиллактат также обладает низкой токсичностью ($ЛД_{50}$ > 2000 мг/кг) [15], как и этиллактат. В основном метиллактат используется как растворитель для нитроцеллюлозы, ацетата целлюлозы, ацетобутирата целлюлозы и ацетопропионата целлюлозы, также он используется в производстве лаков и присадок [16]. Компания Corbion под маркой PURASOLV®ELECT выпускает метиллактат, который используется как растворитель для микроэлектроники [17], поскольку он обеспечивает высокую растворяющую способность для многих полимеров, используемых в электронной промышленности, помимо этого растворитель данной марки используется для очистки фоторезистов и ЖК-дисплеев. Кроме того, растворители PURASOLV® демонстрируют хорошие смачивающие свойства в сочетании с низкой скоростью испарения. С 2018 года метиллактат используют для синтеза 1,2-пропандиола [18] с использованием катализатора MACHO. Метиллактат используется в качестве биорастворителя для синтеза ультрафильтрационных мембран из ацетата целлюлозы [19]. Также сообщается использование метиллактата в органическом синтезе, где его используют в качестве более безопасного растворителя и реакционной среды при синтезе MOF [20], для лигандного обмена в синтезе трифеноламина [21].

1.2 Синтез эфиров молочной кислоты

Синтез эфиров молочной кислоты обычно осуществляется при взаимодействии молочной кислоты и соответствующего спирта с использованием различных катализаторов. Ниже представлена реакция этерификации молочной кислоты со спиртом:



(1)

Однако сырьевая база получения метиллактата многообразна и не ограничивается только молочной кислотой.

В [22] сообщается о возможности использования полисахаридов и олигосахаридов для получения метиллактата, однако данный процесс затруднен из-за наличия нескольких стадий. При использовании полисахаридов и олигосахаридов сначала данные вещества при каталитическом гидролизе переходят в глюкозу, далее каталитическая изомеризация во фруктозу, которая катализируемая кислотой Льюиса ретроальдольной конденсацией переходит в триозы, где уже в дальнейшем происходит каталитическая дегидратация или таутомеризация глицеринового альдегида с образованием пировиноградного альдегида, который далее подвергается этерификации с помощью метанола с образованием метиллактата [22]. Наличие большого количества активных веществ приводит к снижению активности катализатора, что в результате привоедит к низким выходам конечного продукта, поэтому среди сахаров предпочтительным сырьём для получения метиллактата являются моносахариды.

Так выход метиллактата при использовании в качестве исходного сырья фруктозы составляет 41 % [23], реакция проводилась при 200 °C в течение 3 часов, катализатор NiO. Фруктоза, катализируемая NiO, в результате ретроальдольной конденсацией переходит в глицеральдегид и 1,3-дигидроксиацетон, где далее происходит их каталитическая дегидратация с

образованием метилглиоксаля. В результате реакции Канниццаро [24] идёт внутренняя реакция метилглиоксаля до молочной кислоты, где уже далее под действием метанола проходит этерификация in situ в результате чего образуется метиллактат. Реакция протекает по следующей схеме, представленной на рисунке 3.

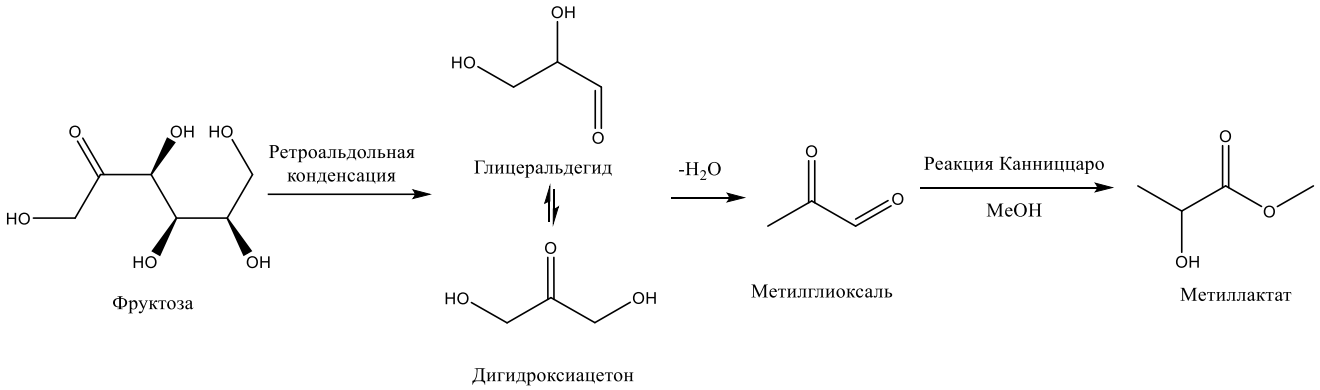


Рисунок 3 – Схема реакции превращения фруктозы в метиллактат [23]

Похожие результаты были достигнуты окислением фруктозы метанолом при 240 °C и 27,6 бар с использованием в качестве катализатора Zr-SBA-15 [25], так выход метиллактата составляет 44 %. Использование этого же катализатора для окисления ксилозы до метиллактата при тех же условиях, что описаны выше, выход уменьшается до 37 % [25]. Однако [25] с теми же условиями самый высокий выход метиллактата равный 62 % даёт моносахарид – 1,3-дигидроксиацетон.

В литературных источниках встречается информация об использовании сложных спиртов в качестве сырья для синтеза метиллактата. Так известен способ получения метиллактата путем окисления 1,2-пропандиола метанолом на золотых катализаторах [26]. Такой подход позволяет достичь селективности по метиллактату 72 %, при конверсии 1,2-пропандиола не менее 98 % за 21 час. Основным побочным продуктом является метилацетат, образующийся с селективностью 21 %.

При всем многообразии сырья для синтеза метиллактата основным все же остается молочная кислота и ее производные. При получении метиллактата из молочной кислоты и сахаров побочным продуктом является вода, которая выступает как ингибитор данных реакций. Воду можно удалять с помощью

азеотропных смесей, однако в синтезе метиллактата это невозможно, так как метиловый спирт с водой не образует азеотропную смесь. Поэтому следует использовать безводную среду, что возможно с использованием в качестве исходного реагента лактида и полимера молочной кислоты.

Синтез метиллактата алкоголизом с раскрытием цикла возможно с использованием в качестве исходного сырья лактида. Так путём хемоселективного алкоголиза [27] лактида в метаноле с метоксидом магния в качестве катализатора, соотношение реагентов $Mg(OMe)_2$/лактид/ метанол = 1:50:200, был получен метиллактат со 100 % селективностью. Похожие результаты были достигнуты [28] с использованием катализатора – арилоксидов лития, так селективность метиллактата составила 99 % за 2,5 часа, но при этом при уменьшении концентрации катализатора в 5 раз селективность образования метиллактата снижается, при этом наблюдается образование метиллактоиллактата.

Высокие выходы и селективность также наблюдаются и при использовании полимолочной кислоты в качестве исходного реагента. Так селективность в метиллактат при деполимеризации полимолочной кислоты на цинковом катализаторе [29] в течение 4 часов при 110 °С в среднем составляет 94 %, а выход в среднем достигает больше 97 %. При использовании в качестве катализатора органические комплексы Zn(II) для переэтерификации ПМК метанолом до метиллактата [29] в течение 5 часов выход составляет 80 %. Использование полимолочной кислоты в качестве сырья для производства метиллактата также позволит сократить отходы биоразлагеаемого пластика и увеличить скорость его переработки.

Не смотря на различное сырье применимое для синтеза метиллактата, молочная кислота остается основным промышленным реагентом для его получения. Исходя из этого представляет интерес более подробно рассмотреть катализаторы применяемы для синтеза метиллактата из молочной кислоты.

1.3 Катализаторы процесса этерификации молочной кислоты метанолом

Как говорилось ранее, в промышленности основным методом синтеза метиллактата является этерификация молочной кислоты с метиловым спиртом, ключевыми катализаторами при этом служат сильные минеральные кислоты, такие как серная кислота, соляная кислота и другие минеральные кислоты.

При использовании в качестве катализаторов серную или борную кислоты [30], выход метиллактата составляет 82 %. Реакция проводится в реакторах змеевикового типа при мольном соотношении метанол:молочная кислота 5:1, температуре 220 °C и давлении на входе в змеевик 21 атм, давление выше атмосферного служит для поддержания метанола в жидкой фазе. Время пребывания смеси в змеевике составляло 40 минут.

Серную кислоту также используют для получения оптически чистого метиллактата, однако выход такого метиллактата [31] не отличается высоким значением и составляет 34 %. Оптически чистый метиллактат получают при температуре кипения с обратным холодильником в течение 25 часов при мольном соотношении L-(+)-молочной кислоты:метанола равным 1:4, катализатор серная кислота 0,018 моль. Для нейтрализации серной кислоты использовали бикарбонат натрия.

Выход метиллактата можно увеличить до 97 % [32] с использованием смешанного катализатора $Fe_2(SO_4)_3 \cdot 4H_2O$/концентрированной H_2SO_4 (молярное соотношение 1:1). Данный каталитический комплекс обладает эффективной каталитической способностью и дает высокий выход этерификации молочной кислоты метанолом за короткое время реакции, равное 3 часам.

Несмотря на высокие выходы метиллактата использование гомогенных кислотных катализаторов имеет ряд недостатков, такие как: коррозия оборудования, побочные реакции, дополнительная стадия нейтрализации целевого продукта, в результате которой образуются сточные воды, требующие специальных мер по их утилизации [33].

Проблема коррозии оборудования и сброса сточных вод решается с использованием гетерогенных катализаторов таких как кислоты Льюиса, металл-органические каркасные структуры, силикагели и т.д.

Использование в качестве катализатора кислотные ионообменные смолы (AMBERLYST-15) [30] в дистилляционной колонне позволяет получить метиллактат с выходом равным 87 % при мольном соотношении метанола к молочной кислоте равное 3,29.

При избытке молочной кислоты возможен автокатализ [34], это достигается при использовании избытка метанола в качестве экстрагирующего агента, который используется для постоянного удаления веществ, образующих с ним азеотропную смесь. В результате чего этерификация становится возможной за счет непрерывной экстракции газовой фазы при ограничении уноса кислотности, эквивалентно метанол:молочная кислота 3,6:1. Этерификация происходит при 130 °C, при пониженном давлении 27,5 кПа в течение 24 часов, выход метиллактата составляет 99 %.

Этерификацию можно провести в практически нейтральных и мягких условиях [35] при использовании π-кислотного тетрацианоэтилена (TCNE) и его производного дицианокетендиметилацеталя (DCCKDMA), которые катализируют этерификацию лауриновой кислоты различными типами спиртов. Этот метод был успешно применен для метилэтерификации различных карбоновых кислот. Так этерификация молочной кислоты метанолом с использованием 20 моль% TCNE [35] при комнатной температуре и 60 °C в течение 48 часов дала выход метиллактата 88 % и 87 %, соответственно.

Ранее писалось о недостатках использования гомогенных катализаторов, помимо технических проблем есть проблема самополимеризации молочной кислоты [36] за счёт взаимодействия гидроксильных и карбоксильных групп, которые действуют как доноры ацила и как нуклеофилы, для решения этой проблемы требуются жёсткие условия и гетерогенные катализаторы, которые уже были рассмотрены выше.

Однако для более экологичных условий можно использовать ферментативный катализ. Ферментативный [36] протекает в мягких условиях, обладает высокой активностью и низким уровнем загрязнения окружающей среды.

Липазы катализируют гидролиз триацилглицеролов и других сложных эфиров карбоновых кислот в водных растворах [37]. В отсутствие воды они катализируют конденсацию органических кислот и спиртов с образованием сложных эфиров [37]. Катализируемая липазой этерификация молочной кислоты бутанолом [37], этанолом [38] и др. [39]. Однако нет данных по получению в промышленности метиллактата данным способом. Стоит отметить, что данные реакции этерификации проводят в неводной системе. Из-за высокой полярности молочной кислоты она не смешивается с гидрофобными органическими растворителями, которые обычно используются для неводных ферментативных реакций [38]. По причинам, описанным выше ферментативное получение метиллактата липазным катализом невозможно.

В литературе крайне скудно описано получение метиллактата с применением гетерогенных катализаторов, по этой причине исследование данного вида катализа является актуальным и требует более детального изучения.

1.4 Технологические подходы процесса этерификации молочной кислоты метанолом

В основном при использовании гомогенных катализаторов, то есть различных кислот, используют реактора смешения [34], представляющие собой ёмкости различного объёма, оснащенные приводом с мешалкой, данный конструктивный вид чаще всего используется в периодическом процессе. Согласно [34] молочная кислота подаётся в реактор, где нагревается до 100 °С при пониженном давлении 275 мбар, далее непрерывно подаётся безводный спирт, этерификация происходит при 130 °С и давлении 275 мбар.

Реакционную массу и продукты реакции разделяют на ректификационной колонне, а реакционная масса требует нейтрализации.

Данный процесс осложнен из-за дополнительных стадий очистки и разделения продуктов, также реактор подвергается коррозии из-за гомогенных катализаторов – кислот, данные недостатки можно решить с помощью перехода на гетерогенные катализаторы, такой процесс можно будет отнести к «зеленому» катализу, из-за возможности регенерации катализатора.

При использовании гетерогенных катализаторов в реакторах смешения возникает проблемы с низкими выходами продуктов, это связанно с уменьшением вероятности столкновения реагирующих молекул с реакционными центрами катализатора.

Для увеличения вероятности столкновения реагирующих молекул можно с помощью перехода в газожидкостную систему. Переход в систему г-ж осуществляется в ректификационных колонах [40]. Так сообщается о получении метиллактата чистотой 85 % [41] в дистилляционных колоннах периодического действия, однако в данном процессе есть необходимость в увеличении площади контакта системы газ-жидкость [41], так как при использовании молочной кислоты и метанола, метанол имеет более низкую температуру кипения, чем продукты реакции, и он уходит из системы быстрее, чем успевает прореагировать. Решение проблемы состоит в рециркуляции метанола, но и в данном случае не происходит существенных улучшений.

Для того чтобы повысить селективность образования метиллактата добавляют стабилизаторы [42] 4-метокси фенол и гидрохинон, которые предотвращают побочные реакции молочной кислоты (полимеризация и т.д.). Так данным способом селективность метиллактата достигает 94 %, а чистота 99 % в непрерывной противоточной колонне трехфазной этерификацией.

Существующие методы имеют ряд недостатков описанных выше, разработка новых технологических подходов и исследование новых каталитических систем для синтеза эфиров молочной кислоты является

актуальной задачей, а сами продукты реакции являются ценными химическими субстанциями.

1.5 Теоретические основы физико-химических методов анализа

Газовая хроматография (ГХ). Хроматография – физико-химический метод распределения компонентов между неподвижной и подвижной фазами. Неподвижная или стационарная фаза – твердое вещество (сорбент) или плёнка жидкости, нанесённая на твердое вещество. В свою очередь подвижная фаза – жидкость или газ, протекающие через неподвижную фазу [43]. Хроматография относится к динамическим методам, так как многократно совершается сорбция-десорбция разделяемых компонентов.

Есть множество классификаций хроматографии, но основной может служить классификация по агрегатному состоянию фаз, различают газовую, жидкостную и сверхкритическую флюидную хроматографии.

Газовая хроматография (ГХ) – метод разделения летучих, термостабильных соединений [43]. Прибор ГХ – газовый хроматограф.

Сущность метода состоит в том, что анализируемая смесь, попадая в испаритель, переводится в парообразное состояние, там же происходит смешение с потоком газа-носителя (гелий, азот, аргон и т.д.), таким образом образуется подвижная фаза. Далее подвижная фаза продвигается в хроматографическую колонку, заполненную неподвижной фазой.

Движение анализируемой смеси по колонке происходит за счёт газа-носителя. В результате разделяемые компоненты анализируемой смеси многократно совершают сорбцию и десорбцию, при этом в системе поддерживается динамическое равновесие разделяемых веществ между двумя фазами. Данные процессы совершаются, пока пары разделяемых веществ с газом-носителем не покинут хроматографическую колонку.

Далее подвижная фаза из хроматографической колонки поступает в детектор хроматографа. Детектор преобразует изменение свойств (химических, физических, физико-химических) газового потока в электрический сигнал.

Когда происходит усиление сигнала, то регистратор хроматографа фиксирует эти изменения в виде хроматограммы.

Стоит отметить следующие особенности строения хроматографа. Хроматографическая колонка бывает двух видов: насадочная и капиллярная. Также температура испарителя и колонки должна быть выше температуры кипения анализируемого вещества. Детекторы в газовых хроматографах бывают неселективные – сигнал не зависит от химической природы разделяемых веществ (катарометры, ПИД, электрохимические) и селективные – сигнал зависит от химической природы разделяемых веществ (термоионные, электронозахватные и др.).

Газовая хроматография включает газо-жидкостную и газо-адсорбционную (газо-твердофазную).

В данной работе будет использоваться аналитическая газовая хроматография для количественного и качественного анализа продуктов синтеза метиллактата.

Ядерный магнитный резонанс (ЯМР). ЯМР относится к спектроскопическим методам исследования химических объектов, использующий явление ядерного магнитного резонанса. Наиболее важными для химии и практических применений являются спектроскопия протонного магнитного резонанса (ПМР-спектроскопия), а также спектроскопия ЯМР на ядрах углерода-13 (^{13}C ЯМР-спектроскопия), фтора-19 (^{19}F ЯМР-спектроскопия), фосфора-31 (^{31}P ЯМР-спектроскопия) и других. Резонансное поглощение электромагнитных волн атомными ядрами, происходящее при изменении ориентации векторов их собственных моментов количества движения (спинов). Активными в ЯМР могут быть ядра со спиновым квантовым числом отличным от 0.

ЯМР возникает в образцах, помещённых в сильное постоянное магнитное поле, при одновременном воздействии на них слабого переменного электромагнитного поля радиочастотного диапазона (силовые линии

переменного поля должны быть перпендикулярны силовым линиям постоянного поля).

В данной работе использовался протонный магнитный резонанс для количественного и качественного анализа продуктов синтеза метиллактата.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

В данной работе представлена разработка и исследование нового метода синтеза метилового эфира молочной кислоты, которая сравнивается с уже имеющимися технологиями.

Расчёт данного раздела ВКР проводился с помощью [46].

4.1 Предпроектный анализ

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Результатом данного исследования является разработка газофазного синтеза получения метилового эфира молочной кислоты, которая является абсолютно новой технологией получения эфиров.

Метиллактат способен растворять многие вещества, поэтому в промышленности его в основном используют в качестве растворителя. Так метиллактат растворяет целлюлозу и её производные, используется в электронике для обезжиривания поверхностей, а также для растворения полимеров в синтезе мембран. Благодаря своей нетоксичности и биоразлагаемости метиллактат относится к зелёным растворителям, что позволяет использовать его также использовать и в пищевой промышленности. Помимо этого, метиллактат используется в органическом синтезе в качестве сырья.

Таблица 2 – Карта сегментирования рынка по области применения метиллактата [3]

Область рынка сбыта	**Доля рынка, %**
Продукты питания и напитки	26
Электроника	19
Фармацевтика	14
Лаки и краски	10
Агрохимикаты	12
Косметика	16
Другое	3

Несмотря на то, что метиллактат имеет обширное использование (Таблица 15) на данный момент в России нет заводов, синтезирующих метиллактат, но потребность в данном веществе есть. В связи с этим, имеются

потенциальные потребители данной технологии. В качестве реализуемого конечного продукта могут выступать патент на технологию или готовые вещества.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Детальный анализ конкурирующих разработок необходимо проводить систематически, поскольку рынки пребывают в постоянном движении. Данный анализ помогает вносить коррективы в научное исследование, чтобы разработка соответствовала требованиям рынка. Важно верно оценивать сильные и слабые стороны конкурирующих разработок. Данный анализ удобно проводить с использованием оценочной карты (Таблица 16).

Таблица 3 – Оценочная карта для сравнения конкурентных реагентов

Критерии оценки	**Вес критерия**	**Баллы**			**Конкуренто-способность**		
		$Б_ф$	$Б_{к1}$	$Б_{к2}$	$К_ф$	$К_{к1}$	$К_{к2}$
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Выход продукта	0,15	5	4	4	0,75	0,6	0,6
2. Энергоемкость процессов	0,1	4	4	4	0,4	0,4	0,4
3. Расход катализатора	0,15	4	3	3	0,6	0,45	0,45
4. Экологичность	0,15	5	3	4	0,75	0,45	0,6
5. Материалоемкость	0,15	5	4	4	0,75	0,6	0,6
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,1	4	3	3	0,4	0,3	0,3
2. Цена	0,1	4	5	4	0,4	0,5	0,4
3. Финансирование научной разработки	0,1	4	5	5	0,4	0,5	0,5
Итого	**1**	**35**	**31**	**31**	**4,45**	**3,8**	**3,85**

$Б_ф$ – газофазный синтез метиллактата

$Б_{к1,2}$ – другие способы получения метиллактата

Как видно из оценочной карты, газофазная технология синтеза метиллактата обладает рядом преимуществ по сравнению с существующими другими технологиями, что позволит полученным продуктам выйти на рынок и быть конкурентоспособными.

4.1.3 SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта (Таблица 17).

Таблица 4 – Матрица SWOT

	Сильные стороны: С1. Поэтапная разработка синтеза. С2. Получение продукта из простых и доступных субстратов. С3. Собственная уникальная технология. С4. Средний выход продукта.	**Слабые стороны:** Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки. Сл2. Отсутствие анализа потребителей.
Возможности: В1.Использование инновационной инфраструктуры ТПУ. В2.Появление дополнительного спроса на новый продукт. В3.Расширение диапазона товаров. В4. Возможность применение метода для других субстратов.	**СиВ** 1.Разработка нового способа получения метиллактата, и других эфиров молочной кислоты. 2. Благодаря использованию инновационной структуры экологичность и ресурсоэффективность технологии растет.	**СЛиВ** 1.Провести дополнительное исследование рынка потребителей перед внедрением продукта.
Угрозы: У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства. У2. Развитая конкуренция технологий производства. У3. Несвоевременное финансовое обеспечение научного исследования.	**СиУ** 1. Создание спроса на новые технологии в производстве. 2. Доработка метода по его конкурентным преимуществам. 3. Продукт конкурентоспособен и способен ослабить влияние угроз.	**СЛиУ** 1.Проведение опроса среди потенциальных потребителей 2. Проведение дальнейших исследований для повышения выхода конечного продукта.

4.1.4 Оценка готовности проекта к коммерциализации

На данном этапе проводим оценку степени готовности проекта к коммерциализации с помощью таблицы 18.

Таблица 5 – Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
Определен имеющийся научно-технический задел	5	4
Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	4	4
Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	5	5
Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	5	5
Определены авторы и осуществлена охрана их прав	3	4
Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	1
Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	3	4
Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	3
Определены пути продвижения научной разработки на рынок	3	3
Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	3	4
Имеется команда для коммерциализации научной разработки	5	5
Проработан механизм реализации научного проекта	5	5
ИТОГО БАЛЛОВ	**45**	**47**

Для характеристики готовности проекта к коммерциализации рассчитывается суммарное количество баллов по формуле:

$$Б_{сум} = \sum Б_i , \quad (11)$$

где $Б_{сум}$ – суммарное количество баллов по каждому направлению, $Б_i$ – балл по i-му показателю.

Оценка готовности научной разработки к коммерциализации имеет значения 45 и 47, это свидетельствует о том, что перспективность разработки, с точки зрения инвестирования, является выше средней, однако нуждается в более детальной проработке.

4.1.5 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Для данного продукта существуют два пути коммерциализации проекта: продажа патентов по готовой технологии синтеза метилового эфира молочной кислоты; организация совместных предприятий, работающих по схеме «российское производство – зарубежное распространение».

Первый путь является менее рискованным с точки зрения капиталовложений. Также высокая потребность данного вещества делает бизнес-проект рентабельным.

Второй метод позволяет привлечение в страну передовых технологий, управленческого опыта, дополнительные и материальные и финансовые ресурсы, привлекают иностранный капитал в отечественную экономику расширение экспортной базы, сокращение импорта, расширение рынков сбыта.

4.2 Инициатива проекта

В рамках процессов инициации определяются изначальные цели и содержание проекта и фиксируются изначальные финансовые ресурсы. На первом этапе определяются заинтересованные стороны (Таблица 19).

Таблица 6 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	**Ожидания заинтересованных сторон**
Научный руководитель	Разработка синтеза метилового эфира молочной кислоты
Магистрант	

В таблице 20 представлена иерархия целей проекта и критерии достижения целей.

Таблица 7 – Цели и результат проекта

Цели проекта	Разработка нового подхода синтеза метилового эфира молочной кислоты.
Ожидаемые результаты проекта	Новая методика получения метилового эфира молочной кислоты.
Критерии приемки результата проекта	Факт разработки методики синтеза и её воспроизводимость, ЯМР-спектры, ГХ хроматограммы.

Продолжение таблицы 20

Требования к результату проекта	- Высокие выходы метиллактата по предлагаемой методике - Минимальные затраты на производство и очистку - Воспроизводимость методики - Максимальная технологическая простота синтеза

4.2.1 Структура работ в рамках научного исследования

С целью установления точного графика работ необходимо проработать календарный план проекта. Он показывает занятость каждого члена коллектива в определенный момент времени. Календарный план приведен в таблице 21.

Таблица 8 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	**№ Раб.**	**Содержание работ**	**Должность исполнителя**
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Научный руководитель; магистр; консультант ЭЧ, СО и ИЯ
Выбор направления исследований	2	Поиск и изучение материалов по теме	Научный руководитель; магистр
	3	Выбор направления исследований	Научный руководитель; магистр
	4	Литературный и патентный обзор	Магистр
	5	Календарное планирование работ по теме	Научный руководитель; магистр
Теоретические исследования	6	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Магистр
Обобщение и оценка результатов	7	Оценка эффективности полученных результатов	Научный руководитель; магистр
	8	Определение целесообразности проведения ВКР	Научный руководитель; магистр
Проведение ВКР			
Разработка технической документации и проектирование	9	Разработка нового подхода синтеза метилового эфира молочной кислоты.	Магистр; научный руководитель
	10	Оценка эффективности производства и применения разработки	Магистр; консультант ЭЧ
	11	Разработка социальной ответственности по теме	Магистр; консультант СО
	12	Разработка английской части ВКР	Магистр; консультант ИЯ
Оформление комплекта документации по ВКР	13	Составление пояснительной записки	Магистр

4.2.2 Определение трудоёмкости выполнения работ

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 $t_{ожi}$ используется формула:

$$t_{ожi}=\frac{3t_{mini}+2t_{maxi}}{5}, \quad (12)$$

где $t_{ожi}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i-ой работы чел.-дн.; t_{mini} – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i-ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.; t_{maxi} – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i-ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

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

$$T_{pi}=\frac{t_{ожi}}{Ч_i}, \quad (13)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дней; $Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, человек.

Определение трудоёмкости данного научного исследования представлено в таблице 22.

Таблица 9 – Временные показатели проведения научного исследования

№	Название работ	Трудоёмкость работ, чел. дней			Исполнители	T_p, раб. дней	T_k, кал. дней
		t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$			
1	Составление и утверждение технического задания	0,3	1	0,6	Р	0,15	0,2
		0,3	1	0,6	М	0,15	0,2
		0,3	1	0,6	$К_1$	0,15	0,2
		0,3	1	0,6	$К_2$	0,15	0,2
		0,3	1	0,6	$К_3$	0,15	0,2
2	Поиск и изучение материалов по теме	0,5	2	1,1	Р	0,55	0,7
		0,5	2	1,1	М	0,55	0,7
3	Выбор направления исследований	6	12	8,4	Р	4,2	5
		6	12	8,4	М	4,2	5
4	Литературный и патентный обзор	7	10	8,2	М	8,2	9,7
5	Календарное планирование работ по теме	1	2	1,4	Р	0,7	0,8
		1	2	1,4	М	0,7	0,8
6	Проведение теоретических расчетов и обоснований	5	10	7	М	7	8,3
7	Оценка эффективности полученных результатов	2	3	2,4	Р	1,2	1,4
		5	7	5,8	М	2,9	3,4
8	Определение целесообразности проведения ВКР	6	7	6,4	Р	3,2	3,8
		6	7	6,4	М	3,2	3,8
9	Разработка нового подхода синтеза метилового эфира молочной кислоты.	10	15	12	М	12	14,2
10	Оценка эффективности производства и применения разработки	7	10	8,2	М	4,1	4,8
		7	10	8,2	$К_1$	4,1	4,8
11	Разработка социальной ответственности по теме	7	10	8,2	М	4,1	4,8
		7	10	8,2	$К_2$	4,1	4,8
12	Разработка английской части ВКР	7	10	8,2	М	4,1	4,8
		7	10	8,2	$К_3$	4,1	4,8
13	Составление пояснительной записки	10	15	12	М	12	14,2

Р – научный руководитель;

М – магистр;

$К_1$ – консультант по экономической части;

$К_2$ – консультант по социальной ответственности;

$К_3$ – консультант по иностранному языку.

4.2.3 Разработка графика проведения научного исследования

Для удобства построения графика, длительность каждого из этапов работ из рабочих дней следует перевести в календарные дни:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{кал}, \quad (14)$$

где T_{ki}– продолжительность выполнения i-й работы в календарных днях; $k_{кал}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{кал} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вых} - T_{пр}} = \frac{142}{142-18-4} = 1{,}18, \quad (15)$$

где $T_{кал}$ – календарные дни, равные 142 дням; $T_{вых}$ – выходные дни, равные 18 дням; $T_{пр}$ – праздничные дни, равные 4 дням.

Диаграмма Ганта – это горизонтальный ленточный график (Таблица 23), на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ. Данный график строится на основе таблицы 22.

Таблица 10 – Календарный план-график проведения НТИ

№	Название работ	Исполнители	T_k, кал. дней	Продолжительность выполнения работ						
				февраль	март		апрель		май	
				2	1	2	1	2	1	2
1	Составление и утверждение технического задания	Р	0,2							
		М	0,2							
		$К_1$	0,2							
		$К_2$	0,2							
		$К_3$	0,2							
2	Поиск и изучение материалов по теме	Р	0,7							
		М	0,7							
3	Выбор направления исследований	Р	5							
		М	5							
4	Литературный и патентный обзор	М	9,7							
5	Календарное планирование работ по теме	Р	0,8							
		М	0,8							
6	Проведение теоретических расчетов и обоснований	М	8,3							
7	Оценка эффективности полученных результатов	Р	1,4							
		М	3,4							
8	Определение целесообразности проведения ВКР	Р	3,8							
		М	3,8							
9	Разработка нового подхода синтеза метилового эфира молочной кислоты.	М	14,2							
10	Оценка эффективности производства и применения разработки	М, $К_1$	4,8							
11	Разработка социальной ответственности по теме	М, $К_2$	4,8							
12	Разработка английской части ВКР	М, $К_3$	4,8							
13	Составление пояснительной записки	М	14,2							

Р – научный руководитель; $К_1$ – консультант по ЭЧ $К_3$ – консультант по ИЯ

М – магистр; $К_2$ – консультант по СО

4.3 Бюджет научного исследования

Помимо анализа рынка необходимо проводить расчет затрат на проведение исследований, так как размер затрат на исследование зачастую определяет его целесообразность. В данном разделе полностью отражены все виды планируемых расходов, необходимые для выполнения проекта.

4.3.1 Сырье и материалы

В таблице 24 представлены расходы на приобретение реагентов с учетом транспортных расходов.

Таблица 11 – Сырье и материалы для проведения синтеза

Наименование	**Размер**	**Кол-во для всех испытаний**	**Цена за единицу, руб.**	**Сумма, руб.**
Метанол для ВЭЖХ	2,5 л	1,3 л	5700	2964
Молочная кислота, 80 %	1 л	0,2 л	200	40
Оксид цинка	100 г	22 г	1215	267
Серная кислота, 98 %	1 л	0,4 мл	193	0,08
Силикагель КСМГ	5 кг	34 г	649	5
Силикагель хроматографический	0,5 кг	16 г	1482	47
Хлороформ-D, 99,80 %	100 мл	40 мл	8073	3229
			Всего за субстраты	6552
			Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)	328
			Итого	**6880**

Помимо субстратов для синтеза также закупается лабораторное оборудование. Затраты на приобретение оборудования представлены в таблице 25.

Таблица 12 – Покупные изделия для проведения работ

Наименование оборудования	**Кол-во единиц оборудования**	**Цена единицы оборудования, руб.**	**Общая стоимость оборудования, руб.**
Пипетка Пастера, 1 мл, уп.250 шт./кор	1	2025	2025
Воронка стеклянная	1	20	20
Реактор	1	800000	800000
Теплообменник	2	50000	100000
Штатив	1	1800	1800
Колба круглодонная, 100 мл	2	229	458

Продолжение таблицы 25

Колба круглодонная, 50 мл	2	240	480
Стакан 50 мл	2	104	208
Виала, 2 мл	50	74	3700
Стакан 1 л	3	1269	3807
Делительная воронка, 250 мл	1	1779	1779
Изогнутый аллонж	1	708	708
Насадка Вюрца	1	670	670
Прямой холодильник	1	390	390
Обратный холодильник	1	430	430
Флакон пенициллиновый, 10 мл	50	9	450
ЯМР-ампула	100	5262	5262
		Итого	**922187**

4.3.2 Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включаются все затраты, связанные с приобретением специального оборудования. Определена стоимость спецоборудования производится по действующим прейскурантам (Таблица 26).

Таблица 13 – Расчет затрат на спецоборудование

Наименование оборудования	**Количество единиц оборудования**	**Цена единицы оборудования, руб.**	**Общая стоимость оборудования, руб.**
Автоклав	1	3800000	3800000
Магнитная мешалка Heidolph Hei-Standard с подогревом	2	260000	520000
Магнитная мешалка VELP с подогревом	1	100000	100000
Вакуумметр DVR 2, Vacuubrand	1	120000	120000
Насос перистальтический LS-301, LOIP	1	118530	118530
Химическая вакуумная станция VARIO® PC 3001	1	2300000	2300000
Термометр лабораторный электронный ЛТ-300-Н	1	25000	25000
	Итого	**9223530**	**6983530**

Для оборудования нужно рассчитать величину годовой амортизации по следующей формуле:

$$А_{год} = \frac{С_{перв} \cdot Н_{ам} \cdot Т_{об}}{365 \cdot 100}, \quad (16)$$

где $С_{перв}$ – первоначальная стоимость оборудования, руб.; $Н_{ам}$ – норма амортизации прибора или оборудования, %; $Т_{пи}$ – время использования оборудования, дней.

Таблица 14 – Расчет амортизационных затрат на спецоборудование

Наименование оборудования	**$С_{перв}$, руб.**	**$Н_{ам}$, %**	**$Т_{пи}$, дней**	**$А_{год}$, руб.**
Автоклав	3800000	5,6	15	8745
Магнитная мешалка Heidolph Hei-Standard с подогревом	520000	8,8	45	5642
Магнитная мешалка VELP с подогревом	100000	8,8	40	964
Вакуумметр DVR 2, Vacuubrand	120000	5,6	40	736
Насос перистальтический LS-301, LOIP	118530	8,8	40	1143
Химическая вакуумная станция VARIO® PC 3001	2300000	5,6	40	14115
Термометр лабораторный электронный ЛТ-300-Н	25000	3,8	40	104
			Итого	**31449**

4.3.3 Основная заработная плата

Величина расходов по заработной плате определяется, исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок в Томском политехническом университете.

Таблица 15 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	**Научный руководитель**	**Магистр**	**Консультант по ЭЧ**	**Консультант по СО**	**Консультант по ИЯ**
Календарное число дней	365	365	365	365	365
Количество нерабочих дней (выходные/праздничные)	118	118	118	118	118
Потери рабочего времени - отпуск - невыходы по болезни	 56 0	 28 0	 56 0	 56 0	 56 0
Действительный годовой фонд рабочего времени	191	219	191	191	191

Месячный должностной оклад работника рассчитывается по формуле:

$$З_м = З_{тс} \cdot k_р, \quad (17)$$

где $З_{тс}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.; $k_р$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для г. Томска).

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{дн}=\frac{З_м \cdot М}{F_д}, \quad (18)$$

где М – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 56 раб. дня М = 10,3 месяца, 6-дневная неделя; при отпуске в 28 раб. дня М = 11,15 месяца, 6-дневная неделя; $F_д$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дней.

Расчёт основной заработной платы представлен в таблице 29.

Таблица 16 – Расчёт основной заработной платы

Исполнители	**Разряд**	**Зтс, руб.**	**Зм, руб.**	**Здн, руб**	**Fд, раб.дней**	**Зосн, руб.**
Научный руководитель	Доцент	35120	45656	2462	12	29544
Магистр	Инженер-исследователь	11990	15587	794	67	53198
Консультант по ЭЧ	Доцент	35120	45656	2462	5	12310
Консультант по СО	Профессор	52263	67942	3664	5	18320
Консультант по ИЯ	Доцент	35120	45656	2462	5	12310
					Итого	**125682**

4.3.4 Дополнительная заработная плата

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

$$З_{доп}=З_{осн} \cdot k_{доп}, \quad (19)$$

где $З_{доп}$ – дополнительная заработная плата, руб.; $k_{доп}$ – коэффициент дополнительной зарплаты, равный 0,12…0,15; $З_{осн}$ – основная заработная плата, руб.

Таблица 17 – Дополнительная заработная плата исполнителей

Исполнители	**$З_{осн}$, руб.**	**$З_{доп}$, руб.**
Научный руководитель	29544	4432
Магистр	53198	7980
Консультант по ЭЧ	12310	1847
Консультант по СО	18320	2748
Консультант по ИЯ	12310	1847
Итого		**18852**

4.3.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления, установленные законодательством Российской Федерации.

$$З_{внеб}=k_{внеб}\cdot(З_{доп}+З_{осн}), \quad (20)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.), равный 0,302.

Таблица 18 – Отчисления во внебюджетные фонды

Налогоплательщик	**Основная заработная плата, руб.**	**Дополнительная заработная плата, руб.**	**Отчисления во внебюджетные фонды, руб.**
Научный руководитель	29544	4432	10261
Магистр	53198	7980	18476
Консультант по ЭЧ	12310	1847	4275
Консультант по СО	18320	2748	6363
Консультант по ИЯ	12310	1847	4275
Итого			**35172**

4.3.6 Расчет затрат на научные и производственные командировки

На данном этапе в научных и производственных командировках нет необходимости.

4.3.7 Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями

На эту статью относится стоимость контрагентных работ, т.е. работ, выполненных сторонними организациями и предприятиями по заказу данной

научно-технической организации, результаты которых используются в конкретном НТИ. Величина этих расходов определяется по договорным условиям.

Использование ЯМР спектрометра (Bruker AVANCE III HD 400 MHz) на базе НИ ТГУ предполагает следующие анализы, представляющие интерес в данной тематике:

Таблица 19 – Расходы на проведение ЯМР-спектроскопии

Анализ	**Цена за единицу, руб**	**Количество**	**Общая стоимость, руб.**
ЯМР ^{1}H	500	30	15000
		Итого	**15000**

4.3.8 Накладные расходы

В эту статью включаются затраты на управление и хозяйственное обслуживание: содержание, эксплуатация и ремонт оборудования, производственного инструмента и инвентаря, зданий и т.д.

$$C_{накл}=k_{накл}\cdot(\sum п.1\ldots7)=0{,}16\cdot1155222=184836 \text{ руб.}, \quad (21)$$

где $k_{накл}$ – коэффициент накладных расходов, равный 16 %.

Таблица 20 – Итоговые затраты на проект

Статьи	**Сумма, руб.**
Сырье и материалы	6880
Покупные изделия	922187
Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	31449
Основная заработная плата	125682
Дополнительная заработная плата	18852
Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	35172
Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями	15000
Накладные расходы	184836
Итого: бюджет затрат НТИ	**1340058**

Как видно из таблицы 33 основные затраты ВКР приходятся на покупку изделий, стоимость покупных изделий равняется 922 тыс. руб.

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по формуле:

$$I_{финр}=\frac{Ф_{pi}}{Ф_{max}}, \quad (22)$$

где $I_{финр}$ − интегральный финансовый показатель разработки; $Ф_{pi}$ – стоимость i-го варианта разработки или аналога; $Ф_{max}$ – максимальная стоимость разработки или аналога научно-исследовательского проекта.

Поскольку максимальная стоимость разработки аналога неизвестна, возьмем этот параметр равным расчетной стоимости разработки, тогда:

$$I^{тп}_{финр}=I^{a1}_{финр}=I^{a2}_{финр}=1. \quad (23)$$

В таблице 34 представлен интегральный показатель ресурсоэффективности (I_p) вариантов исполнения.

Таблица 21 – Сравнительная оценка характеристик проектов

ОИ / **Критерии**	**Весовой коэфф. параметра**	**Текущий проект**	**Аналог 1**	**Аналог 2**
2. Выход продукта	0,25	5	4	4
2. Энергоемкость процессов	0,15	4	4	4
3. Расход катализатора	0,15	4	3	3
4. Экологичность	0,20	5	3	4
5. Материалоемкость	0,25	5	4	4
Итого I_p	**1**	**4,7**	**3,65**	**3,85**

Для расчета интегрального показателя эффективности вариантов исполнения воспользуемся формулой:

$$I_{исп}=\frac{I_p}{I_{финр}}. \quad (24)$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта и выбрать наиболее целесообразный вариант из предложенных. Сравнительная эффективность разработки представлена в таблице 35.

Таблица 22 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель	1	1	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности	4,7	3,65	3,85
3	Интегральный показатель эффективности	4,7	3,65	3,85
4	Сравнительная эффективность вариантов	1	1,29	1,22

Общий вывод по разделу: В результате работы по разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» выявили и сравнили разработку и два аналога научно-исследовательской работы. Бюджет затрат разработки равен 1,3 млн. рубля. На основании проведенной сравнительной оценки характеристик проекта можно сделать вывод, что данный проект является перспективным и инвестиционно-привлекательным. По сравнению с другими аналогами текущий проект является более эффективным, что видно по итоговым показателям. Но стоит отметить, что проект нуждается в более детальной проработке, а также необходима более полная оценка возможных рисков и детализация затрат.

5 Социальная ответственность

Цель разработки экологической безопасности синтеза метилового эфира молочной кислоты, рассматриваемого в рамках данной ВКР – обеспечение надежной и безопасной работы в химической лаборатории, в том числе при аварийных ситуациях, и разработка системы мероприятий, позволяющих максимально снизить или полностью исключить угрозу для человека и окружающей среды.

Категория выполненных работ определяется, как IIа. К такой категории относятся работы, выполняемые в условиях, когда предельно допустимые концентрации и предельно допустимые уровни вредных и опасных факторов производства не превышают требований нормативно-технических документов. Данный вид работ связан с постоянной ходьбой, перемещением мелких (до 1 кг) изделий или предметов в положении стоя или сидя, требующий незначительного физического напряжения. При работе в химической лаборатории осуществляются следующие действия: использование и перемещение тар с реактивами массой не более 900 г между приборами, которые стационарно закреплены на постоянных местах, поэтому не требуют применения значительной физической силы при их эксплуатации.

Рабочим местом в процессе выполнения работы являлась лаборатория 207, расположенная в Научном парке ТПУ, представляющая собой помещение высотой 4,5 м, в котором распределены вытяжные шкафы, оборудованные вентиляцией, а также снабжены линиями водопровода и электропровода. Вытяжные шкафы являются основной рабочей зоной студента. Отдельно устанавливаются шкафчики для хранения чистой посуды и различных лабораторных инструментов, а также реактивов. Работать в лаборатории необходимо в халате, перчатках и защитных очках в целях предохранения одежды и кожи от контакта с химическими веществами [47].

Согласно статье 265 Трудового кодекса Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 05.02.2018) к работе в химических лабораториях

допускаются лица в возрасте не моложе 18 лет, прошедшие инструктаж по охране труда, медицинский осмотр и не имеющие противопоказаний по состоянию здоровья. Лица, допущенные к работе в лаборатории, должны соблюдать правила внутреннего трудового распорядка, расписание учебных занятий, установленные режимы труда и отдыха.

5.1 Производственная безопасность

В таблице 36 представлены возможные опасные и вредные факторы при синтезе метилового эфира молочной кислоты.

Таблица 23 – Возможные опасные и вредные факторы при синтезе метилового эфира молочной кислоты

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	**Этапы работ**		**Нормативные документы**
	Синтез	Анализ	
Отклонение показателей микроклимата	+	+	Параметры микроклимата устанавливаются СанПиН 1.2.3685-21 [48]
Превышение уровня шума	+	+	Санитарные нормы к параметрам шума устанавливаются ГОСТ 12.1.029-80 ССБТ. [49]
Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	+	Требования к освещению устанавливаются СП 52.13330.2016 [50]
Токсические и раздражающие действия органических растворителей, химических веществ	+	+	Требования безопасности к вредным веществам устанавливаются ГОСТ 12.1.007–76 ССБТ[51].
Движущиеся машины и механизмы; подвижные части производственного оборудования	+	-	Общие требования к производственному оборудованию устанавливаются ГОСТ 12.2.061-81 ССБТ [52].
Повышенная температура поверхностей оборудования, материалов	+	-	Общие требования к производственному оборудованию устанавливаются ГОСТ 12.2.061-81 ССБТ [53].
Электробезопасность. Пределы допустимые уровни напряжений прикосновения и токов	+	+	Требования по электробезопасности описаны в ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ [54].

5.1.1 Недостаточная освещенность рабочей зоны

Естественное и искусственное освещение рабочих помещений регламентируется в зависимости от характера зрительной нагрузки, вида освещения, контраста и фона [50].

Несоблюдение норм освещенности ведет к некачественному исполнению сотрудниками своих трудовых обязательств, а также постепенному падению зрения рабочих.

В лаборатории 207 НП ТПУ используют искусственное и естественное освещение, так как работа в основном зрительная, то естественного освещения недостаточно особенно в темное время суток.

Для обеспечения нормируемых значений освещенности в помещении следует проводить чистку окон и осветительных проборов не реже двух раз в год и проводить своевременную замену перегоревших ламп.

Для искусственного освещения помещения следует использовать главным образом люминесцентные лампы. Наиболее приемлемыми являются люминесцентные лампы белого и тепло-белого света.

При проведении исследований соблюдаются нормы освещенности рабочей зоны. По задачам зрительной работы лаборатория 207 НП ТПУ относится к первой группе. Тип работ принадлежит к зрительным работам средней точности с малой и средней контрастностью объекта различия с фоном.

5.1.2 Отклонение показателей микроклимата в помещении

Создание благоприятных условий работы, соответствующих физиологическим потребностям человеческого организма, определяется санитарными нормами, которые устанавливают оптимальные и допустимые условия в рабочей зоне.

Оптимальные микроклиматические условия представляют сочетание параметров климата, которые при длительном и систематическом воздействии на человека обеспечивают сохранение нормального функционального и теплового состояния организма без напряжения реакций терморегуляции.

Контроль соответствующих норм микроклимата проводился в соответствии с нормативными документами [48].

Таблица 24 – Допустимые нормы микроклимата

Период года	**Температура воздуха, °С**		**Относительная влажность воздуха, %**	**Скорость движения воздуха, м/с**
	Нижняя допустимая граница	Верхняя допустимая граница		
Холодный	15	24	20 – 80	< 0,5
Теплый	17	29	20 – 80	< 0,5

В случае несоответствия параметров микроклимата допустимым нормам для данного класса помещений, есть риск повышенной заболеваемости рабочего персонала, в первую очередь, простудными заболеваниями. Неподходящие параметры микроклимата также приводят к снижению работоспособности сотрудников вследствие некомфортных условий труда.

К средствам коллективной защиты можно отнести установки кондиционирования воздуха, которые поддерживают параметры воздуха в пределах, обеспечивающих комфортные условия для рабочего персонала.

В случае проведения данной исследовательской работы отсутствовали отклонения от норм температурного режима.

5.1.3 Повышенный уровень шума

В результате гигиенических исследований установлено, что шум ухудшает условия труда оказывая вредное воздействие на организм человека. В результате длительного воздействия шума нарушается нормальная деятельность сердечно-сосудистой и нервной систем, пищеварительных и кроветворных органов, развивается профессиональная тугоухость, прогрессирование которой может привести к полной потере слуха.

В химической лаборатории установлены предельно допустимые уровни звукового давления и звука, указанные в таблице 38.

Таблица 25 – Значение предельно допустимого звукового давления помещения лабораторий для проведения экспериментальных работ [48, 56]

	Для источников постоянного шума								Для источников непостоянного шума	
	Уровни звукового давления, дБ, в октавных полосах частот со среднегеометрическими частотами, Гц							Корректированный уровень звука, дБ	Эквивалентный корректированный уровень звука, дБ	Максимально корректированный уровень звука, дБ
	31,5	63	125	250	500	1000	2000			
Предельно допустимые октавные уровни звукового давления, дБ	103	91	83	77	73	70	68	75	75	90

Шум на рабочем месте в лаборатории 207 НП ТПУ создается вытяжной системой, роторным испарителем, вакуумным насосом, чиллером и перильстатическим насосом. ПДУ для лаборатории равен 82 дБА.

Превышение уровня шума ведет к дополнительной психофизической нагрузке рабочих, вследствие которой падает производительность труда.

Средства и методы защиты от шума приведены в соответствии с нормами [55]:

- ослабление шума самих источников, в частности, применение в их конструкции акустических экранов, кожухов и т.д.;
- рациональное расположение оборудования;
- использование средств индивидуальной защиты.

Основными мерами борьбы с шумом и вибрацией в лаборатории 207 НП ТПУ является их ослабление или ликвидация непосредственно в источнике их образования. Это достигается своевременной смазкой, ремонтом и

балансировкой оборудования, установкой акустические экранов и использование беруш в качестве индивидуальной защиты.

5.1.4 Токсические и раздражающие действия органических растворителей, химических веществ

Основной опасностью при работе в лаборатории органического синтеза является контакт слизистых оболочек и кожи с органическими веществами. Дополнительную опасность представляет работа с летучими жидкими растворителями и реагентами. В ходе работы пары таких веществ могут попасть в дыхательные пути, оказывая негативное влияние на слизистые и нанося вред органам дыхания человека, а также могут оказывать раздражающее и повреждающее действие на слизистые оболочки глаз. Для минимизации таких травм необходимо следовать правилам работы в химической лаборатории: открывать, наливать, разбавлять вредные вещества необходимо в халате, перчатках, защитных очках, все манипуляции проводить в вытяжном шкафу. По характеру воздействия на организм вещества данного вида являются токсическими, раздражающими, сенсибилизирующими, канцерогенными.

Работа с твердыми химическими веществами также опасна, но они могут нанести вред человеку только при попадании на кожу в большом количестве, и при попадании в желудочно-кишечный тракт. Для минимизации вреда от твердых веществ необходимо добавлять их, с помощью шпателей, работать в перчатках, халате, проводить работу в вытяжном шкафу.

Вредные воздействия каждого из используемых в процессе выполнения ВКР веществ представлены ниже в таблице 39.

Таблица 26 – Характеристика вредных веществ, используемых в синтезе метилового эфира молочной кислоты [48]

Название вещества (формула)	Физические свойства	ПДК, мг/м^3, (класс опасности)	Общий характер воздействия	Первая помощь
Метанол CH_3OH	Бесцветная прозрачная жидкость. Плотность (20°С) 0,791-0,792 г/см^3	5 (III)	Обладает политропным действием с преимущественным воздействием на нервную систему, печень и почки, может вызывать смертельный исход.	При попадании внутрь необходимо промыть желудок, обеспечить обильное питье. Принять этиловый спирт в качестве противоядия (0,5 мл на 1 кг веса).
Метиллактат $CH_3CH(OH)COOCH_3$	Прозрачная жидкость. $T_{кип}$ = 144 °С	(IV) $ЛД_{50}$=2000 мг/кг	Раздражает слизистую оболочку глаз.	При контакте с глазами: промыть большим количеством воды.
Молочная кислота $CH_3CH(OH)COOH$	Прозрачная жидкость желтоватого цвета. Плотность (20°С) 1,225 г/см^3.	900 (IV)	Раздражает слизистые оболочки, при попадании на кожу вызывает сильные химические ожоги.	При попадании на кожу промыть кожу водой. При попадании в глаза осторожно промыть глаза водой в течение нескольких минут. При проглатывании срочно прополоскать рот и выпить большое количество воды. Немедленно обратиться к врачу.
Оксид цинка ZnO	Бесцветный кристаллический порошок. $T_{пл}$ = 1975 °С	0,5 (II)	Может причинить вред при проглатывании или при попадании на кожу.	При попадании на кожу промыть кожу водой. При вдыхании обеспечить доступ свежего воздуха. При проглатывании срочно прополоскать рот.
Силикагель SiO_2	Высушенный гель в виде гранул.	2 (III)	Отсутствует пагубное влияние на организм.	–
Хлороформ $CHCl_3$	Бесцветная летучая жидкость с эфирным запахом $T_{кип}$ = 61,2 °С	20 (IV)	Пагубно влияет на работу ЦНС, оказывает токсическое действие на внутренние. органы, особенно на печень.	При отравлении пострадавшего нужно немедленно вывести на свежий воздух, покой.

Продолжение таблицы 39

Серная кислота H_2SO_4	Тяжёлая маслянистая жидкость без цвета и запаха, с сильнокислым «медным» вкусом.	1 (II)	Раздражает слизистые оболочки, при попадании на кожу вызывает сильные химические ожоги.	При воздействии на кожу удалить избыток вещества ватным тампоном, смыть слабой струей холодной воды в течение 15 мин. При ожоге нанести асептическую повязку. При отравлении пероральным путем обильное питье холодной воды. Обратиться за медицинской помощью. Рвоту не вызывать!

Во избежание контакта с вредными веществами необходимо соблюдать нормы технологического режима. Также необходимо соблюдать технику эксплуатации и применять средства индивидуальной защиты, такие как:

- использование униформы (халата, защитных очков, перчаток, фартуков, респираторных масок и противогазов);
- работа с веществами исключительно под вытяжкой;
- соблюдение техники безопасного обращения и хранения химических веществ.

5.1.5 Повышенная температура поверхностей оборудования, материалов

Устройства, вырабатывающие тепло, представлены электрическими плитками, сушильными шкафами, для работы с которыми необходимо провести инструктаж. Термическое действие на человека проявляется в ожогах отдельных участков тела. К средствам защиты рабочих от термических опасностей можно отнести: очки, термостойкие рукавицы. Более того, необходимо использовать нагревательные приборы со встроенной оповестительной системой (в виде мигающей лампочки на панели управления) о нагреве прибора.

ПДУ для открытых нагретых поверхностей составляет 45 °С.

5.1.6 Электробезопасность

Высокое значение для предотвращения травм, возникших вследствие воздействия электричества, имеет правильная организация обслуживания действующих электроприборов и электропроводки.

Лабораторные помещения с точными проборами относятся к первой категории по степени опасности поражения электрическим током. Безопасными номиналами являются: $I < 0,1$ А; $U < (2\text{-}36)$ В; $R_{зазем} < 4$ Ом.

На данный момент степень оснащения химической лаборатории электрооборудованием высока. Обеспечение электробезопасности в лаборатории производится в соответствии с правилами [56]. Источниками опасности могут являться: электрические плитки, сушильный шкаф, роторный вакуумный испаритель, вакуумный насос, чиллер, перильстатический насос. Используемое электрооборудование отвечает требованиям техники безопасности.

Работу с электрическими приборами, находящимися под напряжением, нужно выполнять с применением электрозащитных средств (диэлектрических резиновых перчаток, изолирующих подставок).

Электроприборы, работающие 42 В и более, надежно заземлены и при аварийной ситуации происходит защитное выключение.

Все розетки маркированы для визуального определения их напряжения. Строго запрещается работать на неисправных электрических приборах и установках. Руководитель химической лаборатории и сотрудник, отвечающий за технику безопасности, регулярно проводят инструктажи и проверяют состояние оборудования и приборов, не допуская использование неисправных устройств.

При возникновении чрезвычайных ситуаций пострадавшим требуется оказать первую медицинскую помощь, состоящую из двух этапов: освобождение пострадавшего от действия электрического тока и оказания ему доврачебной медицинской помощи.

5.1.7 Расчёт освещения рабочего места

Расчёт общего равномерного искусственного освещения горизонтальной рабочей поверхности выполняется методом коэффициента светового потока, учитывающим световой поток, отражённый от потолка и стен. Длина помещения А = 10 м, ширина В = 8, м, высота = 3,5 м. Высота рабочей поверхности над полом h_p = 1,0 м. Согласно СП 52.13330.2016 необходимо создать освещенность не ниже 200 Лк, в соответствии с разрядом зрительной работы.

Площадь помещения:

$$S = A \cdot B = 10 \cdot 8 = 80 \text{ м}^2. \quad (25)$$

Коэффициент отражения свежепобеленных стен с окнами, с открытыми шторами штор ρ_c =50 %, свежепобеленного потолка потолка ρ_n =70 %. Коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника, для помещений с малым выделением пыли равен k =1,5. Коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп Z= 1,1. [54]

Выбираем лампу дневного света ЛД-40, световой поток которой равен $Ф_{ЛД}$ = 2600 Лм.

Выбираем светильники с люминесцентными лампами типа ОДОР-2-40. Этот светильник имеет две лампы мощностью 40 Вт каждая, длина светильника равна 1227 мм, ширина – 265 мм.

Интегральным критерием оптимальности расположения светильников является величина λ, которая для люминесцентных светильников с защитной решёткой лежит в диапазоне 1,1–1,3. Принимаем λ=1,1, расстояние светильников от перекрытия (свес) h_c = 0,5 м.

Наименьшая допустимая высота подвеса над полом для двухламповых светильников ОДОР: h_n = 3,5 м.

Высота светильника над рабочей поверхностью определяется по формуле:

$$h = H - h_c - h_p = 3{,}5 - 0{,}5 - 1 = 2{,}0 \text{ м}. \quad (26)$$

Находим число ламп N из формулы:

$$Ф=\frac{E\cdot S\cdot k\cdot Z}{N\cdot \eta} => N = \frac{E\cdot S\cdot k\cdot Z}{Ф\cdot \eta} \quad (27)$$

Коэффициент использования светового потока (η) определяется через индекс помещения:

$$i=\frac{S}{h\cdot(A+B)}=\frac{80}{2,0\cdot(10+8)}=2,22. \quad (28)$$

Коэффициент использования светового потока, показывающий какая часть светового потока ламп попадает на рабочую поверхность, для светильников типа ОДОР с люминесцентными лампами при $\rho_П$ = 70 %, $\rho_С$ = 50 % и индексе помещения i = 2,22 равен η = 0,54.

$$N=\frac{E\cdot S\cdot k\cdot Z}{Ф\cdot \eta}=\frac{200\cdot 80\cdot 1,5\cdot 1,1}{2600\cdot 0,54}=18 \text{ ламп}. \quad (29)$$

Тогда в данной лаборатории имеется 18 ламп, при этом получается 9 светильников, т.е. 3 ряда по 3 светильника.

Из условий равномерности освещения определяем расстояния L_1 и $L_1/3$ и L_2 и $L_2/3$ по следующим уравнениям:

$$10000 = 2\cdot L_1 + \frac{2}{3}\cdot L_1 + 3\cdot 1227; \quad (30)$$

$$L_1=2340 \text{ мм} \rightarrow L_1/3=780 \text{ мм};$$

$$8000 = 2\cdot L_2 + \frac{2}{3}\cdot L_2 + 3\cdot 265; \quad (31)$$

$$L_2 =2700 \text{ мм} \rightarrow L_2/3=900 \text{ мм}.$$

На рисунке 10 изображен план помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами.

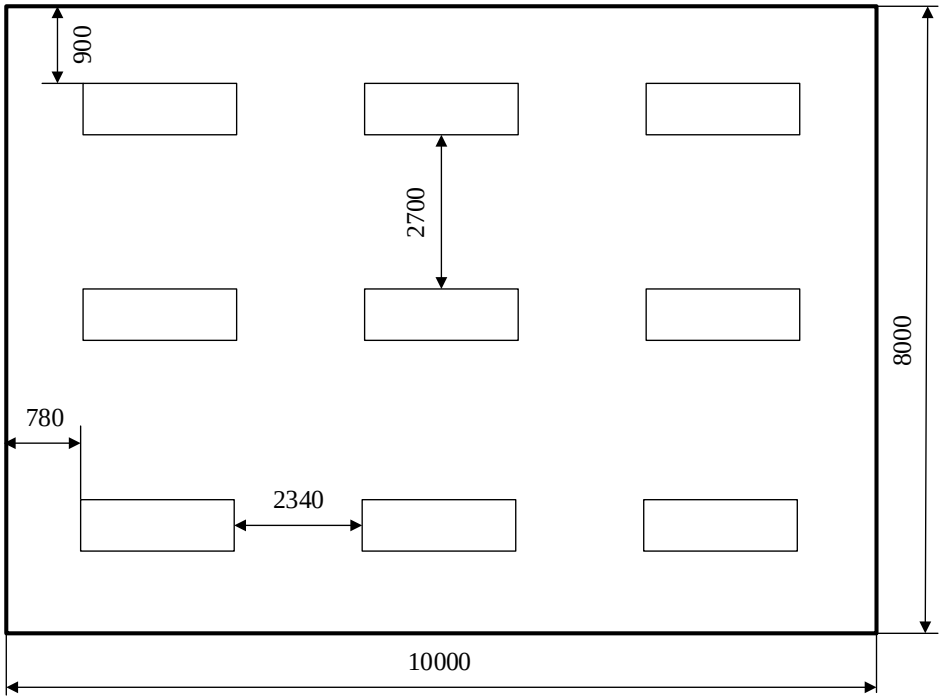


Рисунок 4 – План помещения и размещения светильников с люминесцентными лампами

Потребный световой поток люминесцентной лампы определяется по формуле:

$$Ф=\frac{E\cdot S\cdot k\cdot Z}{N\cdot \eta}; \quad (32)$$

$$Ф=\frac{200\cdot 80\cdot 1,5\cdot 1,1}{18\cdot 0,54}=2716 \text{ Лм}.$$

Делаем проверку выполнения условия:

$$-10\ \% \leq \frac{Ф_{л.станд}-Ф}{Ф_{л.станд}}\cdot 100\ \% \leq +20\ \%; \quad (33)$$

$$-10\ \% \leq \frac{2600-2716}{2600}\cdot 100\ \% \leq +20\ \%;$$

$$-10\ \% \leq -4,5\ \% \leq +20\ \%.$$

Таким образом, мы получили, что необходимый световой поток не выходит за пределы требуемого диапазона. Теперь рассчитаем мощность осветительной установки:

$$P=18\cdot 40=720 \text{ Вт}. \quad (34)$$

5.1.8 Пожаробезопасность

Наиболее типичной, и в то же время наиболее опасной ЧС, которая может возникнуть в лаборатории органического синтеза, является пожар.

Поэтому в целях защиты имущества лаборатории, а также жизни, здоровья и имущества работающих там людей был принят закон технического регулирования, устанавливающий требования пожарной безопасности [57].

По классу пожароопасности лаборатория 207 НП ТПУ относится к категории Б. К данной категории относят производства, связанные с применением веществ, воспламенение или взрыв которых может последовать в результате взаимодействия данных веществ с водой или кислородом воздуха, или жидкостей с температурой вспышки паров более 28 °С.

Причиной возникновения пожара на рабочем месте также может послужить неисправность электрооборудования, короткое замыкание, использование открытых нагревательных приборов, неосторожное обращение с легковоспламеняющимися растворителями.

Согласно правилам пожарной безопасности [57], на рабочем месте у входной двери на видном месте находится углекислотный огнетушитель (ОУ). ОУ предназначены для тушения пожаров категории В, С, Е, в тех случаях, когда в процессе горения участвует кислород. Очень эффективно применение ОУ на начальных стадиях распространения пожара и там, где по ряду причин нельзя использовать воду. Однако ОУ запрещается применять для тушения пожаров электрооборудования, находящегося под напряжением выше 10 кВ. Также при использовании ОУ необходимо иметь в виду, что углекислота в больших концентрациях к объему помещения может вызвать отравления персонала, поэтому после применения углекислотных огнетушителей небольшие помещения следует проветрить.

В случае возгорания нерастворимых в воде веществ, следует применять сухой песок, или покрывать очаг пожара асбестом, поэтому в лаборатории также имеется резервуар с песком. Также в соответствии с установленными нормами в лаборатории присутствуют опознавательные знаки аварийных выходов и схема эвакуации (Рисунок 11).

Рисунок 5 – План эвакуации лаборатории 207 НП ТПУ

5.2 Экология

В качестве отходов при выполнении ВКР присутствуют: бумага-черновики, полимерные отходы, стекло и перегоревшие люминесцентные лампы.

Для сокращения выбросов следует организовать раздельный сбор с дальнейшей переработкой в специальных местах. Так в Томске бумажные и бытовые полимерные отходы можно сдавать в организацию «Чистый мир». При переработке стекла не следует смешивать различные типы стекол, так для каждого вида существует своя технология переработки. Бой стеклянной химической посуды относится к IV классу опасности и требует специальных мер по его переработке. В Томске сбором и дальнейшей переработкой боросиликатного стекла занимается компания «ЭКО Архитектура».

Утилизация люминесцентных ламп является обязательной, так как данный вид источников света содержит в себе определенное количество ртути. Отходы, содержащие ртуть – это отходы 1 класса опасности. Содержание этого металла в разных видах ртутных осветительных устройствах варьируется в пределах от 1 мг до 70 мг ртути. Поэтому выброс ламп на свалки и полигоны

приведет к глобальному загрязнению почв, подземных вод, к отравлению живых организмов. Также ртуть отработанных приборов может образовывать не менее токсичные соединения, например, катион метилртуть, которые также представляют угрозу для всех живых организмов. Люминесцентных лампы утилизируют следующими способами: механический, механико-химический, термический и термовакуумный с криоконденсацией [58].

В России наиболее распространен способ термического воздействия. В данном случае сначала утилизируемые осветительные приборы собираются и складируются, для этого используют специальную герметичную тару, в которой осуществляется хранение ламп до непосредственного уничтожения. Когда приборы помещают в печь, их освобождают от упаковки. Далее в печи происходит нагревание до 400 °С, при такой температуре происходит переход ртути в газообразное состояние, образовавшийся газ отводится через вытяжку.

На данный момент в разных городах действуют организации, которые предоставляют услуги по сбору и утилизации газоразрядных источников света в соответствии с ОКПД 90.02.140149, в Томске утилизацией люминесцентных ламп занимаются следующие компании: Полигон, Пеликан, Экология тепла.

Таким образом, можно заключить, что экологическая безопасность в ходе выполнения ВКР «Синтез метилового эфира молочной кислоты» была полностью соблюдена.

5.3 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Чрезвычайные ситуации классифицируются в зависимости от их характера, сферы возникновения, масштабов и размеров ущерба. По характеру источников возникновения: природные, техногенные, экологические и биолого-социальные [59].

Так как ВКР проводилась на территории г. Томска, то такие природные явления как землетрясения, наводнения, засухи, ураганы и т. д. отсутствуют, в связи с тем, что на данной территории континентально-циклоническим климат.

Поэтому возможными ЧС в лаборатории 207 НП ТПУ в данном случае, могут быть сильные морозы и диверсия.

Для Томска в зимнее время года характерны морозы, в результате которых при достижении критических температур могут случаться аварии систем тепло- и водоснабжения, сантехнических коммуникаций и электроснабжения. В этом случае при подготовке к зиме следует предусмотреть:

- газобаллонные калориферы (запасные обогреватели);
- дизель или бензоэлектрогенераторы;
- запасы питьевой и технической воды на складе (не менее 30 л на 1 человека);
- теплый транспорт для доставки работников на работу и с работы домой в случае отказа муниципального транспорта.

Корпуса ТПУ подвержены возникновению ЧС техногенного характера, а именно диверсии. Для предупреждения вероятности осуществления диверсии на территории НП ТПУ необходимо оборудовать данный корпус системой видеонаблюдения, круглосуточной охраной, пропускной системой, надежной системой связи, а также исключения распространения информации о системе охраны объекта, расположении помещений и оборудования в помещениях, системах охраны, сигнализаторах, их местах установки и количестве. Должностные лица раз в полгода должны проводить тренировки по отработке действий на случай экстренной эвакуации.

5.4 Перечень нормативно-технической документации

Для выполнения данного раздела ВКР были изучены следующие законодательные акты Российской Федерации:

1. ТР ТС 019/2011. О безопасности средств индивидуальной защиты (с изменениями на 28 мая 2019 года).

2. СанПиН 1.2.3685-21. Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания.

3. ГОСТ 12.1.029-80. Система стандартов безопасности труда. Средства и методы защиты от шума. Классификация.

4. СП 52.13330.2016. Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95.

5. ГОСТ 12.1.007-76. Система стандартов безопасности труда. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности.

6. ГОСТ 12.2.061-81. Система стандартов безопасности труда. Оборудование производственное. Общие требования безопасности к рабочим местам.

7. ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Пределы допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.

8. СП 51.13330.2011. Защита от шума. Актуализированная редакция СНиП 23-03-2003.

9. ГОСТ 12.1.019-2017. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.

10. Российская Федерация. Законы. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности (с изменениями на 30 апреля 2021 года): Федеральный закон № 123-ФЗ.

11. ГОСТ Р 22.7.02-2021. Регламенты по организации информирования населения о чрезвычайных ситуациях.

Общий вывод по разделу: В ходе выполнения радела «Социальная ответственность» выпускной квалификационной работы «Синтез метилового эфира молочной кислоты» были изучены правовые и организационные аспекты обеспечения безопасности при проведении данного исследования. Анализ вредных и опасных факторов работы в химической лаборатории показал, что данное исследование является безопасным при соблюдении правил техники

безопасности, а также не оказывает негативного воздействия на окружающую среду. В ходе проведения исследования все химические вредные вещества утилизируются и перерабатываются. Вопросы, связанные с социальной ответственностью, регулируются нормативными документами.

Заключение

В результате проделанной работы можно сделать следующие выводы:

1. Была разработана и оптимизирована методика определения метиллактата методом газовой хроматографии на Shimadzu GC-2010 Plus, в результате которой время анализа составляет 32 мин. Для данной методики был построен градуировочный график для определения метиллактата, со среднеквадратичным отклонением 0,99.

2. Были определены наблюдаемые константы скорости реакции этерификации молочной кислоты избытком метанола с различными катализаторами, в результате чего был подобран оптимальный гетерогенный катализатор (силикагель хроматографический), не уступающий по активности классическому гомогенному катализатору серной кислоты.

3. Предложен метод непрерывного газофазного синтеза метиллактата на гетерогенном катализаторе.

4. Было показано, что предложенный метод позволяет достичь выхода метиллактата 44 %, с селективностью 84 % и с малым временем пребывания сырья в реакторе.

5. Со стороны оценки ресурсоэффективности и ресурсосбережения согласно проведенной сравнительной оценки характеристик проекта, данный проект является перспективным и инвестиционно-привлекательным. Бюджет затрат разработки равен 1,3 млн. рубля.

6. Анализ вредных и опасных факторов работы в химической лаборатории показал, что данное исследование является безопасным при соблюдении правил техники безопасности, а также не оказывает негативного воздействия на окружающую среду.

Список публикаций

1. Полетыкина Е.Я., Зиновьев А. Синтез эфиров молочной кислоты // Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XXI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 110-летию со дня рождения профессора А.Г. Стромберга, Томск, 21-24 Сентября. 2020. - Томск: ТПУ, 2020 - С.586-587.

2. Полетыкина Е.Я., Зиновьев А.Л. Исследование влияния гетерогенных катализаторов на процесс синтеза метиллактата // Материалы Международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов2021», секция «Химия», Москва, 12-23 Апреля. 2021. - М.: Издательство «Перо», 2021. - С.947.

3. Полетыкина Е.Я., Зиновьев А.Л. Сравнительный анализ активности катализатора в процессе синтеза эфиров молочной кислоты // Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XXII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л.П. Кулёва и Н.М. Кижнера, посвященной 125-летию со дня основания Томского политехнического университета. В 2 томах. Том 1, Томск, 17-20 Мая. 2021. - Томск: ТПУ, 2021 - С.228-229.

4. Полетыкина Е.Я., Зиновьев А.Л. Разработка нового подхода к синтезу эфиров молочной кислоты на примере метиллактата // Химия и химическая технология в XXI веке: XXIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых – В 2 томах. Том 1 (г. Томск, 16–19 мая 2022 г.). / Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2022 – 472 с. – С. 272.

Список использованных источников

1. Sheldon, R.A. Green solvents for sustainable organic synthesis: state of the art / R.A. Sheldon. – Text : electronic // Green Chemistry. – 2005. – Т. 7. – №. 5. – P. 267-278. – DOI: 10.1039/B418069K.

2. Diaz-Alvarez, A.E. Glycerol and derived solvents: new sustainable reaction media for organic synthesis / A.E. Diaz-Álvarez, J. Francos, B. Lastra-Barreira [etc.]. – Text : electronic // Chemical Communications. – 2011. – Т. 47. – №. 22. – P. 6208-6227. – DOI: 10.1039/C1CC10620A.

3. Winterton, N. The green solvent: a critical perspective / N. Winterton. – Text : electronic // Clean technologies and environmental policy. – 2021. – Т. 23. – №. 9. – P. 2499-2522. – DOI: 10.1007/s10098-021-02188-8.

4. Byrne, F.P. Tools and techniques for solvent selection: green solvent selection guides/ F.P. Byrne, S. Jin, G. Paggiola [etc.]. – Text : electronic // Sustainable Chemical Processes. – 2016. – Т. 4. – №. 1. – P. 1-24. – DOI: 10.1186/s40508-016-0051-z.

5. Hossaini, R. Efficiency of short-lived halogens at influencing climate through depletion of stratospheric ozone / R. Hossaini, M. Chipperfield, S. Montzka [etc.]. – Text : electronic // Nature Geoscience. – 2015. – Т. 8. – №. 3. – С. 186-190. – DOI: 10.1038/ngeo2363.

6. Doble, M. Green Chemistry and Engineering / M. Doble, K. Rollins, A. Kumar. – №1. – Publisher: Academic Press, 2007. – 326 p.

7. Aparicio, S. The green solvent ethyl lactate: an experimental and theoretical characterization/ S. Aparicio, R. Alcalde. – Text : electronic // Green Chemistry. – 2009. – Т. 11. – №. 1. – P. 65-78. – DOI: 10.1039/B811909K.

8. Noyori, R. Supercritical fluids: introduction/ R. Noyori. – Text : electronic // Chemical Reviews. – 1999. – Т. 99. – №. 2. – P. 353-354. – DOI: 10.1021/cr980085a.

9. Knez, Z. Industrial applications of supercritical fluids: A review / Z. Knez, E. Markocic, M. Leitgeb [etc.]. – Text : electronic // Energy. – 2014. – Т. 77. – P. 235-243. – DOI: 10.1016/j.energy.2014.07.044.

10. Angell, C.A. Ionic liquids: past, present and future / C.A. Angell, Y. Ansari, Z. Zhao. – Text : electronic // Faraday discussions. – 2012. – T. 154. – P. 9-27. – DOI: 10.1039/c1fd00112d.

11. Lactic Acid Ester Market. – Делавэр. – URL: https://www.transparencymarketresearch.com/lactic-acid-ester-market.html (дата обращения: 01.03.2022). – Текст: электронный.

12. n-Butyl lactate. – URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/source/hsdb/7905#section=NIOSH-Recommendations-(Complete). (дата обращения: 01.03.2022). – Текст: электронный.

13. Lamberti, F.M. Kinetics of Alkyl Lactate Formation from the Alcoholysis of Poly (Lactic Acid) / M.F. Lamberti, L.A. Roman-Ramirez, P. Mckeown [etc.]. – Text : electronic // Processes. – 2020. – T. 8. – №. 6. – P. 738. – DOI: 10.3390/pr8060738.

14. Pereira, C.S.M. Ethyl lactate as a solvent: Properties, applications and production processes–a review/ C.S.M. Pereira, V.M.T.M. Silva, A. E. Rodrigues. – Text : electronic // Green Chemistry. – 2011. – T. 13. – №. 10. – P. 2658-2671. – DOI: 10.1039/C1GC15523G.

15. Clary, J.J. Safety assessment of lactate esters / J.J.Clary, V.J. Feron, J.A. Van Velthuijsen – Text : electronic // Regulatory toxicology and pharmacology. – 1998. – T. 27. – №. 2. – P. 88-97. – DOI: 10.1006/rtph.1997.1175.

16. Figoli, A. Towards non-toxic solvents for membrane preparation: a review / A. Figoli, T. Marino, S. Simone. – Text : electronic // Green Chemistry. – 2014. – T. 16. – №. 9. – P. 4034-4059. – DOI: 10.1039/c4gc00613e.

17. Corbion : оффициальный сайт. – URL: http://www.corbion.com/biochemicals/chemicals/applications/electronics. (дата обращения: 01.03.2022). – Текст: электронный.

18. Dub, P.A. The role of the metal-bound N–H functionality in Noyori-type molecular catalysts / P.A. Dub, J. C. Gordon. – Text : electronic // Nature

Reviews Chemistry. – 2018. – Т. 2. – №. 12. – P. 396-408. – DOI: 10.1038/s41570-018-0049-z.

19. Medina-Gonzalez, Y. Towards green membranes: preparation of cellulose acetate ultrafiltration membranes using methyl lactate as a biosolvent / Y. Medina-Gonzalez, P. Aimar, J.-F. Lahitte, J.-C. Remigy. – Text : electronic // International Journal of Sustainable Engineering. – 2011. – Т. 4. – №. 01. – P. 75-83. – DOI: 10.1080/19397038.2010.497230.

20. Kumar, S. Green synthesis of metal–organic frameworks: A state-of-the-art review of potential environmental and medical applications / S. Kumar, S. Jain, M. Nehra [etc.]. – Text : electronic // Coordination Chemistry Reviews. – 2020. – Т. 420. – P. 213407. – DOI: 10.1016/j.ccr.2020.213407.

21. Bae, D.Y. Early transition metal complexes with triphenolamine ligands: Synthesis and applications / D.Y. Bae, Y. Kim, J.Cha, E. Lee. – Text : electronic // Coordination Chemistry Reviews. – 2020. – Т. 419. – P. 213402. – DOI: 10.1016/j.ccr.2020.213402.

22. Ma, H. Catalytic Production of Methyl Lactate from Fructose-Based Carbohydrates Using Yttrium Modified ZSM-5 Zeolite / H. Ma, Y. Wen, C. Yu [etc.]. – Text : electronic // ChemistrySelect. – 2021. – Т. 6. – №. 39. – P. 10674-10681. – DOI: 10.1002/slct.202102418.

23. Lyu, X. New insights into the NiO catalytic mechanism on the conversion of fructose to methyl lactate / X. Lyu, L. Xu, J. Wang, X. Lu. – Text : electronic // Catalysis Communications. – 2019. – Т. 119. – P. 46-50. – DOI: 10.1016/j.catcom.2018.10.015.

24. Yang, L. Mechanistic insights into the production of methyl lactate by catalytic conversion of carbohydrates on mesoporous Zr-SBA-15 / L. Yang, X. Yang, E. Tian [etc.]. – Text : electronic // Journal of catalysis. – 2016. – Т. 333. – P. 207-216. – DOI: 10.1016/j.jcat.2015.10.013.

25. Mäki-Arvela, P. Heterogeneous Catalytic Synthesis of Methyl Lactate and Lactic Acid from Sugars and Their Derivatives / P. Mäki-Arvela, A. Aho, D.Y.

Murzin. – Text : electronic // ChemSusChem. – 2020. – Т. 13. – №. 18. – P. 4833. – DOI: 10.1002/cssc.202001223.

26. Taarning, E. Oxidation of glycerol and propanediols in methanol over heterogeneous gold catalysts / E. Taarning, A.T. Madsen , J.M. Marchetti [etc.]. – Text : electronic // Green Chemistry. – 2008. – Т. 10. – №. 4. – P. 408-414. – DOI: 10.1039/B714292G.

27. Bykowski, D. Conversion of lactides into ethyl lactates and value-added products / D. Bykowski, A. Grala, P. Sobota. – Text : electronic // Tetrahedron Letters. – 2014. – Т. 55. – №. 38. – P. 5286-5289. – DOI: 10.1016/j.tetlet.2014.07.103.

28. Petrus, R. Use of lithium aryloxides as promoters for preparation of α-hydroxy acid esters / R. Petrus, P. Fałat, P. Sobota. – Text : electronic // Dalton Transactions. – 2020. – Т. 49. – №. 3. – P. 866-876. – DOI: 10.1039/C9DT03631H.

29. Román-Ramírez, L.A. Chemical degradation of end-of-life poly (lactic acid) into methyl lactate by a Zn (II) complex / L.A. Román-Ramírez, P. McKeown, C. Shah [etc.]. – Text : electronic // Industrial & engineering chemistry research. – 2020. – Т. 59. – №. 24. – P. 11149-11156. – DOI: 10.1021/acs.iecr.0c01122.

30. Патент № US2006/14977 США. Process for production of organic: № 10/894,307 : заявл. 19.07.2004 : опубл. 19.01.2006 / Miller D.J., Asthana N. [etc.]. ; заявитель Michigan State University.

31. Патент № US4532328 США. Process for making optically active esters of phenoxyphenoxypropionic acids or pyridyloxyphenoxypropionic acids: № US06/513,575 : заявл.14.07.1983 : опубл. 30.07.1985 / Kleschick W.A. ; заявитель Dow Chemical Co.

32. Liang, Y. $Fe_2(SO_4)_3 \cdot 4H_2O$/concentrated H_2SO_4: an efficient catalyst for esterification / Y. Liang, Q. Xu, X. Wu [etc.]. – Text : electronic // Journal of Chemical Research. – 2004. – Т. 2004. – №. 3. – P. 226-227. – DOI: 10.3184/0308234041640708.

33. Niaounakis, M. Recycling of biopolymers–the patent perspective / M. Niaounakis. – Text : electronic // European Polymer Journal. – 2019. – T. 114. – P. 464-475. – DOI: 10.1016/j.eurpolymj.2019.02.027.

34. Патент № US20110160480A1 США. Continuous Process for Obtaining a Lactic Ester: № US13/056 : заявл. 30.07.2008 : опубл. 30.06.2011 / Hottois D., Bruneau A., Bogaert J., Coszach P. ; заявитель Galactic SA.

35. Masaki, Y. Mild esterification and transesterification of carboxylic acids catalyzed by tetracyanoethylene and dicyanoketene dimethyl acetal / Y. Masaki, N. Tanaka, T. Miura. – Text : electronic // Chemistry letters. – 1997. – T. 26. – №. 1. – P. 55-56. – DOI: 10.1246/cl.1997.55.

36. Gao, C. Biotechnological routes based on lactic acid production from biomass / C. Gao, C. Ma, P. Xu. – Text : electronic // Biotechnology advances. – 2011. – T. 29. – №. 6. – P. 930-939. – DOI: 10.1016/j.biotechadv.2011.07.022.

37. Pirozzi, D. Lipase-Catalyzed Transformations for the Synthesis of Butyl Lactate: A Comparison between Esterification and Transesterification / D. Pirozzi, Jr G. Greco. – Text : electronic //Biotechnology progress. – 2006. – T. 22. – №. 2. – P. 444-448. – DOI: 10.1021/bp0503033.

38. Hasegawa, S. Enzymatic esterification of lactic acid, utilizing the basicity of particular polar organic solvents to suppress the acidity of lactic acid / S. Hasegawa, M. Azuma, K. Takahashi. – Text : electronic // Journal of Chemical Technology & Biotechnology: International Research in Process, Environmental & Clean Technology. – 2008. – T. 83. – №. 11. – P. 1503-1510. – DOI: 10.1002/jctb.1935.

39. Gao, C. Biotechnological routes based on lactic acid production from biomass / C. Gao, C. Ma, P. Xu. – Text : electronic // Biotechnology advances. – 2011. – T. 29. – №. 6. – P. 930-939. – DOI: 10.1016/j.biotechadv.2011.07.022.

40. Патент № US20050096481A1 США. Method for producing a hydroxyacid esters: № US10/48 : заявл. 05.10.2001 : опубл. 05.05.2005 / Hildebrandt R., Vollmer H., Alscher A., Holtmann W.

41. Aqar, D.Y. Integrated batch reactive distillation column configurations for optimal synthesis of methyl lactate / D.Y. Aqar, N. Rahmanian, I.M. Mujtaba. – Text : electronic // Chemical Engineering and Processing: Process Intensification. – 2016. – T. 108. – P. 197-211. – DOI: 10.1016/j.cep.2016.07.009.

42. Патент № WO2007010548A1 Франция. Process for preparing l- (+) - lactic acid: № PCT/IN2005/000455 : заявл. 20.07.2005 : опубл. 30.12.2005 / Barve P.P., Kulkarni B.D., Nene S.N. [etc.].

43. Большова, Т.А. Основы аналитической химии. В 2 т. Т. 1: учеб. для студ. учреждений высш. проф. Образования / Т.А. Большова [и др.]. – М.: Издательский центр «Академия», 2012. – 384 с. – ISBN 978-5-7695-9124-2.

44. Yarkova, A.V. Vacuum effect on the lactide yield / A.V. Yarkova, V.T. Novikov, V.N. Glotova [etc.]. – Text : electronic // Procedia Chemistry. – 2015. – T. 15. – P. 301-307. – DOI: 10.1016/j.proche.2015.10.048.

45. Wasson, J.R. Electron spin resonance / J.R. Wasson, P.J. Corvan. – Text : electronic // Analytical chemistry. – 1978. – T. 50. – №. 5. – P. 92R-100R. – DOI: 10.1021/ac50028a012.

46. Гаврикова, Н.А. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебное-методическое пособие / Н.А. Гаврикова, Л.Р. Тухватулина, И.Г. Видяев [и др.]. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2012. – 73 с.

47. ТР ТС 019/2011. О безопасности средств индивидуальной защиты (с изменениями на 28 мая 2019 года): дата введения 2011-12-09. – URL: https://docs.cntd.ru/document/902320567 (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

48. СанПиН 1.2.3685-21. Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания: дата введения 2021-01-28. – URL: https://docs.cntd.ru/document/573500115 (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

49. ГОСТ 12.1.029-80. Система стандартов безопасности труда. Средства и методы защиты от шума. Классификация: дата введения 1981-07-01. – URL: https://docs.cntd.ru/document/5200292 (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

50. СП 52.13330.2016. Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95: дата введения 2017-05-08. – URL: https://docs.cntd.ru/document/456054197 (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

51. ГОСТ 12.1.007-76. Система стандартов безопасности труда. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности: дата введения 1977-01-01. – URL: https://docs.cntd.ru/document/5200233 (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

52. ГОСТ 12.2.061-81. Система стандартов безопасности труда. Оборудование производственное. Общие требования безопасности к рабочим местам: дата введения 1982-07-01. – URL: https://docs.cntd.ru/document/5200228 (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

53. ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Пределы допустимые уровни напряжений прикосновения и токов: дата введения 1983-07-01. – URL: https://docs.cntd.ru/document/5200313 (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

54. Безопасность жизнедеятельности: практикум / Ю.В. Бородин, М.В. Василевский, Ю.М. Федорчук [и др.]. – Томск: ТПУ, 2009. – 101 с.

55. СП 51.13330.2011. Защита от шума. Актуализированная редакция СНиП 23-03-2003: дата введения 2011-05-20. – URL: https://docs.cntd.ru/document/1200084097 (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

56. ГОСТ 12.1.019-2017. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты: дата введения 2019-01-01. – URL: https://docs.cntd.ru/document/1200161238 (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

57. Российская Федерация. Законы. Технический регламент о требованиях пожарной безопасности (с изменениями на 30 апреля 2021 года): Федеральный закон № 123-ФЗ : [принят Государственной думой 4 июля 2008 года]. – Москва, 2013. – 99 с.

58. Утилизация люминесцентных ламп: куда следует сдавать отработавшие приборы: сайт. – Москва, 2016-2022. URL: https://sovet-ingenera.com/elektrika/svetylnik/utilizaciya-lyuminescentnyx-lamp.html (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

59. ГОСТ Р 22.7.02-2021. Безопасность в чрезвычайных ситуациях. Регламенты по организации информирования населения о чрезвычайных ситуациях: дата введения 2021-06-01. – URL: https://docs.cntd.ru/document/1200177748 (дата обращения: 29.04.2022). – Текст: электронный.

Приложение А

Раздел 1
Литературный обзор

Студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
9ДМ01	Полетыкина Екатерина Ярославовна		

Консультант ИШХБМТ:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ИШХБМТ	Новиков В.Т.	к.х.н.		

Консультант – лингвист отделения (НОЦ) школы иностранных языков :

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОИЯ	Зяблова Н.Н.	к.ф.н.		

1. Catalysts for the esterification of lactic acid with methanol

As stated earlier, the main method for the synthesis of methyl lactate in industry is the esterification of lactic acid with methyl alcohol, strong mineral acids such as sulfuric acid, hydrochloric acid and other mineral acids serve as key catalysts.

The yield of methyl lactate is 82 % when sulfuric or boric acids are used as catalysts [30]. The reaction is carried out in coil-type reactors at a molar ratio of methanol:lactic acid 5:1, a temperature of 220 °C and a pressure at the coil inlet of 21 atm, a pressure above atmospheric is used to maintain methanol in the liquid phase. The residence time of the mixture in the coil was 40 minutes.

Sulfuric acid is also used to obtain optically pure methyl lactate, the yield of methyl lactate [31] is not high and amounts to 34 % in this case. Optically pure methyl lactate is obtained at a reflux temperature for 25 hours at a molar ratio of L-(+)-lactic acid:methanol equal to 1:4, sulfuric acid catalyst 0,018 mol. Sodium bicarbonate was used to neutralize sulfuric acid.

The yield of methyl lactate can be increased up to 97 % [32] using a mixed catalyst $Fe_2(SO_4)_3 \cdot 4H_2O$/concentrated H_2SO_4 (molar ratio 1:1). This catalytic complex has an efficient catalytic capacity and gives a high yield of esterification of lactic acid with methanol in a short reaction time of 3 hours.

Despite the high yields of methyl lactate, the use of homogeneous acid catalysts has a number of disadvantages, such as equipment corrosion, side reactions, an additional stage of neutralization of the target product, which results in the formation of wastewater that requires special measures for their disposal [33].

The problem of equipment corrosion and wastewater discharge is solved using heterogeneous catalysts such as Lewis acids, metal-organic framework structures, silica gels, etc.

The use of acidic ion-exchange resins (AMBERLYST-15) [30] as a catalyst in a distillation column makes it possible to obtain methyl lactate with a yield of 87 % at a molar ratio of methanol to lactic acid of 3,29.

Autocatalysis is possible with an excess of lactic acid [34], this is achieved by using an excess of methanol as an extracting agent, which is used to permanently

remove substances that form an azeotropic mixture with it. As a result, esterification is made possible by continuous extraction of the gas phase while limiting carryover of acidity, equivalent to methanol:lactic acid 3,6:1. Etherification takes place at 130 °C, under reduced pressure of 27,5 kPa for 24 hours, the yield of methyl lactate is 99 %.

The esterification can be carried out under almost neutral and mild conditions [35] using π-acid tetracyanoethylene (TCNE) and its derivative dicyanoketene dimethyl acetal (DCCKDMA), which catalyze the esterification of lauric acid with various types of alcohols. This method has been successfully applied to the methyl esterification of various carboxylic acids. The esterification of lactic acid with methanol using 20 mol% TCNE [35] at room temperature and 60°C for 48 hours gave a yield of methyl lactate of 88 % and 87 %, respectively.

Earlier it was written about the disadvantages of using homogeneous catalysts, in addition to technical problems, there is the problem of self-polymerization of lactic acid [36] due to the interaction of hydroxyl and carboxyl groups, which act as acyl donors and as nucleophiles, to solve this problem, harsh conditions and heterogeneous catalysts are required, which have already been discussed above.

However, enzymatic catalysis can be used for greener conditions. Enzymatic [36] proceeds under mild conditions, has a high activity and a low level of environmental pollution.

Lipases catalyze the hydrolysis of triacylglycerols and other esters of carboxylic acids in aqueous solutions [37]. In the absence of water, they catalyze the condensation of organic acids and alcohols to form esters [37]. Lipase-catalyzed esterification of lactic acid with butanol [37], ethanol [38], etc. [39]. However, there are no works on obtaining methyl lactate by this method. It is worth noting that these esterification reactions are carried out in a non-aqueous system. Due to the high polarity of lactic acid, it is not miscible with hydrophobic organic solvents that are commonly used for non-aqueous enzymatic reactions [38]. For the reasons described above, enzymatic production of methyl lactate by lipase catalysis is not possible.

The synthesis of methyl lactate with the use of heterogeneous catalysts is extremely poorly described in the literature, for this reason, the study of this type of catalysis is relevant and requires more detailed study.

2. Technological approaches to the esterification of lactic acid with methanol

Basically, when using homogeneous catalysts (various strong mineral acids), mixing reactors are used [34], which are containers of various volumes, equipped with a drive with a stirrer. This design type is most often used in a batch process. According to [34], lactic acid is fed into the reactor, where it is heated to 100 °C at a reduced pressure of 275 mbar, then anhydrous alcohol is continuously fed, esterification occurs at 130 °C and a pressure of 275 mbar. The reaction mass and reaction products are separated in a distillation column, and the reaction mass requires neutralization.

This process is complicated due to additional stages of purification and separation of products, the reactor is also subject to corrosion due to homogeneous catalysts - acids, these disadvantages can be solved by switching to heterogeneous catalysts, this process can be attributed to "green" catalysis, due to possibility of catalyst regeneration.

When using heterogeneous catalysts in mixing reactors, problems arise with low product yields, this is due to a decrease in the probability of collision of reacting molecules with the reaction centers of the catalyst.

To increase the probability of collision of reacting molecules, it is possible to use the transition to the gas phase. The transition to the gas-liquid system is carried out in distillation columns [40]. Thus, the production of methyl lactate with a purity of 85% [41] in batch distillation columns is reported, however, in this process there is a need to increase the contact area of the gas-liquid system [41], since when using lactic acid and methanol, methanol has a lower boiling point than the products of the reaction, and it leaves the system faster than it has time to react. The solution to the problem is to recycle methanol, but in this case, there are no significant improvements.

In order to increase the selectivity of methyl lactate formation, stabilizers [42] 4-methoxyphenol and hydroquinone are added, which prevent side reactions of lactic acid (polymerization, etc.). So in this way, the selectivity of methyl lactate reaches 94 %, and the purity of 99 % in a continuous countercurrent column with three-phase esterification.

The existing methods have a number of disadvantages described above, the development of new technological approaches and the study of new catalytic systems for the synthesis of lactic acid esters is an urgent task, and the reaction products themselves are valuable chemical substances.

3. Theoretical foundations of physicochemical methods of analysis

3.1 Gas Chromatography (GC)

Chromatography is a physicochemical method for the distribution of components between the stationary and mobile phases. A stationary phase is a solid substance (sorbent) or a liquid film deposited on a solid substance. In turn, the mobile phase is a liquid or gas flowing through the stationary phase [43]. Chromatography refers to dynamic methods, since the sorption-desorption of the separated components is performed repeatedly.

There are many classifications of chromatography, but the main one can be the classification according to the state of aggregation of phases, there are gas, liquid and supercritical fluid chromatography.

Gas chromatography (GC) is a method for the separation of volatile, thermostable compounds [43]. The GC instrument is a gas chromatograph.

The essence of the method is that the analyzed mixture, entering the evaporator, is transferred to a vapor state, where it is mixed with a carrier gas flow (helium, nitrogen, argon, etc.), thus forming a mobile phase. Next, the mobile phase moves into the chromatographic column filled with the stationary phase.

The movement of the analyzed mixture through the column occurs due to the carrier gas. As a result, the separated components of the analyzed mixture repeatedly perform sorption and desorption, while the dynamic equilibrium of the separated

substances between the two phases is maintained in the system. These processes are performed until the pairs of substances to be separated with the carrier gas leave the chromatographic column.

Next, the mobile phase from the chromatographic column enters the detector of the chromatograph. The detector converts the change in the properties (chemical, physical, physico-chemical) of the gas flow into an electrical signal. When the signal is amplified, the chromatograph recorder captures these changes in the form of a chromatogram.

It is worth noting the following structural features of the chromatograph. There are two types of chromatographic column: packed and capillary. Also, the temperature of the evaporator and column must be above the boiling point of the analyte. Detectors in gas chromatographs are non-selective - the signal does not depend on the chemical nature of the substances being separated (katharometers, FID, electrochemical) and selective - the signal depends on the chemical nature of the substances being separated (thermoionic, electron capture, etc.).

Gas chromatography can be analytical, preparative and industrial.

In this work, analytical gas chromatography will be used for the quantitative and qualitative analysis of methyl lactate synthesis products.

3.2 Nuclear magnetic resonance (NMR)

NMR refers to spectroscopic methods for studying chemical objects, using the phenomenon of nuclear magnetic resonance. The most important for chemistry and practical applications are proton magnetic resonance spectroscopy (^{1}H NMR spectroscopy), as well as carbon-13 NMR spectroscopy (^{13}C NMR spectroscopy), fluorine-19 (^{19}F NMR spectroscopy), phosphorus-31 (^{31}P NMR -spectroscopy). Resonant absorption of electromagnetic waves by atomic nuclei, which occurs when the orientation of the vectors of their own moments of momentum (spins) changes. Nuclei with a spin quantum number other than 0 can be active in NMR.

NMR occurs in samples placed in a strong constant magnetic field, while simultaneously exposing them to a weak alternating electromagnetic field of the radio

frequency range (the lines of force of the alternating field must be perpendicular to the lines of force of the constant field).

In this work, proton magnetic resonance will be used for the quantitative and qualitative analysis of methyl lactate synthesis products.

Приложение Б

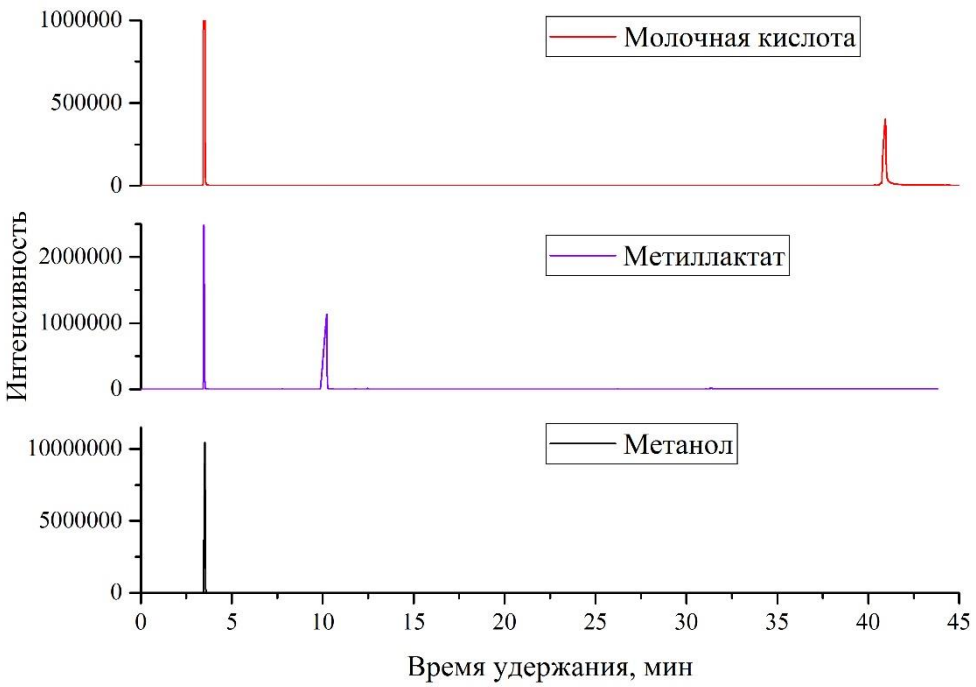


Рисунок 6 – Хроматограммы при изотермическом режиме хроматографирования

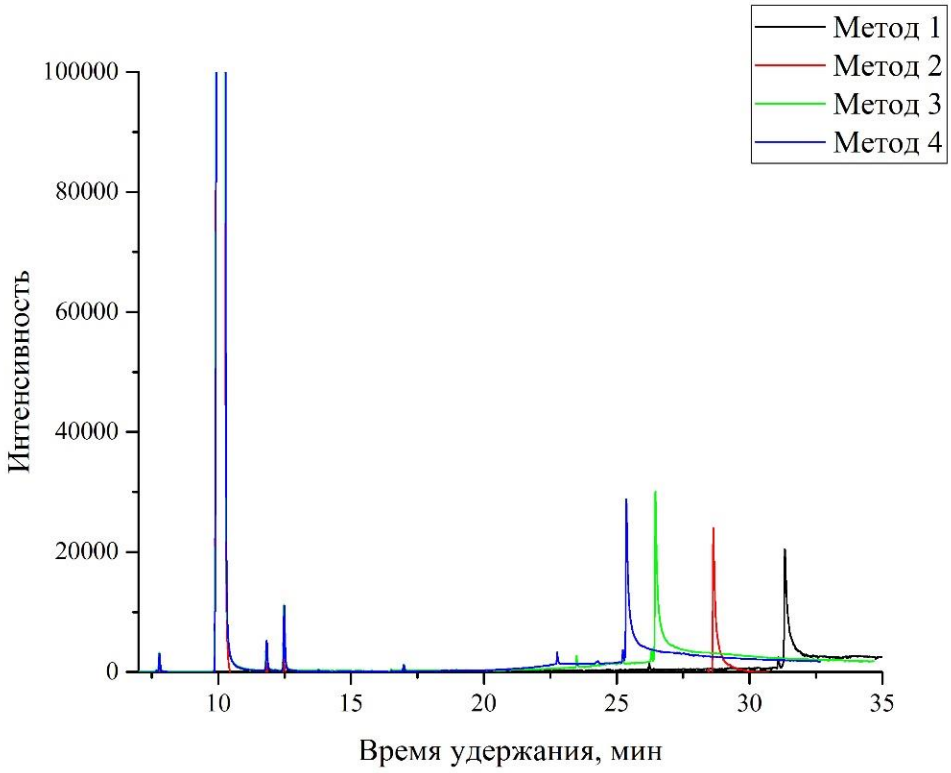


Рисунок 7 – Хроматограмма четырех градиентных температурных режимов

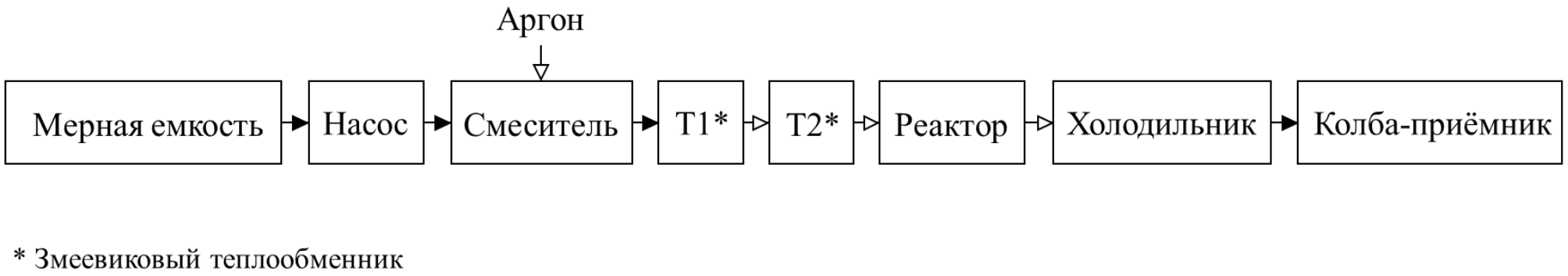
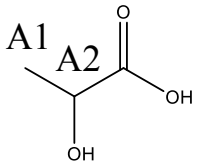
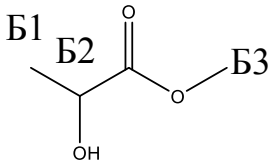


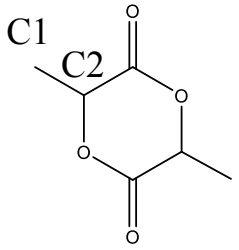
Рисунок 8 – Блок-схема непрерывного газофазного метода синтеза метиллактата



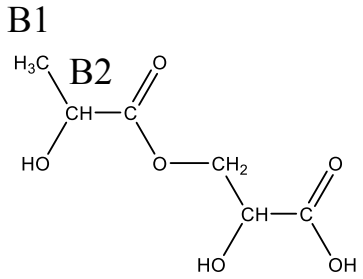
Молочная кислота



Метиллактат



Лактид



Димер молочной кислоты

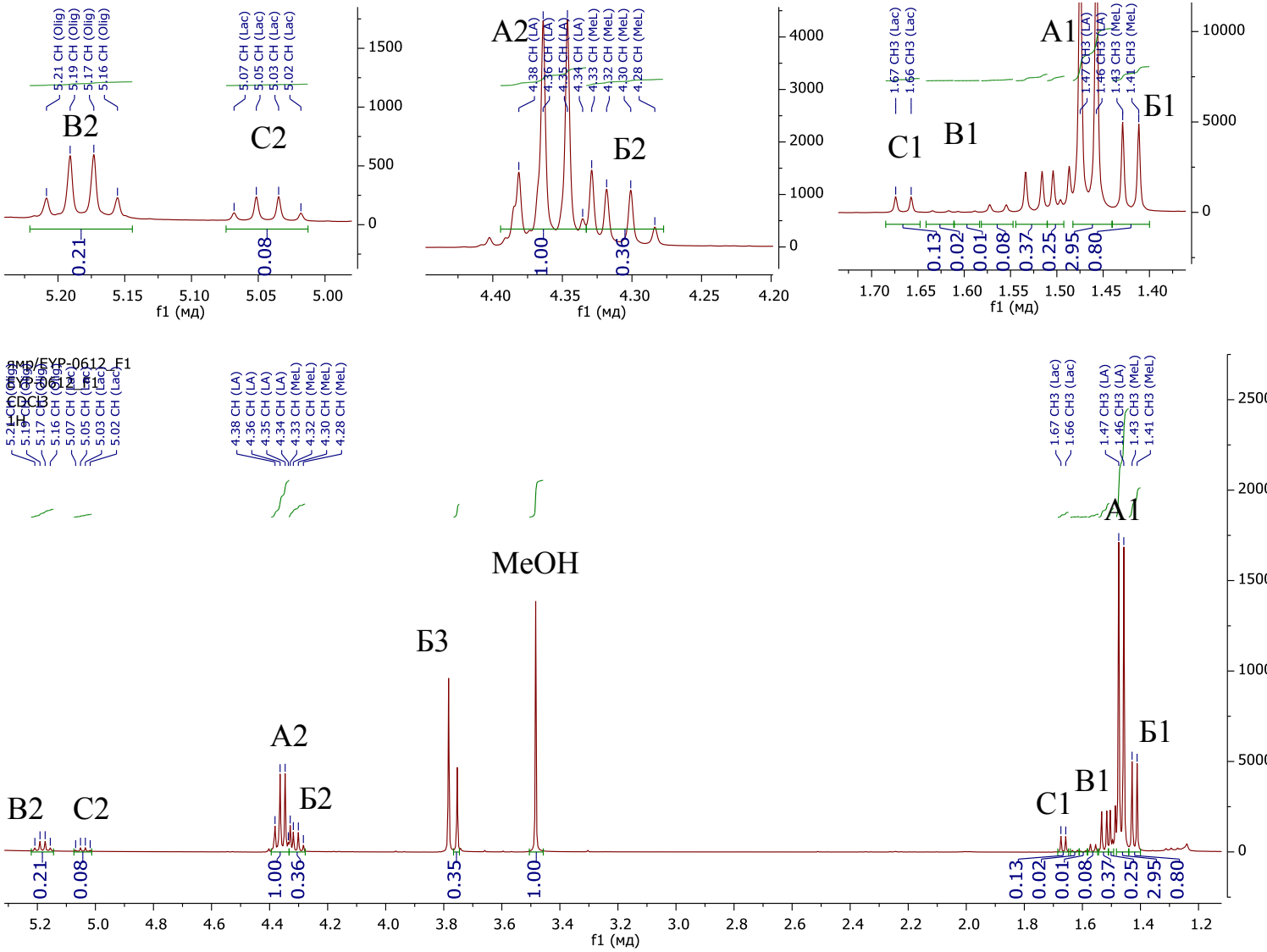


Рисунок 9 –Характеристический ^{1}H ЯМР спектр