

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

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Новые подходы к синтезу азобензолов

УДК 547.556.31

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д81	Балаева Анжелика Аркадьевна		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой – руководитель НОЦ Н.М. Кижнера (на правах кафедры)	Краснокутская Е.А.	д.х.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОСГН	Гасанов М.А.	д.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель ООД	Черемискина М.С.	-		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП

по направлению 19.03.01 Биотехнология

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

ОПК(У)-6	Владение основными методами защиты производственного персонала и населения от возможных последствий аварий, катастроф, стихийных бедствий
Код компетенции	Наименование компетенции
Дополнительно сформированные общепрофессиональные компетенции университета	
ДОПК(У)-1	Способность разрабатывать технологическую и конструкторскую документацию
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способность осуществлять технологический процесс в соответствии с регламентом и использовать технические средства для измерения основных параметров биотехнологических процессов, свойств сырья и продукции
ПК(У)-2	Способность к реализации и управлению биотехнологическими процессами
ПК(У)-3	Готовность оценивать технические средства и технологии с учетом экологических последствий их применения
ПК(У)-4	Способность обеспечивать выполнение правил техники безопасности, производственной санитарии, пожарной безопасности и охраны труда
ПК(У)-8	Способность работать с научно-технической информацией, использовать российский и международный опыт в профессиональной деятельности
ПК(У)-9	Владение основными методами и приемами проведения экспериментальных исследований в своей профессиональной области; способность проводить стандартные и сертификационные испытания сырья, готовой продукции и технологических процессов
ПК(У)-10	Владение планированием эксперимента, обработки и представления полученных результатов
ПК(У)-11	Готовность использовать современные информационные технологии в своей профессиональной области, в том числе базы данных и пакеты прикладных программ

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

Инженерная школа новых производственных технологий
 Направление подготовки 19.03.01 Биотехнология
 Научно-образовательный центр Н.М. Кижнера

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 19.03.01 Биотехнология
 _____ Лесина Ю.А.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

бакалаврской работы

Студенту:

Группа	ФИО
4Д81	Балаевой Анжелике Аркадьевне

Тема работы:

Новые подходы к синтезу азобензолов	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	02.02.2022 г № 33-32/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе	Новый класс ароматических солей диазония – арилдиазоний сульфонаты (трифлаты, тозилаты). Синтез азокрасителей на основе натриевой соли 2-гидрокси-нафталин-6-сульфокислоты. Азокрасители гидроксинафталиновой и гидроксихинолиновой структуры широко используются в качестве красителей и хемосенсоров.
---------------------------------	---

Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	<ul style="list-style-type: none"> • Обзор литературы • Объекты и методы исследования • Описание экспериментальной части • Результаты и обсуждение проведенного исследования • Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение • Социальная ответственность • Выводы
Перечень графического материала	-
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Гасанов М.А., профессор ОСГН
Социальная ответственность	Черемискина М.С., старший преподаватель ООД

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	24.01.2022
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой – руководитель НОЦ Н.М. Кижнера (на правах кафедры)	Краснокутская Е.А.	д.х.н.		24.01.2022

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д81	Балаева Анжелика Аркадьевна		24.01.2022

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
4Д81	Балаевой Анжелике Аркадьевне

Школа	Инженерная школа новых производственных технологий	Отделение школы (НОЦ)	Научно-образовательный центр Н.М.Кижнера
Уровень образования	Биотехнология	Направление/специальность	19.03.01 Биотехнология

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:	
1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Стоимость сырья, материалов, комплектующих изделий и покупных полуфабрикатов, спецоборудования. Бюджет проекта- не более 306 тыс. руб., в том числе затраты на оплату труда (не более 161 тыс.руб.), общей стоимости оборудования(не более 32 тыс. руб.), и материалов(затраты не более 71 тыс. руб.)
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	Расчет интегрального финансового показателя разработки (значение показателя не менее 1,0 балла из 1,5), интегрального показателя ресурсо-эффективности разработки (значение показателя не менее 4,1 балла из 5,0), интегрального показателя эффективности (значение показателя не менее 4,1 балла из 5,0), сравнительной эффективности вариантов исполнения (значение показателя не менее 1 балла)
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	Упрощенная система налогообложения, транспортнозаготовительные расходы, премиальный коэффициент, коэффициент доплат и надбавок, районный коэффициент, заработная плата по тарифной ставке.
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	Доступность исходных продуктов, простота методики, селективность процесса, экологичность, скорость и время реакции, выход и чистота полученного продукта.
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	Расчет предельных объемов расходов на НИИ
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	Расчет показателей эффективности НИИ
Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):	

1. *Оценка конкурентоспособности технических решений*
2. *Матрица SWOT*
3. *Альтернативы проведения НИ*
4. *График проведения и бюджет НИ*
5. *Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ*

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

24.01.2022

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ОСГН	Гасанов М.А.	д.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д81	Балаева Анжелика Аркадьевна		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

Группа		ФИО	
4Д81		Балаевой Анжелике Аркадьевне	
Школа	Инженерная школа новых производственных технологий	Отделение (НОЦ)	Научно-образовательный центр Н.М. Кижнера
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	19.03.01 Биотехнология

Тема ВКР:

Новые подходы к синтезу азобензолов	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
<p>Введение</p> <ul style="list-style-type: none"> – Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения. – Описание рабочей зоны (рабочего места) при эксплуатации проектного решения 	<p>Объект исследования: одnoreакторный метод получения азобензолов через последовательное диазотирование и азосочетание в присутствии гидроксиарилсульфокислот</p> <p>Область применения: органический синтез</p> <p>Рабочая зона: лаборатория 307 второго корпуса Томского Политехнического Университета</p> <p>Размеры помещения 217,5 м²</p> <p>Количество и наименование оборудования рабочей зоны:</p> <p>Вытяжной шкаф 2 шт Холодильник 2 шт Вакуумный насос 2 шт Роторный испаритель 1 шт Сушильный шкаф 1 шт Магнитные мешалки 3 шт Плитка для нагрева 1 шт Весы лабораторные 1 шт Спектрометр ядерно-магнитного резонанса ИК-спектрометр УФ-спектрометр Аппарат измерения температуры плавления Центрифуга</p> <p>Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне:</p> <p>Синтез азобензолов, их очистка с помощью перекристаллизации, доказательство структуры хроматографическими и спектральными методами.</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при эксплуатации проектного решения :</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<p>Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018)</p> <p>ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.</p> <p>ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования</p> <p>СП 2.2. 3670-20 «Санитарно-эпидемиологические требования к условиям труда»</p>
<p>2. Производственная безопасность при эксплуатации проектного решения :</p>	<p>Вредные производственные факторы:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Недостаточная освещенность рабочей зоны;

<p>– Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Повышенный уровень шума; – Повышенная или пониженная температура воздуха в рабочей зоны; <p>Опасные производственные факторы:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Контакт с веществами, обладающими острой токсичностью по воздействию на организм(ядовитые вещества/химическая продукция/химикаты); – Поражение электрическим током, вызванным разницей электрических потенциалов. <p>Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Халат лабораторный хлопчатобумажный; – Очки защитные ; – Перчатки латексные защитные; – Вентиляция воздуха; – Респираторы; 	
<p>3. Экологическая безопасность при эксплуатации проектного решения</p>	<p>Воздействие на литосферу: утилизация бытовых отходов</p> <p>Воздействие на гидросферу: утилизация реагентов в канализационную сеть, загрязнение стоков.</p> <p>Воздействие на атмосферу: попадание летучих токсичных веществ в атмосферу</p>	
<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при эксплуатации проектного решения</p>	<p>Возможные ЧС:</p> <ul style="list-style-type: none"> – Техногенного характера: пожары, обрушение зданий, аварии на тепловых сетях в зимнее время года. – Природного характера: землетрясения, метеорологически опасные явления. – Биолого-социального и социального характера: заболевания, вызванные инфекциями, массовые беспорядки. <p>Наиболее типичная ЧС: возникновение пожара.</p>	
<p>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</p>		<p>24.01.2022</p>

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
<p>Старший преподаватель ООД</p>	<p>Черемискина Мария Сергеевна</p>	<p>-</p>		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
<p>4Д81</p>	<p>Балаева Анжелика Аркадьевна</p>		

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 105 с., 7 рис., 26 табл., 40 схем и 52 источника.

Ключевые слова: соли диазония, азокрасители, соль Шеффера, диазотирование, азосочетание.

Объектом исследования является реакция между ароматическими и гетероароматическими аминами и натриевой солью 2-гидроксинафталин-6-сульфо кислоты (соль Шеффера).

Цель работы: разработка нового метода синтеза азосоединений на основе соли 2-гидроксинафталин-6-сульфо кислоты (соли Шеффера).

В результате работы было показано, что в растворе уксусной кислоты ароматические и гетероароматические амины под действием *трет*-бутилнитрита в присутствии соли Шеффера диазотируются с образованием соответствующих солей диазония, которые сразу же вступают в реакцию азосочетания. Во всех случаях образуется мелкодисперсный окрашенный продукт, что позволяет предварительно отнести полученные азосоединения к классу дисперсных красителей, широко используемых в промышленности.

Область применения: анилинокрасочная промышленность, медицина.

Экономическая эффективность заключается в том, что все исходные материалы, использованные в процессе синтеза, в максимальной степени вошли в состав продукта реакции, что отвечает одному из принципов зеленой химии.

Оглавление

Реферат	10
Введение.....	13
1 Литературный обзор. Современное использование реакции азосочетания в синтезе практически важных веществ	15
1.1 Теоретические основы реакции азосочетания	15
1.2. Условия проведения реакции азосочетания.....	16
1.3. «Зеленые» методы синтеза азосоединений	19
1.4. Получение дисперсных азокрасителей.....	25
1.5. Синтез азосоединений - химических сенсоров детекции ионов.....	28
1.6. Синтез азосоединений макромолекулярной структуры	32
1.7. Синтез биологически активных азосоединений	34
1.8. Другие примеры синтеза ценных азокрасителей.....	37
2 Объекты и методы исследования	44
2.1 Характеристика использованных веществ	44
3 Экспериментальная часть.....	46
3.1 Получение 2-нафтол-6-сульфокислоты(3)	46
3.2 Общая методика диазотирования-азосочетания ароматических и гетероароматических аминов 2, 5, 6 в присутствии соли Шеффера	46
3.2 Диазотирование-азосочетание <i>n</i> -нитроанилина в водной среде.....	47
4 Результаты проведенного исследования	48
5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	55
5.1 Предпроектный анализ	55
5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	55
5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	56
5.1.3. Диаграмма Исикавы.....	58
5.1.4. SWOT-анализ	59

5.1.5 Оценка готовности проекта к коммерциализации	62
5.1.6 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования	64
5.2. Инициация проекта	64
5.3. Планирование управления научно-техническим проектом.	67
5.3.1. Иерархическая структура управления проектом.....	67
5.3.2. Контрольные события проекта.....	68
5.3.3.План проекта	69
5.3.4. Бюджет научного исследования.....	73
5.3.5. Реестр рисков проекта	82
5.4. Определение ресурсной(ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования.....	82
5.4.1. Оценка сравнительной эффективности исследования.....	82
6 Социальная ответственность	86
6.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.	86
6.2. Производственная безопасность	87
6.3. Экологическая безопасность.....	96
6.4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях	96
Выводы по разделу социальная ответственность.....	97
Заключение	99
Список использованных источников	100

Введение

Реакция азосочетания находит большое практическое применение, в первую очередь, для промышленного синтеза красителей. Кроме того, продукты азосочетания часто используются в качестве хемосенсоров, а также полупродуктов для получения лекарственных препаратов.

В настоящее время известен широкий ряд азосоединений, содержащих в своей структуре нафталиновый, хинолиновый остов, а также гидроксид и сульфогруппы.

В настоящей работе исследовалось поведение некоторых ароматических и гетероароматических аминов с натриевой солью 2-гидроксинафталин-6-сульфо кислоты (соль Шеффера) в присутствии *трет*-бутилнитрита в растворе уксусной кислоты. Было показано, что в описываемых условиях ароматические(гетероароматические) амины диазотируются, образующиеся соли диазония вступают в реакцию азосочетания. При этом соль Шеффера играет двойственную роль: кислоты при диазотировании аминов с образованием соли диазония и азосоставляющей в реакции азосочетания. Такой подход отвечает требованиям «Зеленой химии».

Актуальность работы: Азокрасители являются важными промышленными продуктами. В работе предлагается новый подход для получения азокрасителей нафталинового и хинолинового скелета. Синтезированные азосоединения могут рассматриваться в качестве дисперсных красителей, а также эффективных комплексонов.

Цель работы: разработка нового метода синтеза азосоединений на основе соли 2-гидроксинафталин-6-сульфо кислоты (соль Шеффера).

Объект исследования: продукты азосочетания между солью Шеффера и различными ароматическими аминами.

Предмет исследования: реакция диазотирования-азосочетания между солью Шеффера и ароматическими и гетероароматическими аминами.

Научная новизна работы: показано, что ароматические и гетероароматические амины в присутствии натриевой соли 2-гидроксинафталин-6-сульфокислоты под действием *трет*-бутилнитрита в уксусной кислоте диазотируются и далее вступают в реакцию азосочетания. Впервые проведена реакция азосочетания между солью Шеффера и *n*-нитроанилином в водной среде.

Практическая значимость результатов: показана принципиальная возможность одновременного использования соли Шеффера и в качестве кислотной составляющей при диазотировании, и азосоставляющей в реакции азосочетания. Это позволяет разработать новый метод синтеза азосоединений с высокой атомной эффективностью.

1 Литературный обзор. Современное использование реакции азосочетания в синтезе практически важных веществ

Одной из важнейших реакций солей аренидазония, не сопровождающихся выделением азота, является реакция азосочетания. Она была открыта в 1864 году Петером Гриссом. Основное значение этой реакции – синтез азосоединений, имеющих широкий спектр практического использования.

1.1 Теоретические основы реакции азосочетания

Азосочетание – получение азосоединений взаимодействием катионной формы ароматических диазосоединений с веществами (азосоставляющими), имеющими достаточно сильный нуклеофильный центр (фенолы, ароматические амины).

В результате азосочетания образуются ярко окрашенные азосоединения, в которых ароматические кольца связаны посредством азогруппы -N=N-(схема 1).

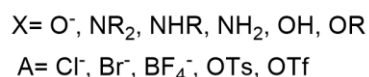
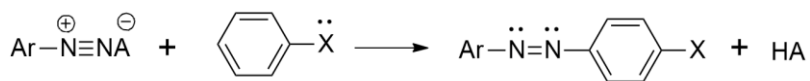


Схема 1

Механизм реакции азосочетания представляет собой классическое электрофильное ароматическое замещение S_E . Реакция протекает через стадию образования σ -комплекса (что является лимитирующей стадией) и его последующий распад (схема 2):

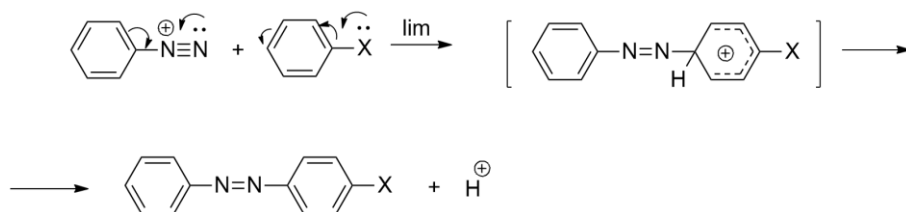


Схема 2

Катион аренидазония является электрофильным агентом, он относится к слабым электрофилам из-за сопряжения с кольцом (схема 3):

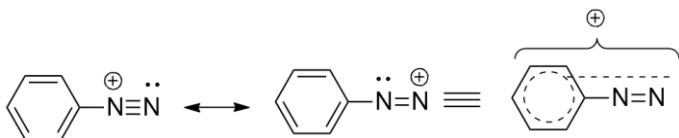


Схема 3

Диазоний катион, являясь относительно слабым электрофилом, взаимодействует преимущественно с С-нуклеофилами, содержащими сильные электродонорные заместители, например -ОН, -NH₂ [1]. Электродонорные заместители способствуют уменьшению, а электроакцепторные – увеличению электрофильных свойств катиона диазония (схема 4).

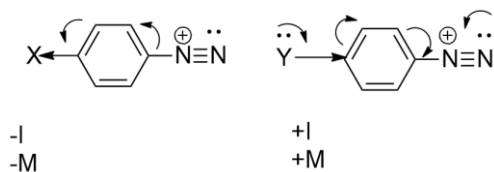


Схема 4

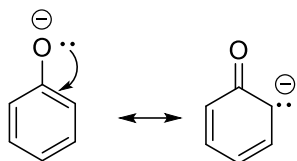
В целом же скорость реакции азосочетания определяется как электрофильными свойствами катиона диазония, так и электродонорными свойствами азокомпоненты. При этом реакционная способность азосоставляющей уменьшается в ряду заместителей: O⁻ > NR₂ > NHR > NH₂ > OH > OR.

1.2. Условия проведения реакции азосочетания

Реакция азосочетания сильно зависит от кислотности среды. Катионы диазония существуют только в кислой или слабощелочной среде, поскольку в сильнощелочном растворе они превращаются в кислоты, например, Ph-N=N-OH, а затем в диазотат-анионы, например, Ph-N=N-O⁻. В силу указанных причин

азосочетание проводят в указанных растворах [2]. При этом оптимальное значение pH зависит от свойств атакуемого соединения.

В случае фенолов реакция лучше всего протекает в слабощелочной среде, поскольку электронная плотность на бензольном кольце фенолят-иона повышена за счет +M-эффекта фенолят-аниона:



Сочетание может проходить как по O-атому, так и по C-атому. Решающее значение имеет прочность образующейся связи, вследствие чего обычно образуются продукты C-сочетания. Протон связывается присутствующим в среде основанием.

Ароматические амины как правило менее реакционноспособны в реакции азосочетания, чем фенолы. Поэтому сочетание с ними чаще всего проводят в слабокислой среде, поскольку это обеспечивает высокую концентрацию иона диазония (PhN_2^+) без заметного превращения амина в неактивный протонированный ион (схема 5).

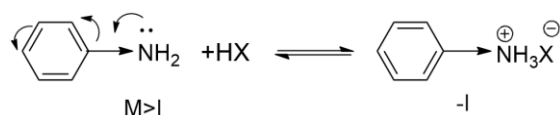


Схема 5

Предварительное диазотирование первичных ароматических аминов проводят в сильнокислой среде для уверенности в том, что исходный амин действительно превращается в катион. Это предохраняет его от сочетания с образующейся солью диазония.

В случае ароматических аминов атаковываться могут либо атомы азота, либо атомы углерода. Это сильно отличает ароматические амины от фенолов. Для первичных аминов и N-алкиламинов атака направляется в основном по атому азота с образованием триазенов (диазоаминосоединения). В случае

третичных аминов единственным продуктом является продукт С-сочетания (схема 6).

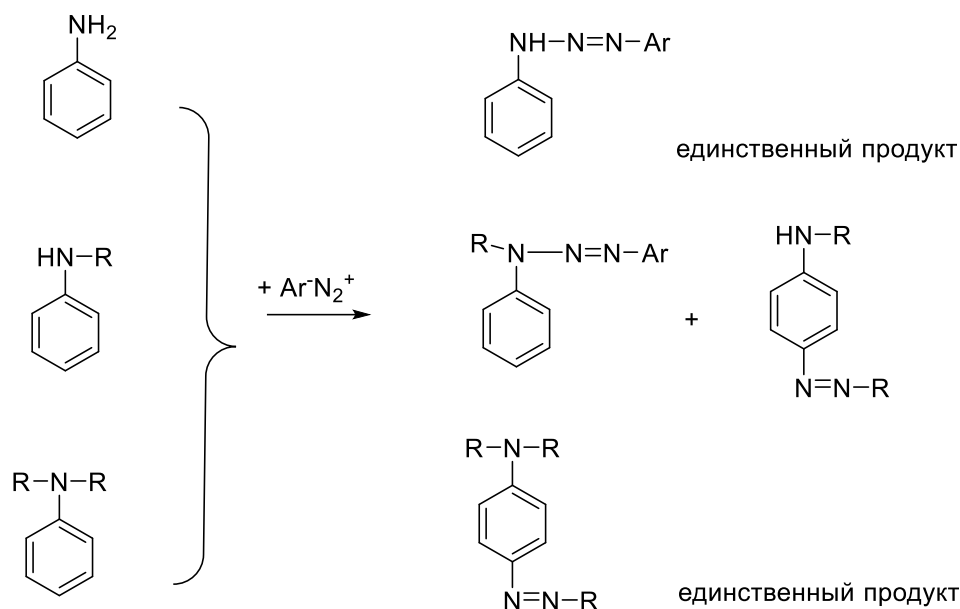


Схема 6

При этом важно отметить, что образование триазенов из первичных аминов не является препятствием для получения продуктов С-сочетания, поскольку триазены в кислых средах могут перегруппировываться, давая соответствующие аминоазосоединения. Известно, что перегруппировка протекает межмолекулярно, т.е. катион диазония освобождается в процессе реакции, после чего он может атаковать фенолы, амины и другие подходящие вещества (при добавлении их в раствор) [2].

Указанная перегруппировка лучше всего проходит в кислой среде при избытке амина, который подвергается первичному сочетанию с образованием диазоаминосоединения.

При наличии в молекуле азосоставляющей одновременно амино- и гидроксигрупп ориентирующее влияние оказывает одна из них, что определяет рН среды. Так, в слабословных средах реакцию направляет гидроксильная группа, в слабословных – аминная (схема 7).

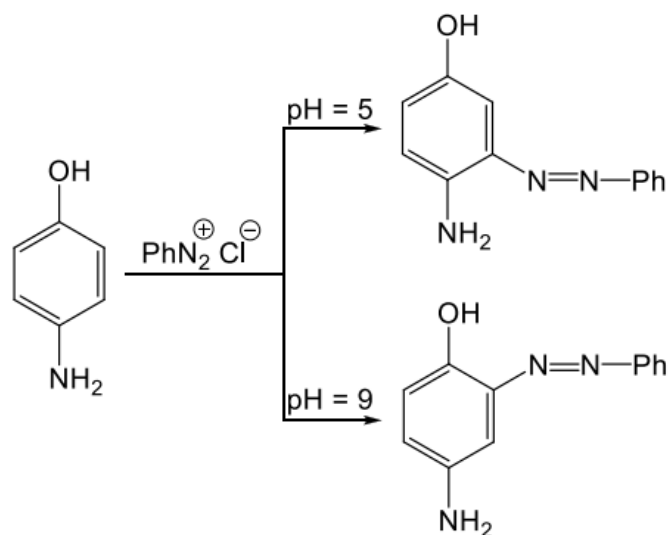


Схема 7

1.3. «Зеленые» методы синтеза азосоединений

В работе [3] описан одностадийный метод получения азосоединений в отсутствии растворителя (англ., free solvent). Для диазотирования использовалась кремниевая кислота, которая обеспечила образование устойчивой и безопасной в сухом виде соли диазония.

Соль диазония получали, растирая в ступке амин, кислоту и нитрит натрия. К растертой реакционной массе добавляли несколько капель воды и продолжали растирание в течение 10 минут до прекращения выделения азота. Далее добавляли азосоставляющие (**2a-g**) и продолжали растирать еще на протяжении 10 минут. Выход продуктов азосочетания (**3a-p**) составил 77-85 % (схема 8).

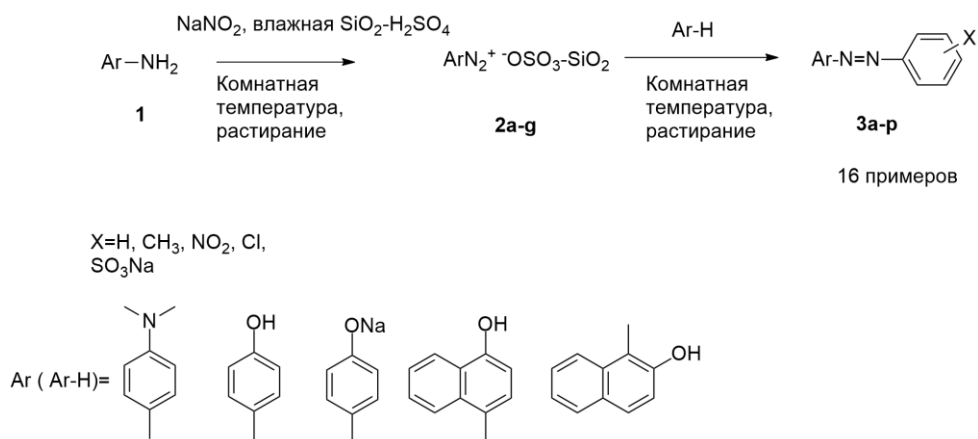


Схема 8

Другой пример диазотирования-азосочетания free solvent описан в работе [4]. Соль диазония получали также растиранием в ступке смеси анилина, предварительно полученной иодной кислоты с наночастицами кремнезема, NaNO_2 и несколькими каплями воды до выделения газа. К полученной соли диазония добавлялся 1-нафтол и далее реакционная масса перетиралась еще 10 минут (схема 9).

Установлено, что продукты азосочетания (**5 f-h**) представляют собой смесь изомеров А и Б с суммарным выходом 75-89%. Так, например, для 4-((4-метоксифенил)дiazенил)нафтален-1-ола **5d** выход составил 78 %.

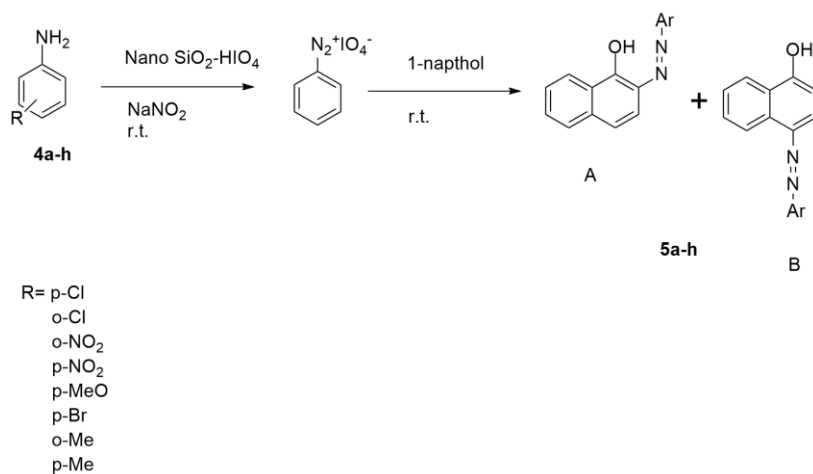


Схема 9

Одними из новых потенциально безопасных для окружающей среды растворителей являются глубокие эвтектические растворители (deep eutectic solvents, DES). Глубокий эвтектический растворитель представляет собой смесь, состоящую из донора водородной связи (HBD) и акцептора (HBA), при смешивании которых образуется жидкость с более низкой температурой плавления, чем у отдельных компонентов. Глубокие эвтектические растворители имеют несколько преимуществ по сравнению с традиционными ионными жидкостями: простота синтеза, а также доступность и относительно невысокая стоимость составляющих компонентов [5].

Авторы работы [6] демонстрируют возможность проведения реакции диазотирования и последующего использования диазониевых солей в реакции азосочетания в смеси $\text{ChCl}:\text{tartaric acid}$ (DES – глубокий эвтектический растворитель на основе хлорида холина и винной кислоты) при комнатной температуре.

2-Хлорбензол диазоний тетрафторборат был получен из амина (6) в растворе HCl при $0-5\text{ }^\circ\text{C}$ под действием NaNO_2 в присутствии NaBF_4 (схема 10).

Далее проводилось сочетание 2-хлорбензол диазоний тетрафторбората с ацетоацетанилидом (7) в среде DES ($\text{ChCl}:\text{tartaric acid}$) в течение 30 минут при комнатной температуре. Выход продукта азосочетания (8) составил 82%

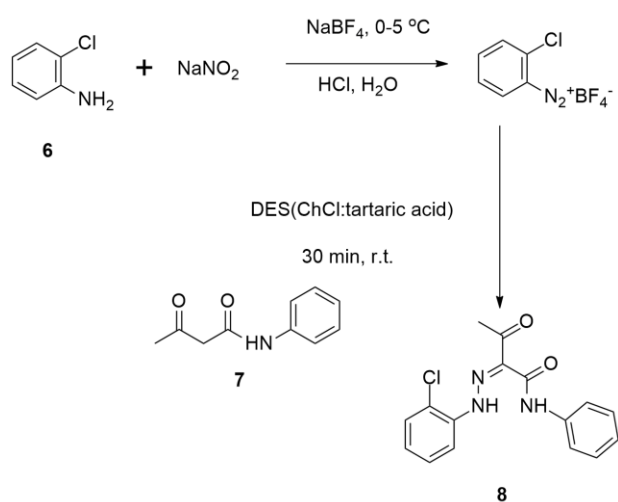


Схема 10

Примечательно, что при использовании этанола в качестве одного из компонентов для DES выходы с различными эвтектическими растворителями оказались высокими; так, для $\text{ChCl}:\text{malonic acid}$ выход продукта составил 73 % а для $\text{ChCl}:\text{oxalic acid}$ – 68 %. При использовании же воды получить продукт не удалось.

Успех азосочетания с использованием DES авторы объясняют стабилизацией образующуюся соль диазония тартрат-анионом.

Для малоновой и оксалиновой кислоты выходы уменьшаются именно по причине недостаточно размера противоиона, за счет чего происходит снижение стабильности диазониевой соли. Это было также подтверждено дальнейшими исследованиями, в которых авторы вместо DES использовали смесь винной кислоты и NaCl , показав, что получающаяся диазониевая соль сразу же разложилась.

Путем эксперимента было установлено, что смесь DES: этанол дает наилучшие результаты при соотношении 1:1.

Далее авторы предложили одностадийный метод получения азосоединений в DES через последовательное диазотирование-азосочетание (с образованием соли диазония *in situ* – схемы 11,12).

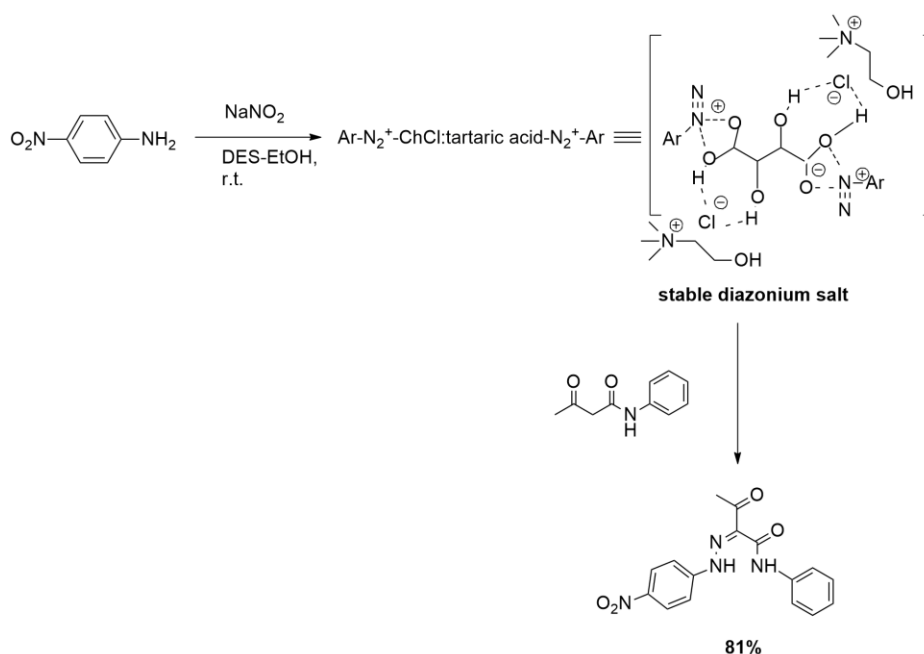


Схема 11

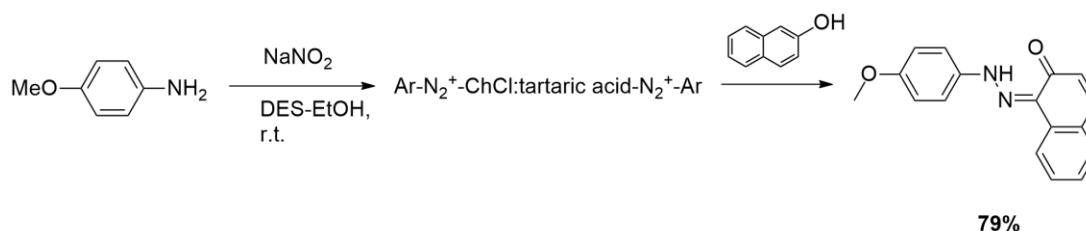


Схема 12

В работе [7] в качестве диазониевой соли в реакции азосочетания используется тетрафторборат 4-(пентафторсульфанил)бенздиазония. Группа SF_5 придает молекуле такие характеристики, как термическая, химическая и гидролитическая стабильность. Впервые данная соль диазония была синтезирована Киршем и Ханном [8], однако не была выделена для того, чтобы в дальнейшем ее использовать.

Группа SF_5 в составе тетрафтор 4-(пентасульфанил)бенздиазония обладает сильным дезактивирующим действием, что сильно замедляет протекание реакции азосочетания.

Авторы работы использовали так называемое «сухое» диазотирование, до этого использовавшееся Дойлом и Брайкером в их работе [9], так как при использовании комбинации реагентов $\text{NaNO}_2/\text{HBF}_4$ не удалось выделить соль диазония.

Комбинация третбутилнитрит/ $\text{BF}_3 \cdot \text{OEt}_2$ в холодном CH_2Cl_2 позволяет получить соль диазония, которая после очищения смесью MeCN /эфир выпадает в виде бледно-желтого осадка **9** (схема 13).

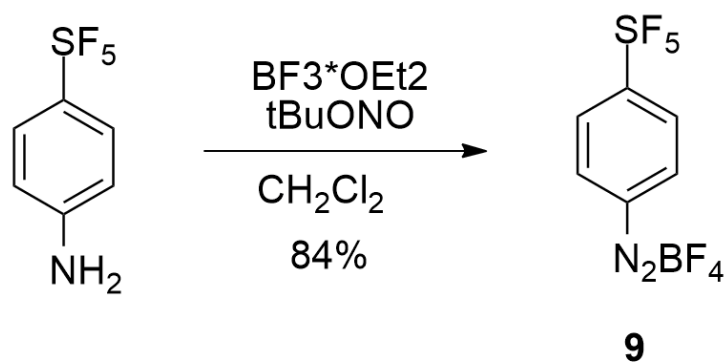
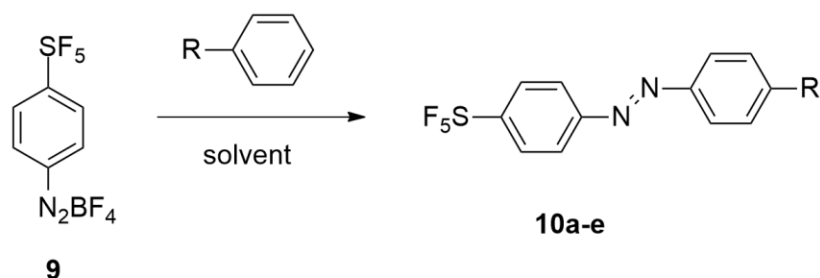


Схема 13

Полученная SF_5 -диазониевая соль **9** далее использовалась в реакции азосочетания с диметокси- и изомерными триметоксибензолами в растворе этанола при комнатной температуре при простом перемешивании (получились вещества **10a-e**, схема 14). При этом, отмечают авторы, проведение реакции с фенолом и анилином потребовало намного больше времени. Попытки провести реакцию азосочетания с анизолом, 1-метилнафталином, 9-метилантраценом и антраценом не привели к успеху.



R= 2,4-(MeO)₂
 2,4,6-(MeO)₃
 2,4,5-(MeO)₃
 4-OH
 4-OH
 4-NH₂

Схема 14

1.4. Получение дисперсных азокрасителей

Дисперсные красители – красители для гидрофобных волокон, используемые при крашении в виде высокодисперсных водных суспензий. Применяются дисперсные красители при крашении полиэфирных, полиамидных и ацетатных волокон, реже - полиакрилонитрильных (в светлые тона), а также при печатании по тканям главным образом из полиэфирных и ацетатных волокон.

Выпускают дисперсные красители в виде тонкодисперсных порошков, гранул или в жидкой форме, в том числе паст.

По химическому строению дисперсные красители – главным образом азокрасители и антрахиноновые красители. Дисперсные азокрасители обеспечивают гамму цветов от желтого до темно-синего. Получение широкой цветовой гаммы достигается изменением характера и положения заместителей в молекуле. Большинство моноазокрасителей содержит (в остатке диазосоставляющей) в *para*-положении к азогруппе NO₂- группу, углубляющую цвет. Углублению цвета способствует также введение электроноакцепторных

заместителей (CN, NO₂, одного атома Cl или Br) в положения 2 или 2,6 к азогруппе или электронодонорных заместителей (алкилов, алкокси- и ациламиногрупп) в остаток азосоставляющей [10].

В работе [11] описано получение дисперсных азокрасителей с использованием ранее неизвестных солей диазония. Диазотирование проводится в этилацетате под действием *трет*-бутилнитрита в присутствии 1,5-нафталиндисульфокислоты (схема 15). Образующаяся соль диазония плохо растворима в органических растворителях, вследствие чего легко отделяется от реакционной массы фильтрованием. В ходе исследований были определены оптимальные соотношения реагентов: ароматический амин:кислота:*трет*-бутилнитрит 1:1:1.5. В качестве исходных аминов были использованы **11a-e**.

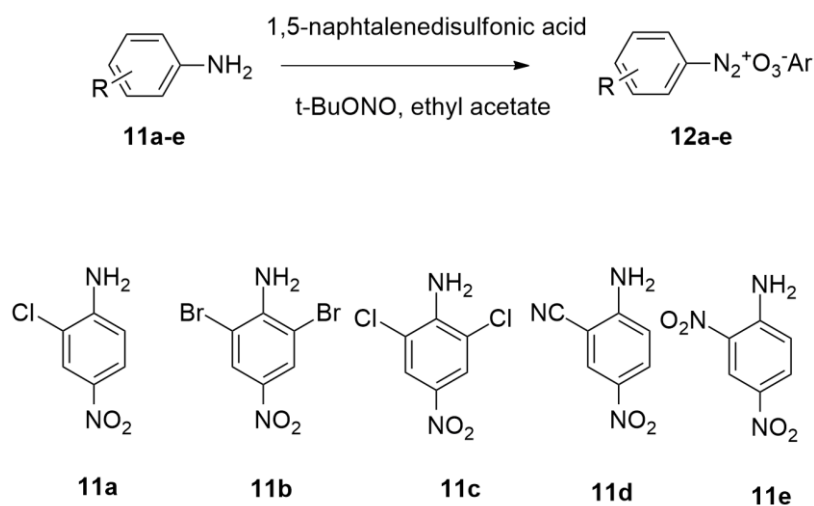


Схема 15

Было показано, что образование соли диазония может происходить как по одной (соль А), так и по обеим сульфогруппам (соль В) используемой 1,5-нафталиндисульфокислоты (схема 15). С помощью ¹H ЯМР и элементного анализа было установлено, что в растворе структуры соли А и В находятся в соотношении 1: 1.85 соответственно (схема 16):

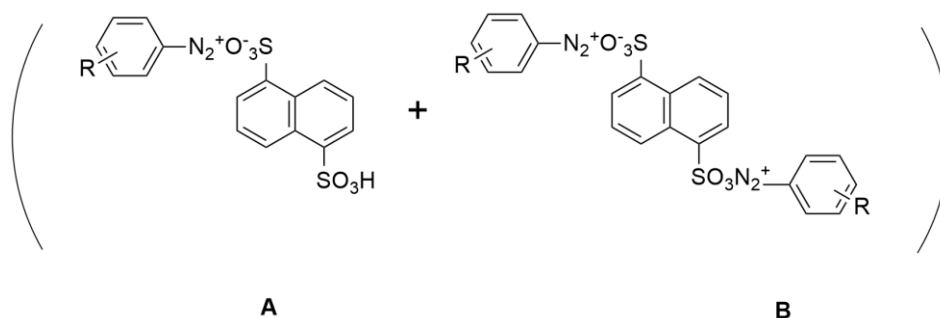


Схема 16

Полученные соли диазония (**12a-e**) вовлекались в реакцию азосочетания с производными N,N-диэтиланилина **13**.

Процедура приготовления азокрасителя состояла в растворении N,N-диэтиланилина в воде с добавлением 1.2 мл соляной кислоты, далее в течение 2 минут при поддержании температуры 0-5 °С добавлялась соль диазония **12a-e**, затем для поддержания pH на уровне 4-5 добавляли раствор NaOH. Азокраситель фильтровали, промывали водой и сушили. Выход азосоединений **11a-m** составил 90.8 %-96.1 % (схема 17).

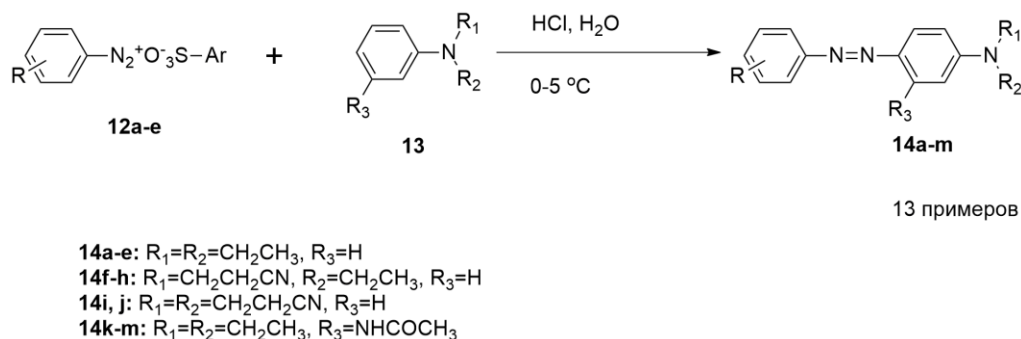


Схема 17

Дисперсные красители на основе 8-гидроксихинолина являются наименее изученным классом красителей для окраски полиэстера. В работе [12] рассматривается синтез двух красителей на основе 8-гидроксихинолина – 5-(6-нитротолуолфенилазо)-8-гидроксихинолина **15** и 5-(4-хлорфенилазо)-8-гидроксихинолина **16** (схема 18).

Красители, как 8-гидроксихинолин содержащие в своем составе пиридиновое кольцо, показали отличные результаты при окрашивании полиэстера и повышенную стойкость [13]. Присутствие – NO₂, – OCH₃ и – Cl повышает устойчивость красителей к прямому солнечному свету [14].

Для синтеза **15** 6-нитро-2-аминотолуол растворяли в 40 мл этанола, затем добавляли 9 мл соляной кислоты и 9 мл дистиллированной воды, охлаждали до 0 °С с помощью ледяной бани. Затем прибавляли 20 мл раствора NaNO₂ по каплям и оставляли на час, после чего щелочной раствор 8-гидроксихинолина добавляли к получившейся диазониевой соли, оставляли еще на час. Продукт выделяли фильтрованием, перекристаллизовывали из чистого этанола.

Краситель **16** получали аналогично.

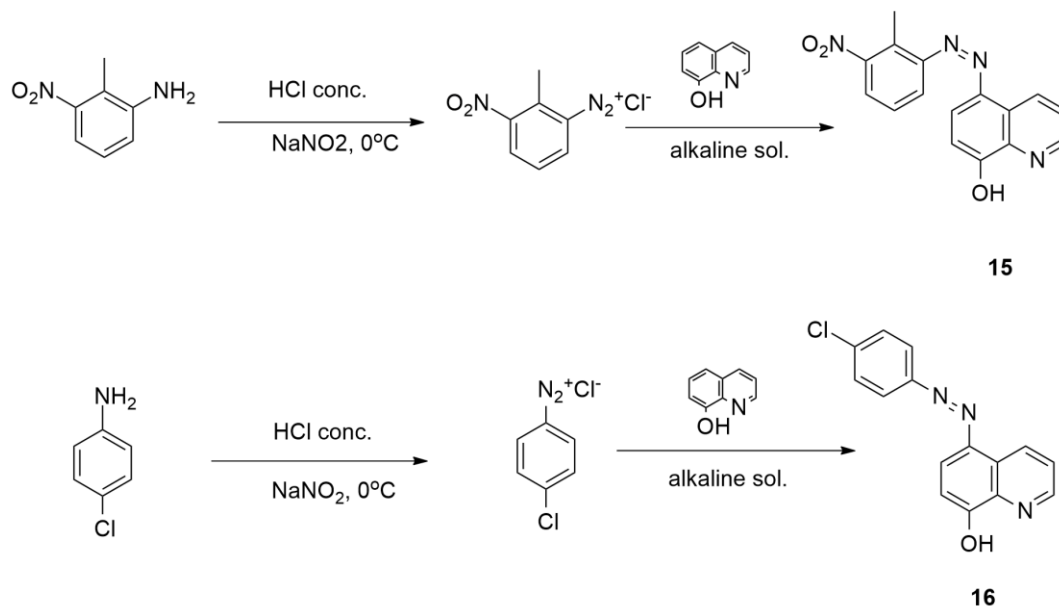


Схема 18

1.5. Синтез азосоединений - химических сенсоров детекции ионов

Стандартными способами определения анионов F⁻, Cl⁻, I⁻, AcO⁻, а также катионов тяжелых металлов Hg²⁺, Cd²⁺, Pb²⁺ являются спектроскопические методы. Их детекция необходима как в медицинских целях, так и при работе с

различными биологическими и экологическими процессами. Разработка химических колориметрических сенсоров для определения указанных ионов является важным и актуальным исследованием.

В работе [15] описан способ синтеза азокрасителя на основе 8-гидроксихинолина, который может использоваться в качестве химического сенсора детекции ионов.

2-(1-(4-аминофенил)этилидин)малонитрил **17** растворяли в смеси ледяной уксусной кислоты и пропионовой кислоты в соотношении 2:1, охлаждали и проводили стандартное диазотирование нитрозилсерной кислотой, избытки которой по окончании реакции удаляли мочевиной (схема 19).

Образовавшуюся диазониевую соль медленно прибавляли к 8-гидроксихинолину в КОН(2 ммоль гидроксида калия в 4 мл MeOH и 2 мл дистиллированной воды). Реакция продолжалась 2 часа, после чего при строгом соблюдении pH на уровне 4-6, которое достигалось прибавлением насыщенного раствора карбоната натрия, реакция стояла на перемешивании еще час. Образующийся азокраситель фильтровали и перекристаллизовывали из этанола, что дало темно-коричневое вещество **18** – схема 19.

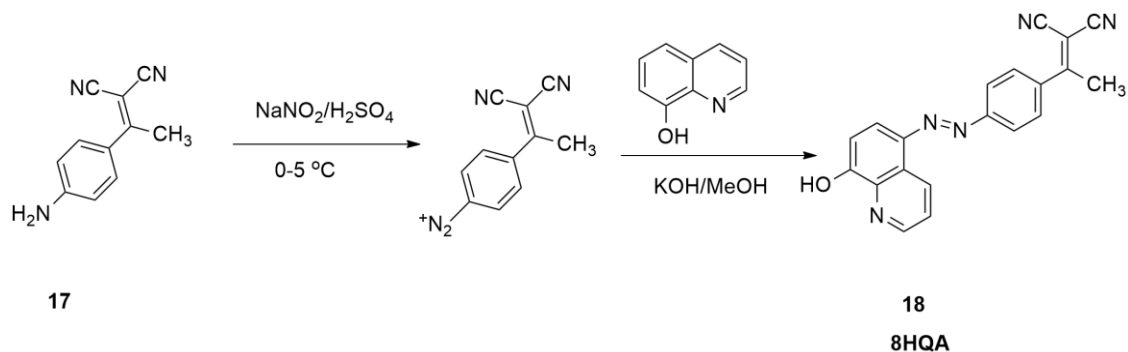


Схема 19

Азокраситель **18** может существовать в нескольких таутомерных формах (схема 20). Экспериментально было установлено, что во всех растворителях соединение **18** существует в азоформе (А).

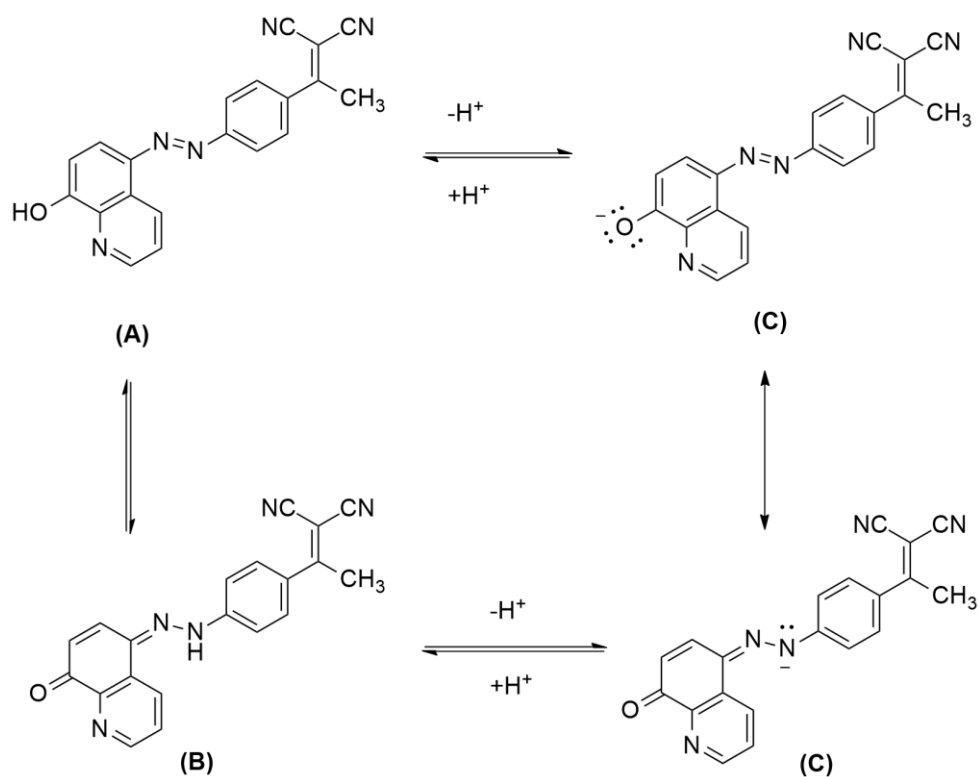


Схема 20

Кроме того, было установлено, что краситель **18** обладает наибольшей чувствительностью к анионам CN^- и H_2PO_4^- , что позволяет его использовать в качестве химического сенсора.

В работе [16] рассматривается возможность использования большого ряда азокрасителей в качестве хелаторов для оптического улавливания катионов тяжелых металлов.

Так, проведена реакция азосочетания между солью диазония **19** и гидроксихинолинсульфонокислотой **20**, которая предварительно была растворена в 2М растворе NaOH. Продукт азосочетания **21** был получен с выходом 82 % (схема 21).

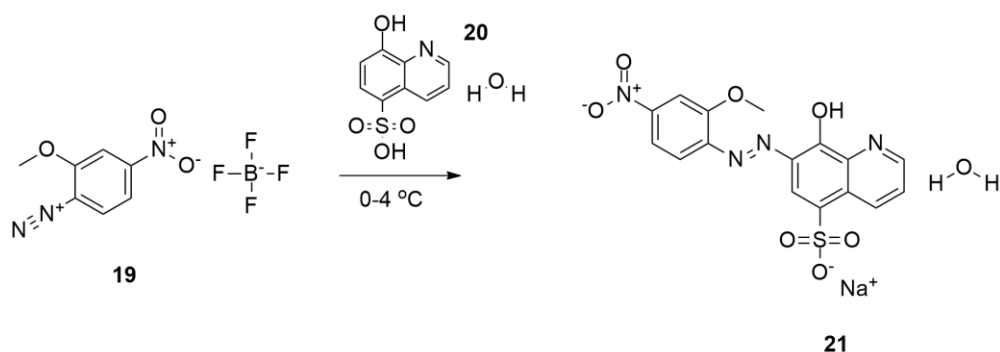


Схема 21

Хлориндазон(Chlorindazone DS) **22** применяется в криминологии в качестве детектора пороховых остатков пуль, содержащих цинк или медь (схема 22).

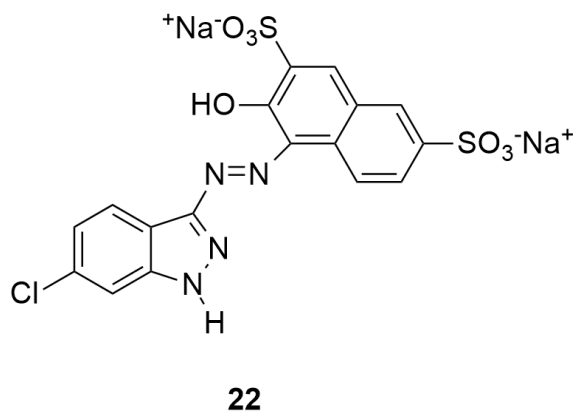


Схема 22

Данный краситель с цинком образует фиолетовый комплекс, а с медью – голубой [17]. Синтез данного вещества описан в работе [18], где в качестве азосоставляющей используется динатриевая соль 2-гидрокси-нафталин-3,6-дисульфокислоты.

3-амино-6-хлориндазол диазотируют смесью NaNO_2/HCl , а затем при добавлении соли 2-гидрокси-нафталин-3,6-дисульфокислоты получают вещество **22** (схема 23).

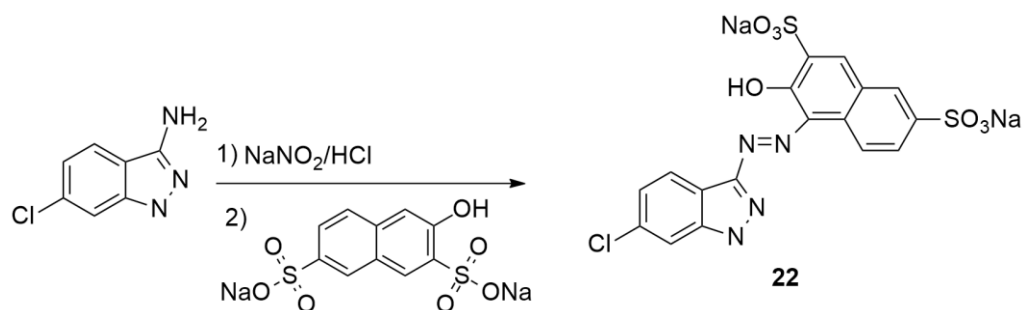


Схема 23

1.6. Синтез азосоединений макромолекулярной структуры

В работе [19] рассматривается способ введения аминогруппы в каликс[5]арен через азосочетание и последующее восстановление диазогруппы в Sn/HCl (схема 24). Предлагается однореакторный метод получения аминокалексаренов через последовательное азосочетание гидроксикалексарена и восстановление азосоединения, полученного *in situ*, под действием олова в соляной кислоте. Для ускорения стадии азосочетания был использован пиридин в качестве основания.

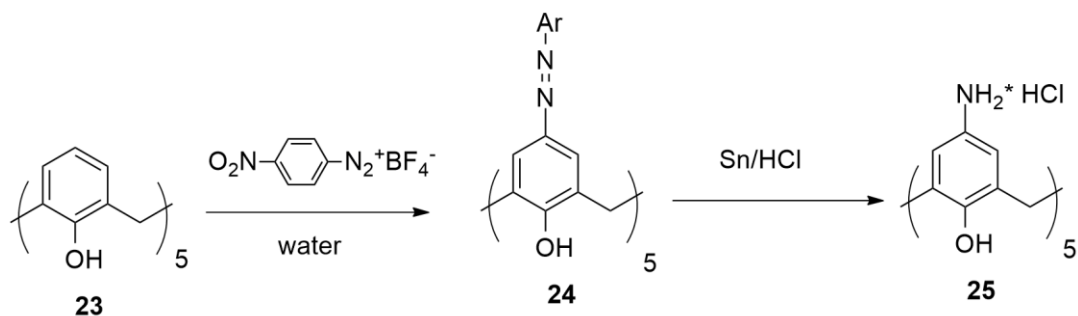


Схема 24

Порфирины, как и азокрасители, являются хромофорами, т.е. веществами, содержащими группы атомов с ненасыщенными связями, которые способны проявлять окраску. Изучение порфиринов, содержащих в своем составе ковалентно-присоединенные остатки азосоединений, представляют теоретический интерес для химии порфиринов [20].

Показано, что тетра(аминофенил)порфирины **26** легко подвергаются реакции диазотирования нитритом натрия в соляной кислоте (схема 25). Получающиеся соли диазония достаточно стабильны и разлагаются при температурах выше 25 °С. Авторами были проведены реакции азосочетания порфирин-диазониевых солей с фенолом, α -нафтолом и β -нафтолом с образованием продуктов (**27a-c**). Порфириновый азокраситель **27a** оказался растворим в водном растворе щелочи, а красители **27b-c** – в спиртовом растворе щелочи (схема 26).

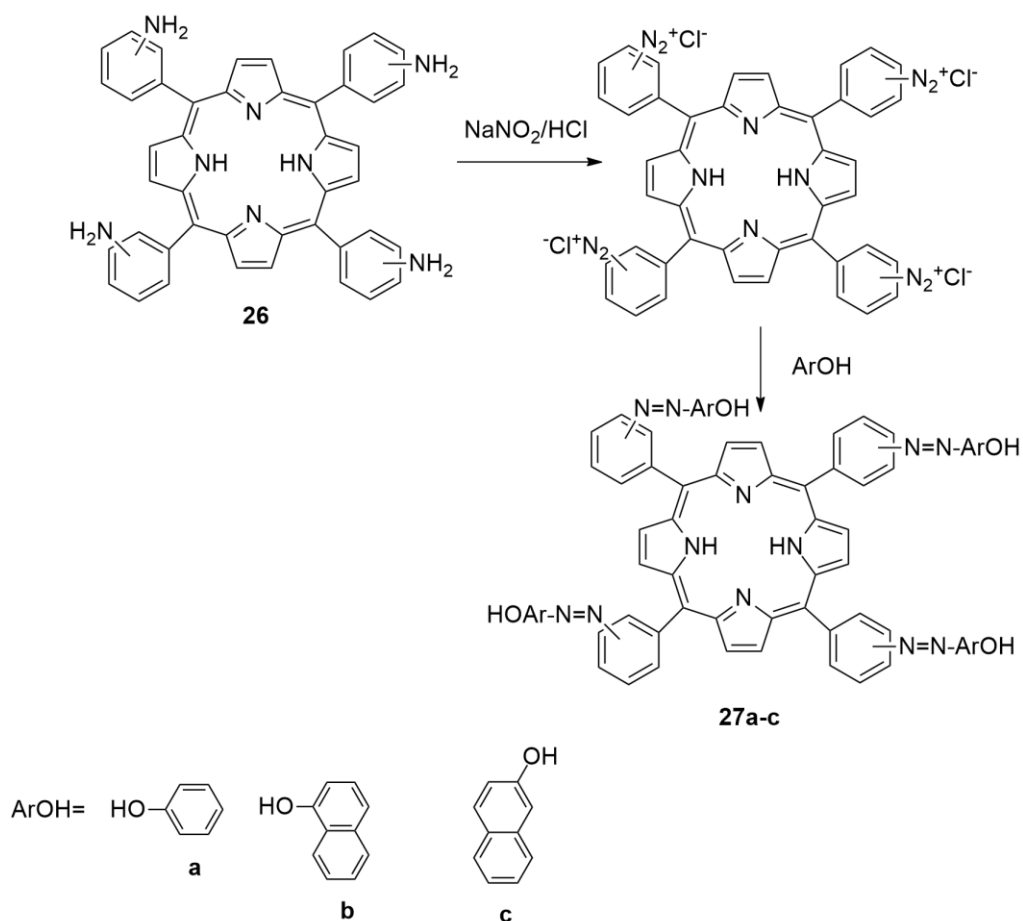


Схема 25

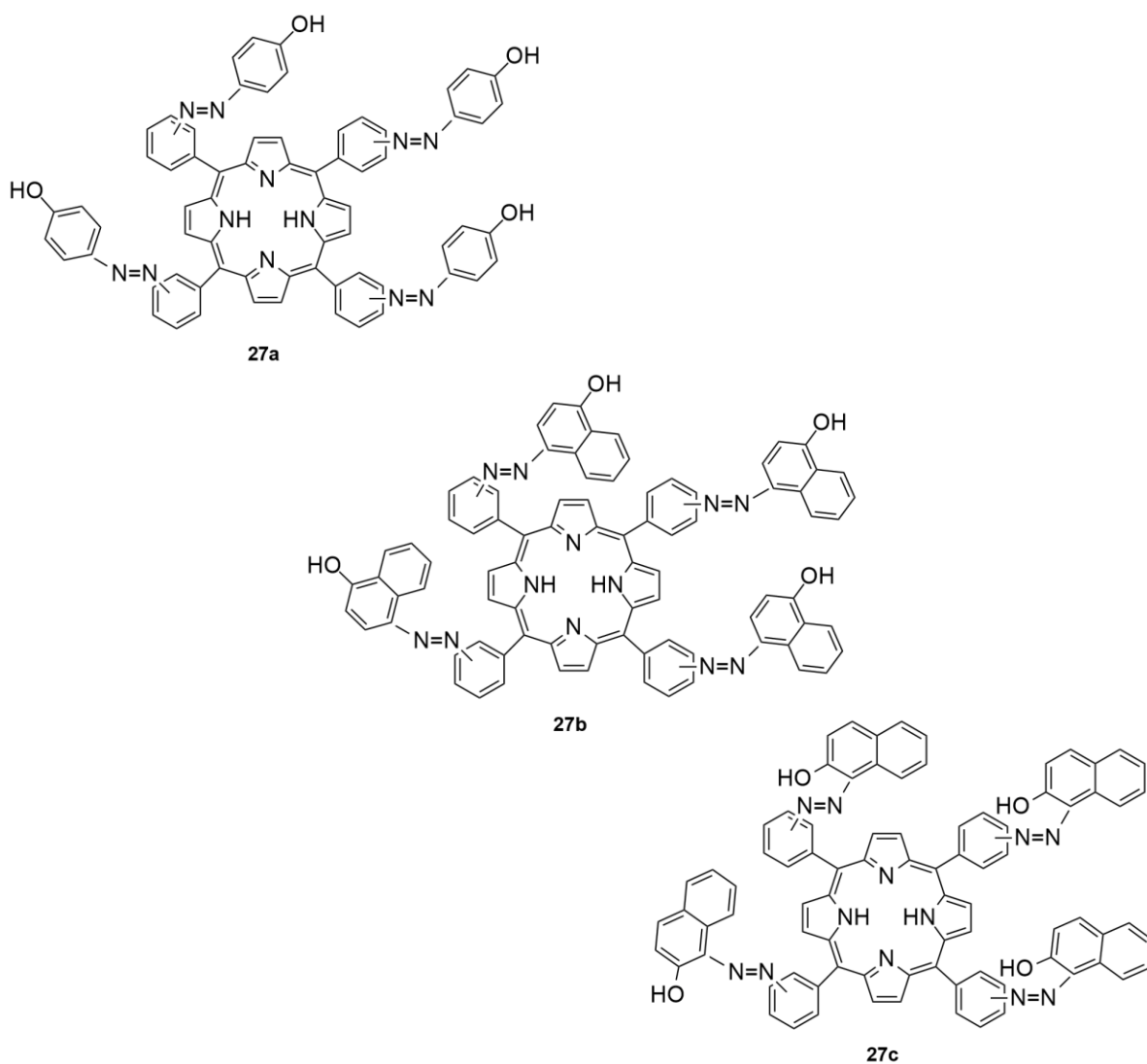


Схема 26

1.7. Синтез биологически активных азосоединений

Азосоединения – известные пролекарства, т.е. вещества, которые могут в организме человека метаболитоваться в биологически активные лекарства. Так, в работе [21] показано что известный препарат пронтозил **28** (схема 27), впервые полученный в 1935 году Герхардом Домагком (и ставший одним из многих препаратов линейки сульфопрепаратов), проявляет активность против стрептококковых инфекций в живых мышцах.

Сульфаниламид **29** (схема 27), получающийся при расщеплении азо-связи в пронтозиле, проявляет такую же активность против стрептококковых инфекций – что говорит о том, что пронтозил в живом организме метаболизируется в активный компонент сульфаниламид (схема 27) действием кишечных бактерий. Данное открытие сподвигнуло исследователей на разработку специальных лекарств, которые активируются бактериями кишечника и используются для лечения ЖКТ.

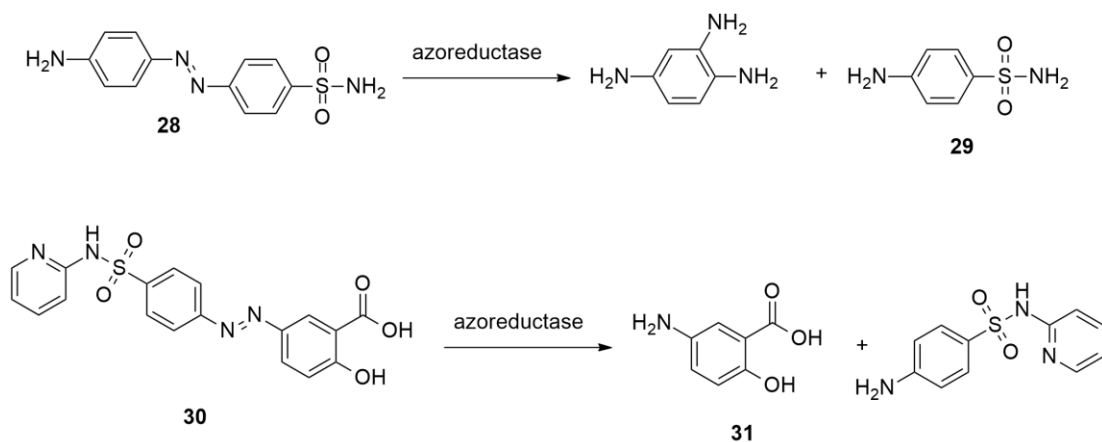


Схема 27

Сульфасалазин **30** используется в качестве лекарственного средства (торговое название Азульфидин) для лечения болезни Крона, ревматоидного артрита и язвенного колита [22]. Он является пролекарством, метаболизирование которого дает активный компонент – 5-аминосалициловую кислоту **31**.

Авторы работы [23] провели диазотирование 3-аминопиридина **32** под действием нитрита натрия в растворе соляной кислоты. К спиртовому раствору 1-нафтола прибавлялся раствор CH_3COONa , а затем, раствор соли диазония **33** (схема 28). В результате с высоким выходом был получен азокраситель **34**, который был исследован на противогрибковую активность. Кроме того, были исследованы его комплексы с Cu^{II} , Ni^{II} .

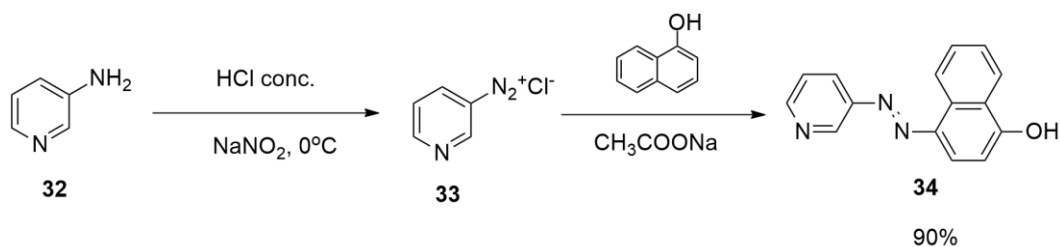


Схема 28

Результаты исследования показали, что оба комплекса азокрасителя **34** проявляют высокую биологическую активность против грам-положительных *S. aureus* и грам-отрицательных *E. Coli*.

Выше приведенные примеры демонстрируют биологическую активность азосоединений, направленную на лечение того или иного заболевания. Однако известны примеры азосоединений, демонстрирующих смертельную опасность для живых организмов. Так в обзоре [24] рассматриваются канцерогенные свойства некоторых азокрасителей. К таким опасным соединениям относятся, например, 4-аминоазобензол (анилиновый желтый) **35**, *o*-аминоазотолуол **36**, а также линейка судановых красителей 1-фенилазо-2-нафтол **37**, 1-(2,4-ксилилазо)-2-нафтол **38** и *n*-красный **39** (схема 29).

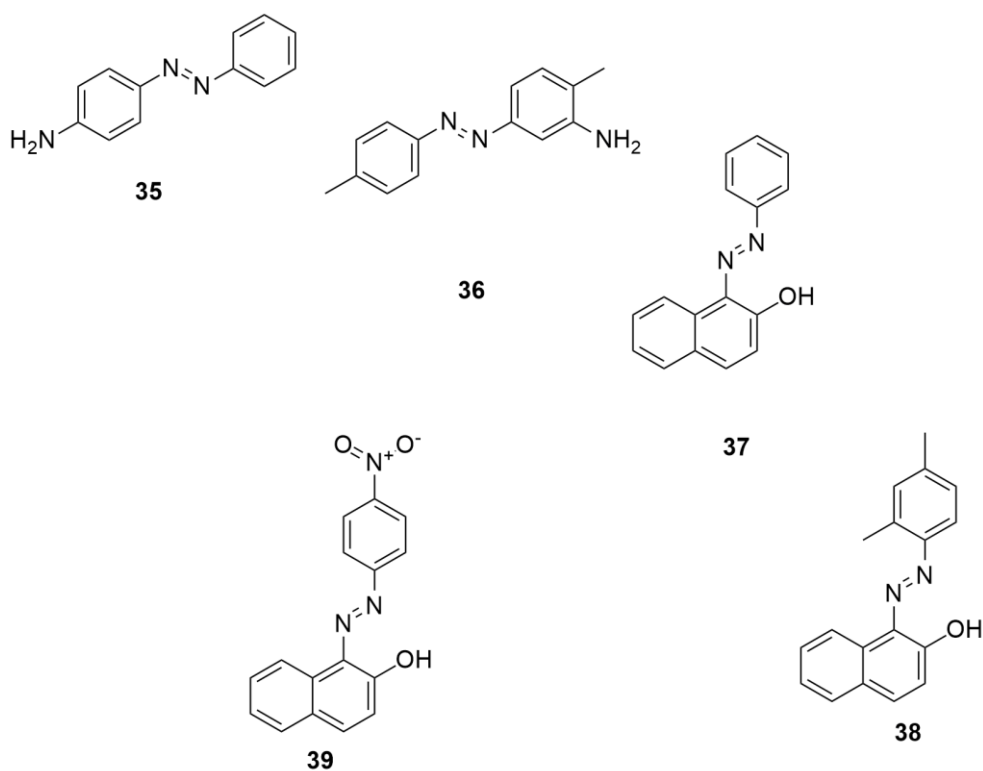


Схема 29

1.8. Другие примеры синтеза ценных азокрасителей

В работе [25] описано получение новых азокрасителей на основе 2,4-дигидроксибензойной кислоты **40**. В качестве диазосоставляющих использовались *m*-нитроанилин, *p*-толуидин, *p*-аминофенол и *p*-аминобензойная кислота (схема 30).

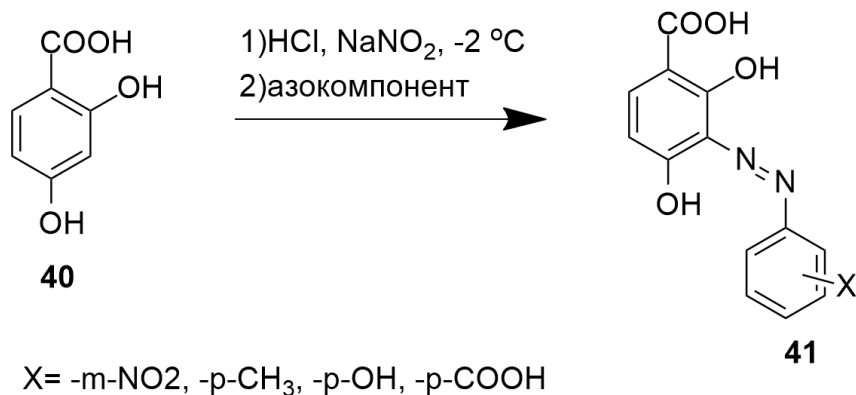
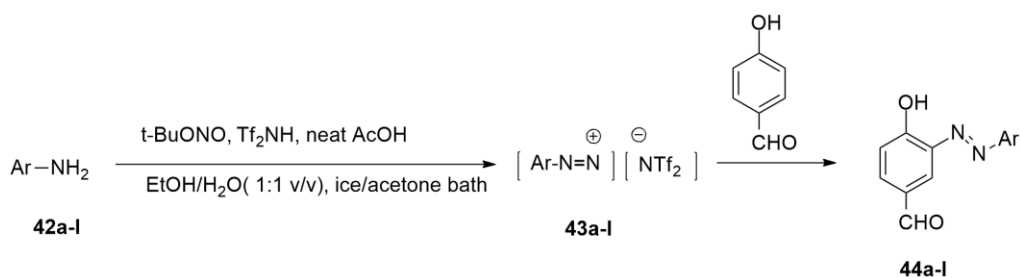


Схема 30

Предварительно ароматические амины переводили в их гидрохлориды путем добавления HCl при температуре $-2\text{ }^{\circ}\text{C}$, затем постепенно добавляли охлажденный водный раствор NaNO_2 и при постоянном помешивании проводили диазотирование в течении 15 минут. Образовавшаяся диазониевая соль стояла в течение 15 минут в ледяной бане, а затем прибавлялась в предварительно растворенную 2,4-дигидроксibenзойную кислоту в 10% NaOH и перемешивании до полного образования азокрасителя **41** (схема 30).

В работе [26] был разработан эффективный одностадийный метод синтеза азосоединений через последовательное диазотирование-азосочетание (схема 31). Для диазотирования был использован широкий ряд ароматических аминов как с электронодонорными, так и электроноакцепторными заместителями. Диазотирование проводили под действием $t\text{-BuNO}_2$ в присутствии бистрифторметансульфанимида (TFSI-H) с уксусной кислотой в качестве мягкого подкислителя. Целью авторов в данном случае являлась разработка бескатализного метода синтеза азокрасителей, отвечающего экологическим требованиям.

Продукты азосочетания с *n*-гидроксibenзальдегидом были получены с высоким выходом. При этом отмечается, что *орто*-замещенные анилины **42e** и **42h** также дают продукты азосочетания с высокими выходами (78% и 82% соответственно), но скорость реакции замедляется примерно в 1.3 раза по сравнению с другими аминами.



- a C₆H₅
- b 4-CH₃-C₆H₄
- c 2,6-[(CH₃)₂CH]-C₆H₃-
- d 4-Cl-C₆H₄-
- e 2-Cl-C₆H₄-
- f 4-Br-C₆H₄
- g 4-NO₂-C₆H₄-
- h 2-NO₂-C₆H₄-
- i 4-CH₃CO-C₆H₄-
- j 4-CH₃O-C₆H₄-
- k 3,4-(methylenedioxy)
- aniline
- l 4-morpholineaniline

Схема 31

Интересным направлением развития химии азокрасителей является работа с нафталимидами и их производными. Авторами работы [27] были получены новые моноазокрасители на основе 4-амино-N-метил (и N-бутил) производных нафталимида, анилина и паранитроанилина, использующихся как диазосоставляющие. Кислота Шеффера (2-нафтол-6-сульфокислота) использовалась в качестве азосоставляющей.

Диазотирование нафталимидов **45** проводили с помощью нитрозилсерной кислоты, а *n*-нитроанилина и анилина – под действием NaNO₂ в соляной кислоте (схема 32, 33). Далее к диазотатному раствору добавлялась кислота Шеффера (схема 32, 33). Выход продуктов азосочетания **46**, **47a-b** 87 – 91%.

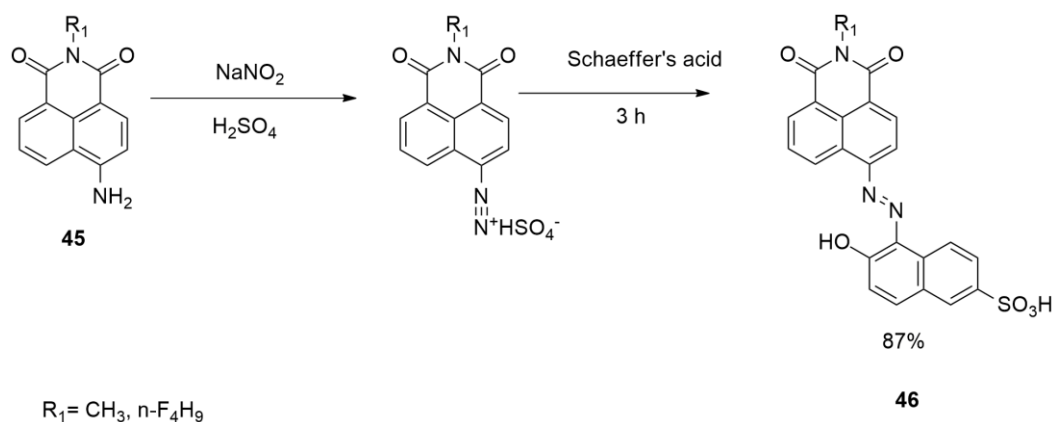


Схема 32

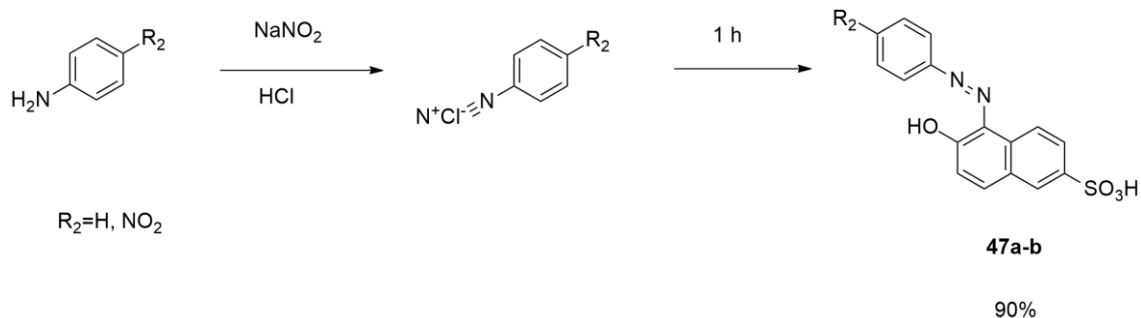


Схема 33

В работе [28] 1-амино-2-нафтол-4-сульфо кислота **48** использовалась в качестве прекурсора к получению диазониевой соли. Авторы работы провели стандартную реакцию диазотирования (схема 34) с такими веществами как 1-нитрозо-2-нафтол, 2-нитрозо-1-нафтол, 1-нафтол и 2 нафтол с получением азокрасителей **49a-d**.

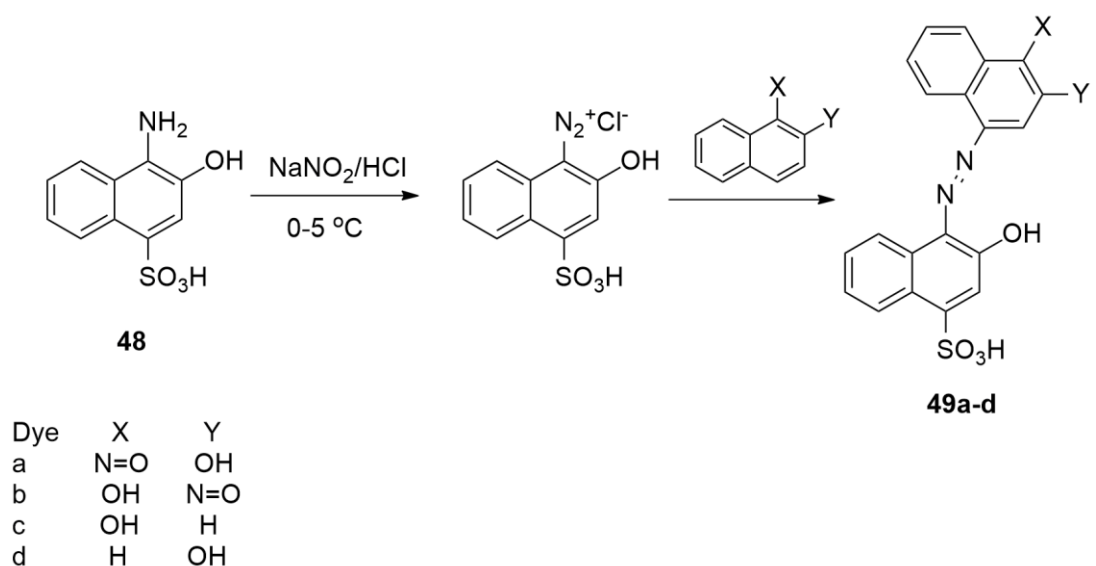


Схема 34

По заявлениям авторов, полученные красители проявляют отличную устойчивость к стирке и свету.

Авторы работы [29] синтезировали линейку 1-арилазо-2-нафтоловых красителей с целью исследования их окисления с помощью пероксида водорода, гипохлорита натрия и различных пероксикислот. По утверждениям авторов, красители **50a-b** существуют преимущественно в гидразонной таутомерной форме (схема 35).

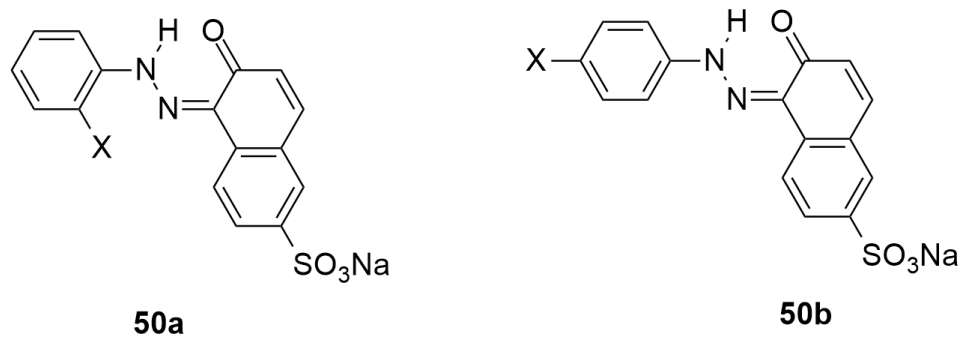


Схема 35

Авторы предлагают синтезировать данные красители стандартным диазотированием и последующим азосочетанием, а очищать с помощью перекристаллизации из смеси этанол-вода.

Сопротивление окислителям, как показывают исследования [30] зависит от заместителей, которые находятся рядом с азо-связью. Заместители могут стерически блокировать атаку на азогруппу и тем самым защищать краситель от окисления; из этого легко сделать вывод что наиболее устойчивы к окисления красители в которых заместители находятся в ортоположении к азо-связи. Также большой размер заместителей и образование водородных связей увеличивают планарность молекулы, а значит и степень сопряжения.

Авторы работы [31] исследовали влияние различных окислителей на соединения **51a-h** (схема 36). Красители **51a**, **51b**, **51c**, **51h** были синтезированы аналогичным образом. На примере **51a** методика выглядит следующим образом: нитрит натрия растворяли в 15 мл дистиллированной воды и медленно приливали к 4-нитроанилину в 1М растворе серной кислоты (100 мл), поддерживая температуру на уровне $<3^{\circ}\text{C}$. Этот раствор затем медленно прибавляли к 2-гидрокси-6-нафталинсульфонокислоте и гидроксиду натрия, предварительно растворенным в 100 мл дистиллированной воды

Образующийся твердый красный продукт нагревали до полного растворения, затем добавляли 20 г хлорида натрия, затем реакционную массу охлаждали до 5°C , краситель выделяли с помощью фильтрования, промывали насыщенным раствором хлорида натрия.

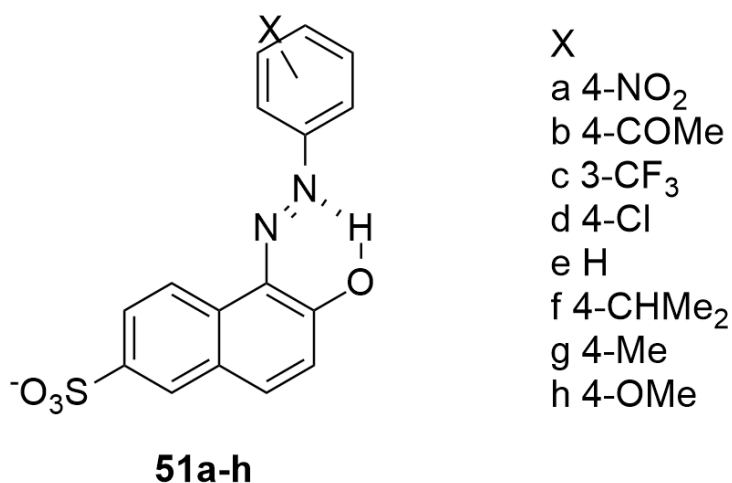


Схема 36

Очищение получающихся красителей проводили так: делали насыщенный раствор красителя в диметилформамиде (DMF 10 мл) при 50°C в который дальше для выпадения осадка по каплям приливали ацетон. Твердое вещество получали фильтрованием, разбавляли ацетоном, повторно фильтровали и сушили. Краситель затем трехкратно перекристаллизовывали из раствора этанол-вода(50:50).

Следует отметить следующее – несмотря на более полуторавековой «возраст», азосоединения продолжают привлекать к себе внимание, благодаря широкому спектру практического использования.

Развиваются и сами синтетические приемы, ведущие к получению азосоединений. Здесь необходимо отметить такие важные тенденции как поиск методов получения устойчивых и безопасных в работе солей диазония, использование «зеленых» растворителей или проведение реакций диазотирования, азосочетание вовсе в отсутствие растворителей. Отдельно следует отметить активно развивающееся направление исследований, связанных с использованием гетероциклов для формирования молекулярных структур азосоединений.

2 Объекты и методы исследования

ИК-спектры были получены на ИК-Фурье спектрометре Agilent Technologies Cary 630 FTIR.

Спектры ЯМР ^1H , ^{13}C получены на спектрометрах Bruker AVANCE III HD (400 МГц), а также ЯМР-спектрометре NMReady-60PRO. Все спектры снимались в DMSO-d_6 относительно TMS. Температура плавления определялась на микросталике Вöetius.

Хромато-масс-спектры были зарегистрированы на газовом хроматографе Agilent Technologies 7890A GC System с масс-селективным детектором Agilent 5975C (70 эВ) газ-носитель – гелий.

Контроль за ходом реакции и чистотой полученных продуктов осуществлялся с помощью тонкослойной хроматографии на пластинках Sorbfil ПТСХ-АФ-А-УФ и Merck, детектирование пятен УФ-светом осуществлялось при длине волны 254 нм, а также с использованием качественных реакций на 2-нафтол и реактив Эрлиха.

УФ-спектры снимались с помощью двухлучевого сканирующего спектрофотометра Specord 250Plus.

2.1 Характеристика использованных веществ

Растворители (ДМСО, этанол, метанол, этилацетат) марки «хч», 2-нафтол марки «ч» использовались без предварительной очистки. Соединения: трет-бутилнитрит и трифторметансульфоокислота являются коммерческим продуктом компании «Sigma Aldrich».

В таблице 1 представлена краткая характеристика веществ, используемых в синтезе азокрасителей на основе натриевой соли 2-нафтол-6-сульфоокислоты.

Таблица 1 – Краткая характеристика исходных веществ

Название веществ	Квалификация	Внешний вид	Брутто формула	М, г/моль	ρ , г/см ³	T _{пл.} , °C	T _{кип.} , °C
1	2	3	4	5	6	7	8
3-аминопиридин	Х.ч.	Бел. крист.	C ₅ H ₆ N ₂	94,11	–	65	248
4-нитроанилин	Х.ч.	Зел. крист.	C ₆ H ₆ N ₂ O ₂	138,12	–	149	260
соль Шеффера	Х.ч.	Сер. порошок	C ₁₀ H ₇ NaSO ₄	246,22	–	>300	–
3-аминохинолин	Х.ч.	Бел. Крист.	C ₉ H ₈ N ₂	144,17	–	92	137
4-метоксианилин	Х.ч.	Коричн.крист.	C ₇ H ₉ NO	123,15	–	57,2	243
3-нитроанилин	Х.ч.	Желт.крист.	C ₆ H ₆ N ₂ O ₂	138,12	–	114	306
бутилнитрит	Х.ч.	Бесцв. жидкость	C ₄ H ₉ NO ₂	103,12	0,9114	–	77
анилин	Х.ч.	Желт. жидкость	C ₆ H ₇ N	93,13	1,02	–6	184,1
трифторметансульфокислота	Х.ч.	Бесцв.жидкость	CF ₃ SO ₃ H	150,08	1,696	– 40	162
p-толуолсульфокислота	Х.ч.	Бел.крист.	C ₇ H ₈ SO ₃ *H ₂ O	190,22	1,24	106	140
Метилен хлористый	Х.ч.	Бесцв жидкость	CH ₂ Cl ₂	84,93	1,33	–95	40
этилацетат	Х.ч.	Бесцв жидкость.	C ₄ H ₈ O ₂	88,11	0,902	–84	77
диэтиловый эфир	Х.ч.	Бесцв. жидкость.	C ₄ H ₁₀ O	74,12	0,713	–116,3	34,6
метанол	Х.ч.	Бесцв. жидкость	CH ₄ O	32,042	0,79	–97,8	64,6
этанол	Х.ч.	Бесцв жидкость	C ₂ H ₆ O	46,07	0,79	–114	78,2
Диметилсульфоксид d ₆	Х.ч.	Бесцв.вязк. жидкость	C ₂ H ₆ SO	84,17	1,19	20,2	190

5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

5.1 Предпроектный анализ

С целью проведения качественного научного исследования необходимы правильная организация, планирование и выполнение работы. Экономичное управление основными ресурсами и их рациональное использование является особо важным направлением современного мира.

Выполнение работы предполагает не только планирование и синтез, но и оценку ресурсоэффективности, коммерциализации. В данной бакалаврской работе представлена методика синтеза азобензолов на основе нафталинсульфокислоты в одну стадию.

Данные соединения являются красителями, а значит, возможно их применение в химической промышленности, наряду с другими, давно известными красителями.

5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

На сегодняшний день большое внимание уделяется азокрасителям, которые применяются как в различных отраслях производства, так и в фармацевтической промышленности (например, бриллиантовый зеленый). В нашей работе рассматривается методика синтеза новых азокрасителей с использованием гидроксиарилсульфокислот без выделения промежуточных diazonиевых солей.

Потенциальными потребителями в первую очередь могут быть предприятия химической и фармацевтической промышленности. Также возможно использование данных соединений в лабораториях органического синтеза.

Для анализа потребителей был рассмотрен рынок производителей химической и фармацевтической промышленности, научно-исследовательские лаборатории и проведено его сегментирование.

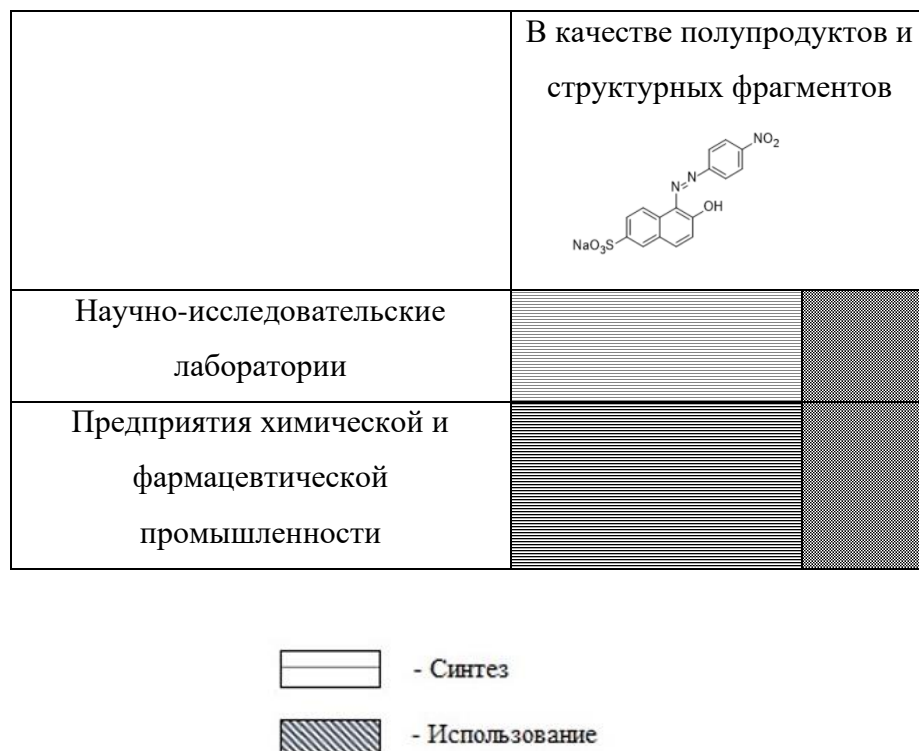


Рисунок 4 Карта сегментирования рынка

Как видно из рисунка 4, красители полученные на основе гидроксиарилсульфокислот на данный момент на стадии разработки и лишь некоторая их часть используется непосредственно в производстве.

5.1.2 Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

Для повышения конкурентоспособности синтезированных красителей необходимо вносить некоторые коррективы. Для этого необходимо проанализировать сильные и слабые стороны конкурентов.

Для определения конкурентных решений используется следующая формула:

$$K = \sum V_i B_i$$

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

В таблице 2 представлена оценочная карта сравнения с конкурирующими разработками, где в качестве конкурента K_1 рассмотрен синтез азокрасителей на основе гидроксиарилсульфокислот с использованием стандартной комбинации реагентов для последовательного диазотирования/азосочетания ($HCl+NaNO_2$), в качестве конкурента K_2 представлен синтез таких же азокрасителей с использованием комбинации ($H_2SO_4+NaNO_2$).

Таблица 2 – Оценочная карта сравнения конкурентных технических решений(разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Бф	Бк1	Бк2	Кф	Кк1	Кк2
1	2	3	4	5	6	7	8
Химические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Доступность исходных продуктов	0,1	5	5	3	0,5	0,5	0,3
2. Простота методики	0,07	4	3	5	0,40	0,21	0,22
3. Выход целевого продукта реакции	0,05	5	2	4	0,25	0,5	0,5
4. Условия реакции	0,08	5	3	5	0,4	0,24	0,23
5. Длительность реакции	0,1	5	3	2	0,5	0,5	0,5
6. Селективность процесса	0,02	5	3	5	0,1	0,06	0,1
7. Чистота полученного продукта	0,03	5	3	5	0,15	0,25	0,26
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Экологичность	0,1	4	2	4	0,6	0,2	0,2

2. Удобство в эксплуатации	0,05	4	3	5	0,4	0,15	0,10
3. Безопасность	0,1	5	3	5	0,5	0,3	0,3
4. Надежность	0,05	5	4	5	0,25	0,2	0,25
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,1	5	4	4	0,3	0,4	0,4
2. Цена исходных субстратов	0,1	5	5	3	0,5	0,8	0,8
3. Уровень проникновения на рынок	0,05	4	3	4	0,2	0,45	0,4
Итого	1				5,05	4,76	4,56

Основываясь на результатах, представленных в таблице 1, можно утверждать, что разрабатываемая нами методика более актуальна, чем разработки конкурентов. Данный фактор основан на том, что предлагаемые нами методы являются более удобными в эксплуатации, а также оказывают минимальное негативное влияние на окружающую среду, так как используемые реагенты почти не токсичны и легко извлекаются. Стоит отметить и тот факт, что цены используемых реагентов являются достаточно низкими.

5.1.3. Диаграмма Исикавы

Для выявления причинно-следственных связей был использован метод создания диаграммы Исикавы. С помощью данного метода можно графически отобразить исследования и определения, с помощью которых выражаются взаимосвязи между факторами и последствиями какого-либо проекта.

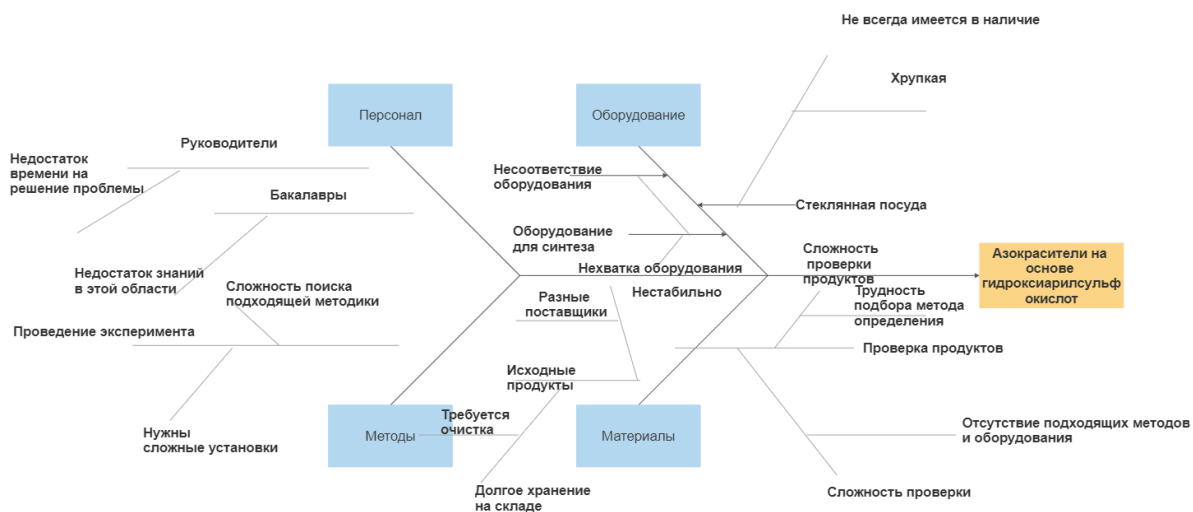


Рисунок 5 Причинно-следственная диаграмма Исигавы.

С помощью данной диаграммы были рассмотрены все факторы, влияющие на синтез получение целевых соединений- азокрасителей.

5.1.4. SWOT-анализ

Данный анализ используется как комплексный инструмент для проведения анализа научноисследовательского проекта. Он применяется для исследования внешней и внутренней среды проекта. Он представлен в табличной форме(табл. 3-4)

Таблица 3 – Матрица SWOT

	<p>Сильные стороны научноисследовательского проекта: С1. Заявленная экономичность технологии. С2. Экологичность технологии. С3. Более низкая стоимость исследований по сравнению с другими. С4. Наличие бюджетного финансирования. С5. Квалифицированный персонал.</p>	<p>Слабые стороны научноисследовательского проекта: Сл1. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой Сл2. Большой срок поставок материалов и комплектующий, используемые при проведении научного исследования Сл3. Высокая продолжительность подготовительных стадий Сл4. Низкий уровень проникновения на рынок</p>
<p>Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Снижение таможенных пошлин на сырье и материалы, используемые при научных исследованиях В3. Повышение стоимости конкурентных разработок</p>	<p>Инфраструктура ТПУ позволяет снизить стоимость исследования по сравнению с другими и облегчает получение бюджетного финансирования. Снижение таможенных пошлин и повышение стоимости конкурентных разработок влияет на все сильные стороны кроме экологичности технологии</p>	<p>Инфраструктура ТПУ позволяет снизить срок поставок, продолжительность стадий и повысить уровень проникновения на рынок. Снижение таможенных пошлин позволяет снизить срок поставок материалов.</p>

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

Таблица 4 – Интерактивная матрица проекта

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

	У3	-	-	-	+	-
	У4	+	-	+	+	+
	У5	+	-	+	+	+
Слабые стороны проекта						
Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	
	В1	-	+	+	+	
	В2	-	+	-	-	
	В3	0	0	0	0	
Слабые стороны проекта						
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	
	У1	-	-	-	+	
	У2	-	-	-	+	
	У3	-	-	-	+	
	У4	+	0	0	+	
	У5	0	0	0	0	

5.1.5 Оценка готовности проекта к коммерциализации

В таблице 5 представлены критерии, по которым возможно определить степень готовности проекта к коммерциализации.

Таблица 5 – Оценка степени готовности проекта к коммерциализации

№ п/п	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	4	3

Продолжение таблицы 5

2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	3	3
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	4	3
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	4	3
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	5	4
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	3
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	3	2
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	1	1
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	2	2
10.	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	5	5
11.	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	1	1
12.	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	3	2
13.	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	4	3
14.	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	4	3
15.	Проработан механизм реализации научного проекта	4	4
	ИТОГО БАЛЛОВ	49	42

Оценка уровня готовности научного проекта(а также уровень знаний, имеющихся у разработчика) определяются по следующей формуле:

$$B_{\text{сум}} = \sum B_i$$

Значение $B_{\text{сум}}$ составило 49 и 42, что свидетельствует о перспективности данной разработки. Данная разработка перспективна и практически готова к реализации на рынке. Однако же, есть необходимость проработки путей внедрения данной разработки на рынок.

5.1.6 Методы коммерциализации результатов научно-технического исследования

Коммерциализация продукта, полученного в ходе данного научно-технического исследования, может быть осуществлена следующими методами:

- 1) Продажей разработок третьим лицам(в виде патентных лицензий)
- 2) Организацией совместных предприятий по схеме «российское производство- зарубежное распространение»

Торговля патентными лицензиями приведет к сотрудничеству с зарубежными компаниями, что в свою очередь повлечет за собой укрепление связей международного сотрудничества, осуществление обмена научно-техническими исследованиями и кадрами.

Организация совместных предприятий приведет к привлечению в страну передовых разработок и повышению престижа научно-технической разработки.

5.2. Инициация проекта

В начале каждого проекта или же новой фазы существующего проекта выполняется инициация, которая подразумевает определение изначальной цели и содержания, фиксацию начальных финансовых ресурсов.

По данному научно-исследовательскому проекту необходимо первоначальное определение внутренних и внешних заинтересованных сторон, которые повлияют на результат. С целью осуществления данного проекта первоначально были определены заинтересованные стороны(таблица 6), изначальные цели и результаты(таблица 7), а также рабочая группа(таблица 8).

1.Цель и результат проекта. Данный раздел основывается на информации о заинтересованных сторонах проекта, иерархии целей проекта а также критериях достижения поставленных целей.

Таблица 6 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Научный руководитель	Разработка новой методики получения азокрасителей на основе соли нафталинсульфокислоты
Студент	

Таблица 7 – Цели и результаты проекта

Цели проекта:	Разработка новой методики получения азокрасителей на основе соли нафталинсульфокислоты.
Ожидаемые результаты проекта:	Новая методика получения азокрасителей из соли нафталинсульфокислоты и соответствующих азокомпонентов.
Критерии приемки результата проекта:	Воспроизводимость методики, ЯМР-спектры, ИК спектры, температуры плавления.
Требования к результату:	Требование:
	Разработанная методика должна быть нацелена на широкий спектр превращений соответствующих исходных ароматических аминов(азокомпонентов).
	Высокие выходы целевых азокрасителей, полученных согласно разработанной методике.

2. Организационная структура проекта. На данном этапе рассматриваются такие показатели, как рабочая группа данного проекта, роль

каждого участника проекта, функции, которые выполняет каждый из участников проекта и их трудозатраты в процессе его выполнения.

Таблица 8 – Рабочая группа проекта.

№ п/п	ФИО, место работы, должность	Функции в проекте	Основные обязанности
1.	Краснокутская Е.А., профессор НОЦ Н.М. Кижнера	Руководитель проекта	Осуществление детального планирования проекта; предоставление информации для создания и актуализации планов работ; контроль сроков выполнения научных работ по проекту
2.	Балаева А.А., студент бакалавриата	Исполнитель проекта	Выполнение научного проекта
3.	Гасанов М.А., профессор ОСГН	Консультант раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	Оказание методической помощи при работе над разделом «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» в магистерской диссертации.
4.	Черемискина М.С., ст. Преподаватель ООД	Консультант раздела «Социальная ответственность»	Оказание методической помощи при работе над разделом «Социальная ответственность»

3. Ограничения и допущения проекта. К ограничениям проекта относятся все факторы, которые могут снизить степень свободы действий участников проекта. К границам проекта относятся параметры проекта или его продукта, которые не могут быть выполнены в рамках данного исследования. В таблице 9 представлены рамки и ограничения данного проекта.

Таблица 9 – Ограничения проекта.

Фактор	Ограничения/ допущения
3.1. Бюджет проекта	-
3.1.1. Источник финансирования	-
3.2. Сроки проекта:	10.09.2021 – 10.06.2022
3.2.1. Дата утверждения плана управления проектом	05.09.2021
3.2.2. Дата завершения проекта	15.05.2022
3.3. Прочие ограничения и допущения*	Не имеются

Кроме вышеперечисленных ограничений стоит отметить и такие факторы, как интегральный финансовый показатель разработки, значение которого не должно превышать 1,0 балла, ресурсоэффективность разработки(не более 4,1 балла из 5,0), интегральный показатель эффективности(не более 4,1 балла из 5,0) а также значение показателей сравнительной эффективности вариантов исполнения(не более 1,0 балла).

В рамках раздела инициации были определены изначальные цели и рассмотрены финансовые ресурсы, а также заинтересованные стороны проекта, действия которых направлены на достижение общей цели. Был проведен анализ всех ограничительных факторов при выполнении проекта.

5.3. Планирование управления научно-техническим проектом.

5.3.1. Иерархическая структура управления проектом.

Иерархическая структура работ основывается на детализации укрупненной структуры работ. В ходе создания данной структуры осуществляется планирование научного проекта, которое состоит из процессов определения цели работы, разработки последовательности действий и общего содержания работы необходимых для достижения определенных целей.

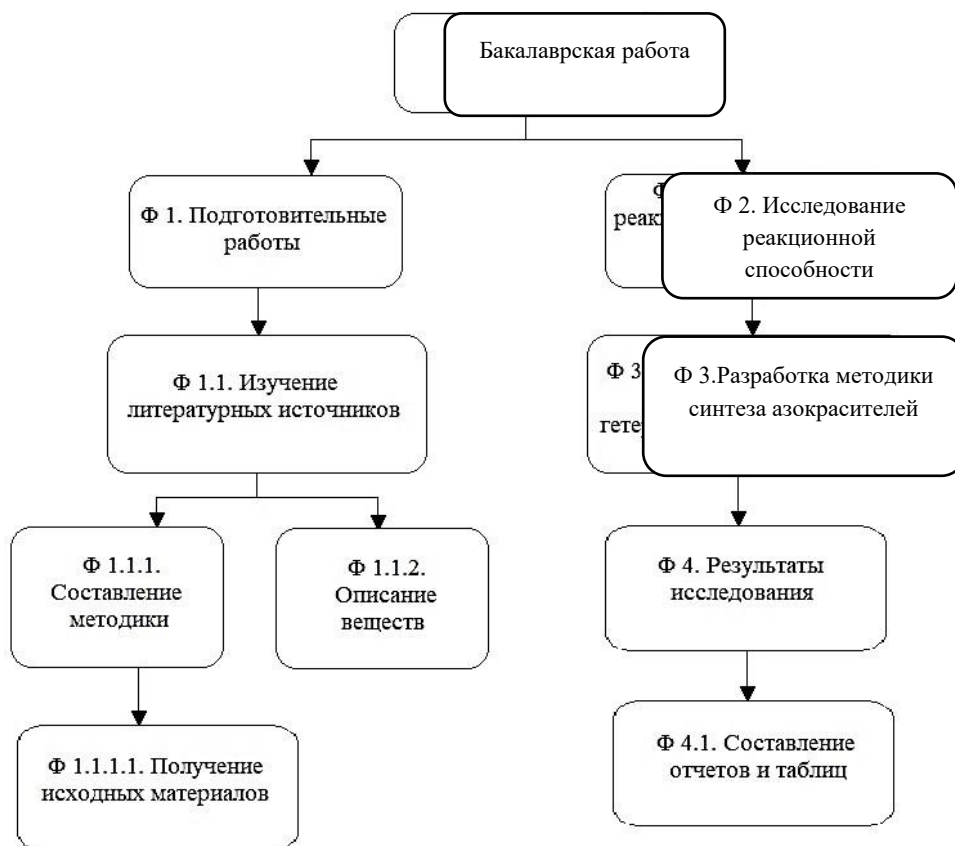


Рисунок 6 Иерархическая структура работ по научно-исследовательскому проекту.

5.3.2. Контрольные события проекта

В данном разделе были определены ключевые события проекта, их даты и результаты, которые должны быть получены по состоянию на указанный период(таблица 10).

Таблица 10 – Контрольные события проекта.

№ п/п	Контрольное событие	Дата	Результат
1.	Изучение литературных источников	25.09.2021 – 01.12.2021	Литературный обзор

2.	Работа над бакалаврской диссертацией	04.12.2021 – 30.04.2022	Разработка нового метода синтеза азокрасителей на основе соли нафталинсульфоукислоты
3.		01.05.2022 – 08.06.2022	Готовая бакалаврская диссертация

5.3.3. План проекта

В рамках планирования данного проекта было проведено построение календарного(таблица 11) и сетевого(рисунок 7) графиков.

Таблица 11 – Календарный план работ.

Код работы	Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников (ФИО ответственных исполнителей)
1.	Литературный обзор	46	25.09.2021	29.11.2021	Балаева А.А
2.	Разработка методики синтеза азокрасителей	10	02.12.2021	13.12.2021	Балаева А.А., Краснокутская Е.А.
3.	Проведение синтеза по разработанной методике	50	16.12.2021	21.02.2022	Балаева А.А.
4.	Наработка широкого ряда азокрасителей с разными азокомпонентами	35	24.02.2022	10.04.2022	Балаева А.А.
5.	Исследование свойств продуктов	10	13.04.2022	24.04.2022	Балаева А.А
6.	Анализ полученных результатов	4	27.04.2022	30.04.2022	Балаева А.А., Краснокутская Е.А.

Продолжение таблицы 11

7.	Составление отчета	25	04.05.2022	02.06.2022	Балаева А.А., Краснокутская Е.А.
8.	Защита работы	1	20.06.2020	20.06.2022	Балаева А.А.
		181			

Код работ (из ИСР)	Вид работ	Исполнители	Т _к , кал, дн.	Продолжительность выполнения работ																											
				сентябрь		октябрь			ноябрь			декабрь			январь			февраль			март			апрель			май			июнь	
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	
1	Литературный обзор	Инженер (студент)	46	■																											
2	Составление методики работы	Руководитель, студент	10										■	■																	
3	Проведение реакций азосочетания	Инженер (студент)	50																												
4	Наработка широкого ряда красителей	Инженер(студент)	35																												
5	Исследование свойств продуктов	Инженер (студент)	10																												

5.3.4. Бюджет научного исследования

Планирование бюджета научного исследования включает в себя наиболее полное отражение всех видов планируемых расходов, необходимых для выполнения работы.

Сырье, материалы, покупные изделия(за вычетом расходов)

В данном разделе анализируются затраты на материалы, полуфабрикаты и комплектующие изделия, необходимые для выполнения работы. Потребность сырья определяется по количеству его расхода.

Таблица 12 – Затраты на материалы

Наименование	Марка, размер	Кол-во (Тара)	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
4-нитроанилин	Aldrich, х.ч	100 г	6044,83	6044,83
3-аминопиридин	Aldrich, х.ч	25 г	2831,89	2831,89
Соль Шеффера	FisherScientific, х.ч	25 г	4370,15	4370,15
3-аминохинолин	Aldrich, х.ч	5 г	8160,48	8160,48
4-метоксианилин	Aldrich, х.ч	5 г	2091,73	2091,73
3-нитроанилин	Aldrich, х.ч	5 г	2497,18	2497,18
анилин	Aldrich, х.ч	1 л	5095,72	5095,72
т-Бутилнитрит	Aldrich, х.ч	100 мл	4890,51	4890,51
Трифторметансульфокислота	Aldrich, х.ч	100 г	18914,17	18914,17
р-Толуолсульфокислота	Aldrich, х.ч	100 г	2913,91	2913,91
Метилен хлористый	Вектон, х.ч	1 л	585	585
Диэтиловый эфир	Вектон, х.ч	1 л	736,80	736,80
Метанол	Вектон, х.ч	1 л	912	912
Диметилсульфоксид d ₆	Aldrich, х.ч	0,01 л	5040,43	5040,43
Этанол	Вектон, х.ч	1 л	140	140
Этилацетат	Вектон, х.ч	1 л	216,70	216,70
Сернокислый натрий (безв.)	Вектон, х.ч	1 кг	102,22	102,22
Натрий хлористый	Вектон, х.ч.	0,5 кг	84,00	84,00
Силикагель	Вектон, х.ч	1 кг	477,01	477,01

Уксусная кислота	Вектон, х.ч	1 кг	414	414
Соляная кислота	Вектон, х.ч	1,2 кг	149,76	149,76
Нитрит натрия	Вектон, х.ч	0,6 кг	296,20	296,20
Всего за материалы				66964,69
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				3348,23
Итого по статье С_м				70312,92

Специальное оборудование для научных(экспериментальных) работ

В данном разделе рассматриваются все затраты, связанные с приобретением специального оборудования. Определение стоимости оборудования производится по действующим прейскурантам. Стоимость оборудования, имеющегося в лаборатории органического синтеза, учитывается как амортизационные отчисления.

Таблица 13 – Расчет бюджета затрат на приобретение оборудования

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц	Цена единицы, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1.	Шпатель	2	40	80
2.	Воронка стеклянная	5	20	100
3.	Пластинка для тонкослойной хроматографии	1	4921	4921
4.	Цилиндр	3	150	450
5.	Штатив	1	2000	2000
6.	Колба круглодонная	10	110	1100
7.	Стакан	6	100	600
8.	Колба плоскодонная	3	65	195
9.	Палочки стеклянные	4	20	80

Продолжение таблицы 13

10.	Фильтр обеззоленный	2	33	66
11.	Колба бунзена	2	1170	2340
12.	Фильтр Шотта	2	919	1838
13.	Флакон пеницилиновый	10	9	90
14.	Термометр	1	230	230
15.	Термометр на шлифе	1	250	250
Итого			14340,0	

Затраты определяются в виде амортизации по формуле:

$$E_{ам} = \frac{\sum K_{обі} \times N_{амі} \times T_{обі}}{365 \times 100}$$

где $K_{обі}$ – стоимость ед. прибора или оборудования, руб.; $N_{амі}$ – норма амортизации прибора или оборудования, %; $T_{обі}$ – время использования оборудования, дни.

Таблица 14 – Расчет бюджета на приобретение оборудования для научного эксперимента.

№	Наименование оборудования	Цена единицы оборудования, $K_{обі}$, руб	Время использования, $T_{обі}$, дни	Норма амортизации, $N_{амі}$, %	Мощность прибора, N_i , Вт	Сумма амортизационных отчислений $E_{ам}$, руб.	Сумма затрат на электроэнергию, $E_э$, руб
1	ГХ/МС Agilent 5975C	4700000	10	11	2,45	14164,4	188,65
2	УФ лампы EN-280L (8 Вт)	23500	40	11	0,008	238,29	2,464

Продолжение таблицы 14

3	Электроплитка с магнитной мешалкой HP- 20D-Unit	18500	95	10,4	0,6	500,77	1097,25
4	Электронные весы E-200	25200	95	8,8	0,03	577,18	10,97
5	Весы аналитические HTR-120 CEShinko	40120	10	8,8	0,03	96,72	1,155
6	Аквадистилятор ДЭ-4-2М	19467	30	10	0,003	160	0,346
7	Испаритель ротационный типа RV- 06ML1B1KA	149250	35	11	60	1574,28	8085
	Итого	4976037				17311, 64	9385,835

Основная заработная плата

В данном разделе отображена основная заработная плата научных и инженерно-технических сотрудников, которые задействованы в выполнении данной научно-исследовательской работы. Расходы по заработной плате определяются исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы оплаты труда.

Месячный должностной оклад работника составляет:

$$Z_M = Z_6 \times K_p$$

где Z_6 – базовый оклад, руб.; K_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

1) Базовый оклад Z_6 такого руководителя, как д.х.н. профессор, составляет 31000 р. Рассчитываем месячный должностной оклад руководителя:

$$Z_m = 31000 \times 1,3 = 40300 \text{ руб.}$$

Среднедневная ЗП руководителя:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{40300 \times 10,4}{251} = 1669,8 \text{ руб.}$$

2) Базовый оклад Z_6 бакалавра, составляет 3250 руб. Рассчитываем месячный должностной оклад инженера (бакалавра):

$$Z_m = 1750 \times 1,3 = 4225 \text{ руб.}$$

Среднедневная ЗП инженера (бакалавра):

$$Z_{\text{дн}} = \frac{4225 \times 10,4}{181} = 242,76 \text{ руб.}$$

Таблица 15 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистрант
Календарное число дней	295	295
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	52
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени: отпуск или невыходы по болезни	48	48
Действительный годовой фонд рабочего времени	181	181

Продолжение таблицы 15

Действительное рабочее время реализуемого проекта	181	181
---	-----	-----

Таблица 16 – Расчет основной заработной платы

№ п/п	Наименование этапов	Исполнители по категориям	Трудоемкость, чел.-дни	Заработная плата приходящаяся на один чел.-дн., тыс.руб.	Всего заработная плата по тарифу (окладам), тыс.руб.
1.	Разработка метода синтеза красителей на основе гидроксиарилсульфокислот	Краснокутская Е.А.	10	1,6698	66792
2.	Анализ полученных результатов	Краснокутская Е.А.	5		
3.	Составление отчета	Краснокутская Е.А.	25		
4.	Литературный обзор	Балаева А.А.	46	0,24276	43,9396
5.	Разработка метода синтеза красителей на основе гидроксиарилсульфокислот	Балаева А.А.	10		
6.	Проведение синтеза по разработанной методике	Балаева А.А.	50		
7.	Наработка широкого ряда красителей на основе гидроксиарилсульфокислот	Балаева А.А.	35		
8.	Исследование свойств продуктов	Балаева А.А.	10		
9.	Анализ полученных результатов	Балаева А.А.	4		
10.	Составление отчета	Балаева А.А.	25		

11.	Защита работы	Балаева А.А.	1	
Итого				110,731

Таблица 17 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	З _б , руб.	k _{пр}	k _д	k _р	З _м , руб	З _{дн} , руб.	T _р , раб. дн.	З _{осн} , руб.
Руководитель	31000	0	0	1,3	40300	1669,8	40	66792
Инженер (магистрант)	3250	0	0	1,3	2275	130,7	181	43939
Итого:								110731

Дополнительная заработная плата научно-производственного персонала

Данный показатель рассчитывается как 10-15% от основной заработной платы работников, непосредственно участвующих в выполнении научно-исследовательской работы:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \times Z_{\text{осн}}$$

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

Таблица 18 – Дополнительная заработная плата.

Зарботная плата	Руководитель	Инженер (магистрант)
Основная зарплата	66792	43939
Дополнительная зарплата	8683	5712
Итого по статье Сзп	75475	49651

Контрагентные расходы

В данном научно-исследовательском проекте контрагентные расходы составляют 3100 руб. на оплату проведения спектроскопического анализа ЯМР ^{13}C и ^1H .

Накладные расходы

В данном разделе рассматриваются расходы на управление и хозяйственное обслуживание, которое осуществлялось в ходе данной научно-исследовательской работы.

- 1) Расход электроэнергии для магнитной мешалки в час составляет 1,3 кВт/ч. Длительность использования составила 95 дней в среднем по 5 часов. $E = 95 \times 5 \times 1,3 = 617,5$ кВт.
- 2) Расход энергии для персонального компьютера в среднем составляет 0,16 кВт/ч. Длительность использования составила 4 месяца, компьютер работал в среднем 23 дня в месяц, по 7 часов. $E = 23 \times 7 \times 4 \times 0,16 = 103,04$ кВт.
- 3) Освещение (4 лампы по 100 Вт использовались 4 месяца, в среднем 23 дня в месяц, были включены 8 часов в день). $E = (4 \times 8 \times 23) \times 0,4 = 257,6$ кВт.

Общая сумма затрат на электроэнергию согласно действующему тарифу (3,85 руб за 1 кВт/ч) составляет:

$$C_{\text{эл}} = (617,5 + 103,04 + 257,6) \times 3,85 = 3765,839 \text{ руб}$$

4) Затраты на водоснабжение

Действующий тариф на водоснабжение - 56,76 за 1 м³. Примерный расход воды за время исследований составил 35 м³.

Затраты на водоснабжения за весь период составляют -1986,6 руб. Вода использовалась преимущественно для кипячения и концентрации жидкостей при перегонке. Кроме того, вода использовалась для мытья химической посуды.

Итого расходы: $C_1 = C_{\text{в}} + C_{\text{эл}} = 1986,6 + 3765,839 = 5752,439$ руб

Отчисления на социальные нужды

Данный раздел предполагает анализ отчислений в различные внебюджетные фонды, расчет которых производится по следующей формуле:

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

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

Отчисления на социальные нужды составляют 27,1 %. Отсюда получаем:

$$C_{\text{внеб}} = 0,271 \times (110731 + 14395) = 33909,146 \text{ руб.}$$

Таблица 19 – Бюджет научного исследования

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание
1. Материальные затраты НИ	70312,92	табл. 5.11
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	31651	табл. 5.12-5.13
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	110731	табл. 5.14-5.15
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	49651	табл. 5.17
5. Отчисления во внебюджетные фонды	33909,146	–
6. Затраты на научные и производственные командировки	–	–
7. Контрагентские расходы	3100	–
8. Накладные расходы	5752,439	–
Бюджет затрат НТИ	305107,505	

На основании расчета определили затраты на выполнение НТИ, которые суммарно составили 305107,505. Показатель бюджета затрат конкурирующего метода составил 350230,403. (более высокий показатель

материальных затрат и затрат на специальное оборудование). Предлагаемый метод синтеза азокрасителей позволяет сократить затраты бюджета на 12,88 %.

Таким образом, на основании проведенных расчетов, можно сделать вывод об эффективности данного научно-исследовательского проекта. Экономические затраты считаются приемлемыми. Сроки реализации данного проекта полностью совпадают.

5.3.5. Реестр рисков проекта

В процессе реализации проекта возможно возникновение рисков, которые не позволят полностью реализовать поставленные цели. Полностью избежать таких рисков не получится, однако же можно снизить угрозу их возникновения путем уменьшения действия неблагоприятных факторов. Возможные риски представлены в таблице 20.

Таблица 20 – Возможные риски

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

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

5.4.1. Оценка сравнительной эффективности исследования

Существует необходимость систематического проведения детального анализа существующих конкурирующих разработок, поскольку рынки находят ся в постоянном движении. Такой анализ способствует внесению коррективов в научное исследование с целью более успешной

конкуренции. Важность данного анализа заключается в реалистичной оценке сильных и слабых сторон разработок конкурентов.

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

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трех (или более) вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется согласно формуле:

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

где I_{Φ}^p – интегральный финансовый показатель разработки; Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{\max} – максимальная стоимость исполнения научноисследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

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

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить согласно следующим способам:

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

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

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

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p} \qquad I_{финр}^a = \frac{I_m^a}{I_{\phi}^a}$$

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

Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{ср}$):

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

Сравнение интегральных показателей представлено в таблице 21.

Таблица 21 – Сравнительная эффективность разработки

№, п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	1,0	0,99	0,99
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,73	3,4	4,0
3	Интегральный показатель эффективности	4,73	3,4	4,0

4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	1,39	1,18
---	--	---	------	------

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