



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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки 18.04.01. Химическая технология
ООП/ОПОП Химическая технология высокомолекулярных соединений
Отделение школы Отделение химической инженерии

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Синтез силоксановых мономеров норборненового ряда и полимеров на их основе

УДК 678.83-13:678.63'281

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ11	Федецов Семен Юрьевич		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бондалетов Владимир Григорьевич	д.т.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Креницына Зоя Васильевна	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

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

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

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



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

Школа _____ Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки _____ 18.04.01. Химическая технология
ООП/ОПОП _____ Химическая технология высокомолекулярных соединений
Отделение школы _____ Отделение химической инженерии

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

Обучающийся

Группа	ФИО
2ДМ11	Федецов Семен Юрьевич

Тема работы

Синтез силоксановых мономеров норборненового ряда и полимеров на их основе
--

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:	01.06.2023
--	------------

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
05.10.2021-10.02.2021	Работа с научно-технической и нормативной литературой, проведение патентного поиска по теме	20
10.02.2021-01.02.2023	Проведение экспериментальных исследований	45
01.02.2023-01.03.2023	Обсуждение полученных экспериментальных результатов. Написание тезисов докладов по материалам работы	15
22.05.2023	Написание разделов «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» и «Социальная ответственность»	20
01.06.2023	Сдача готовой работы	
06.06.2023	Размещение в ЭБС	

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бондалетов Владимир Григорьевич	д.т.н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП/ОПОП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Гавриленко Михаил Алексеевич	д.х.н., доцент		

**TOMSK
POLYTECHNIC
UNIVERSITY**



**ТОМСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ**

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

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ11	Федецов Семен Юрьевич		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП

Код компетенции	Наименование компетенции
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действия
УК(У)-2	Способен управлять проектом на всех этапах его жизненного цикла
УК(У)-3	Способен организовывать и руководить работой команды, вырабатывая командную стратегию для достижения поставленной цели
УК(У)-4	Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия
УК(У)-5	Способен анализировать и учитывать разнообразие культур в процессе межкультурного взаимодействия
УК(У)-6	Способен определять и реализовывать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Способен организовывать самостоятельную и коллективную научно-исследовательскую работу, разрабатывать планы и программы проведения научных исследований и технических разработок
ОПК(У)-2	Способен использовать современные приборы и методики, организовывать проведение экспериментов и испытаний, проводить их обработку и анализировать их результаты
ОПК(У)-3	Способен разрабатывать нормы выработки, технологические нормативы на расход материалов, заготовок, топлива и электроэнергии, контролировать параметры технологического процесса, выбирать оборудование и технологическую оснастку
ОПК(У)-4	Способен находить оптимальные решения при создании продукции с учетом требований качества, надежности и стоимости, а также сроков исполнения, безопасности жизнедеятельности и экологической чистоты
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские разработки при исследовании самостоятельных тем
ПК(У)-2	Способен проводить поиск, обработку, анализ и систематизацию научно-технической информации по теме исследования, выбирать методики и средства решения задачи
ПК(У)-3	Способен осуществлять технологическое и методическое сопровождение в области синтеза и переработки полимерных материалов
ПК(У)-4	Способен проектировать и организовывать учебный процесс по образовательным программам с использованием современных образовательных технологий



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

Школа Инженерная школа природных ресурсов
Направление подготовки 18.04.01. Химическая технология
ООП/ОПОП Химическая технология высокомолекулярных соединений
Отделение школы Отделение химической инженерии

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП/ОПОП

Гавриленко М. А.

(Подпись)

(Дата)

(Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы магистранта

Обучающийся

Группа	ФИО
2ДМ11	Федецов Семен Юрьевич

Тема работы:

Синтез силоксановых мономеров норборненового ряда и полимеров на их основе	
Утверждена приказом директора (номер, дата)	№ 32-59/с от 01.02.2023

Срок сдачи студентом выполненной работы:	01 июня 2023 г.
--	-----------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

Исходные данные к работе:	1. Объект исследования: композиционные материалы на основе аморфного диоксида кремния, обработанного норборненовым производным дициклопентадиена и винилтриметоксисилана и полидициклопентадиена 2. Исходное сырье / целевой продукт дициклопентадиен, винилтриметоксисилан, аморфный диоксид кремния, ксилол.
Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов	1. Литературный и патентный обзор по тематике исследования. 2. Экспериментальная часть (проведение лабораторных исследований). 3. Результаты исследования и их обсуждение. 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение. 5. Социальная ответственность.
Перечень графического материала	Презентация
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант



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

Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Криницына З.В.
Социальная ответственность	Сечин А.А.
Раздел на иностранном языке	Сыскина А. А.
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	
На русском языке: введение, литературный обзор, экспериментальная часть, результаты и их обсуждение, финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение, социальная ответственность, заключение	
На английском языке: Synthesis of siloxane monomers of the norbornene-type and polymers based on them (Literature review).	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	01.10.2021
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Бондалетов Владимир Григорьевич	д.т.н.		01.10.2021

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ11	Федецов Семен Юрьевич		01.10.2021

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
2ДМ11	Федецов Семену Юрьевичу

Школа	ИШПР	Отделение (НОЦ)	ОХИ
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	Химическая технология

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

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	Стоимость материальных ресурсов определялась по средней рыночной стоимости. Оклады в соответствии с окладами сотрудников организации.
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	30% районный коэффициент
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	30% отчисления во внебюджетные фонды

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i>	Провести предпроектный анализ
2. <i>Разработка устава научно-технического проекта</i>	Представить Устав научного проекта магистерской работы
3. <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет, риски и организация закупок</i>	Разработать план управления НТИ
4. <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической эффективности</i>	Рассчитать сравнительную эффективность исследования

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Диаграмма Исикавы
3. График проведения проекта
4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности разработки

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Криницына Зоя Васильевна	канд.техн.наук, доцент		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ11	Федецов Семен Юрьевич		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 2ДМ11		ФИО Федецов Семен Юрьевич	
Школа	Инженерная школа природных ресурсов	Отделение (НОЦ)	Отделение химической инженерии
Уровень образования	магистратура	Направление/специальность	18.04.01 Химическая технология

Тема ВКР:

Синтез силоксановых мономеров норборненового ряда и полимеров на их основе

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

Введение

- Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения.
- Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации

Объект исследования: дициклопентадиен, винилтриметоксисилан, аморфный диоксид кремния, ксилол.
Область применения: композиционный материалы.
Рабочая зона: лаборатория.
Размеры помещения: 15*10*4 м.
Количество и наименование оборудования рабочей зоны: печь муфельная, магнитная мешалка с подогревом, перемешивающее устройство, ультразвуковой диспергатор, термощкаф.
Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне: нагревание, химическое взаимодействие.

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при разработке проектного решения

- специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;
- организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.

«Трудовой кодекс Российской Федерации» от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. От 01.04.2019).
 ГОСТ 12.0.004-90. «Организация обучения безопасности труда».
 ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ «Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования»

2. Производственная безопасность при разработке проектного решения

- Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов
- Расчет уровня опасного или вредного производственного фактора

Вредные факторы:

1. производственные факторы, связанные с акустическими колебаниями в производственной среде и характеризующиеся повышенным уровнем ультразвуковых колебаний (воздушного и контактного ультразвука);
2. отсутствие или недостатки необходимого искусственного освещения;
3. вещества, обладающие избирательной токсичностью на органы-мишени и (или) системы при многократном или продолжительном воздействии;
4. вещества, вызывающие поражение (некроз/омертвление или раздражение) кожи;
5. вещества, вызывающие серьезные повреждения или раздражение глаз;

	6. вещества, представляющие опасность при аспирации; 7. производственные факторы, связанные с чрезмерно высокой температурой материальных объектов производственной среды, могущих вызвать ожоги тканей организма человека; 8. производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего. Опасные факторы: 1. движущиеся машины и механизмы; 2. производственные факторы, связанные с электрическим током, вызываемым разницей электрических потенциалов, под действие которого попадает работающий. Требуемые средства коллективной и индивидуальной защиты от выявленных факторов: ношение лабораторного огнестойкого халата, защитных очков, химически стойких перчаток, жаростойких рукавиц, работа в вытяжном шкафу, наличие устройства принудительной вентиляции воздуха. Произведён расчет системы искусственного освещения
3. Экологическая безопасность при разработке проектного решения	Воздействие на селитебную зону: вентиляционные выбросы паров летучих органических растворителей Воздействие на литосферу: твердые неперерабатываемые отходы Воздействие на гидросферу: загрязнение канализационных вод органическими веществами Воздействие на атмосферу: вентиляционные выбросы паров летучих органических растворителей
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при разработке проектного решения	Возможные ЧС: опасные метеорологические явления и процессы, аварии на коммунальных системах жизнеобеспечения, аварии с выбросом химически опасных веществ Наиболее типичная ЧС: опасные метеорологические явления и процессы (шквалы, сильные ливни, снегопады)
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	

Задание выдал консультант:

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

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
2ДМ11	Федецов Семен Юрьевич		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 96 с., 43 рис., 34 табл., 35 источников, 1 прил.

Ключевые слова: дициклопентадиен, катализатор Шрока-Граббса, циклопентадиен, реакция Дильса-Альдера, метатезисная полимеризация с раскрытием цикла.

Объектами исследования являются композиционные материалы на основе аморфного диоксида кремния, обработанного норборненовым производным дициклопентадиена и винилтриметоксисилана и полидициклопентадиена.

Цель работы – создание силоксановых мономеров норборненового ряда и полимеров и изучение их влияние на свойства полученных материалов

Область применения: конструкционные материалы корпусов машин и механизмов

Экономическая эффективность/значимость работы: рациональное использование побочных продуктов пиролиза.

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

В данной работе применены следующие обозначения и сокращения с соответствующими расшифровками:

RIM – reaction injection molding (реакционно-литьевое формование)

ROMP – ring-opening metathesis polymerisation (метатазисная полимеризация с открытием цикла).

ДЦПД – дициклопентадиен;

ПДЦПД – полидициклопентадиен;

ЦПД – циклопентадиен;

СОДЕРЖАНИЕ

РЕФЕРАТ	10
ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ	11
ВВЕДЕНИЕ	15
1 Литературный обзор.....	16
1.1 Кремнийорганические аппреты.....	16
1.2 Реакционная способность поверхности диоксида кремния	18
1.3 Метатезисная полимеризация с раскрытием цикла	19
1.4 Взаимодействие Дильса-Альдера	25
1.5 Получение композитов на основе полидициклопентадиена	26
1.6 Получение сополимеров	29
1.7 Получение ДЦПД	30
2 Объект и методы исследования	32
2.1 Используемые вещества	32
2.1.1 Винилтриметоксисилан	32
2.1.2 Дициклопентадиен.....	33
2.1.3 Аморфный диоксид кремния	34
2.1.4 Ксилол нефтяной	35
2.1.5 Натрий металлический технический	35
2.1.6 Нефтяной растворитель 80/120	36
2.1.7 Irganox 1010.....	36
2.1.8 Катализатор Широка-Граббса.....	36
2.1.9 Ацетон технический	37
2.1.10 Толуол	37
2.2 Используемые методики	38

2.2.1	Получение целевого норборненового производного.....	38
2.2.2	Подготовка дициклопентадиена к полимеризации.....	39
2.2.3	Получение обработанного диоксида кремния	40
2.2.4	Испытания на статический изгиб	41
2.2.5	Измерение прочности при растяжении	42
2.2.6	Проведение анализа набухания композитов	44
2.2.7	Получение композиционных материалов	44
3	Результаты и обсуждение	45
3.1	Получение норборненового производного	45
3.2	Обработка диоксида кремния	48
3.3	Получение композиционных материалов.	49
3.4	Определение физико-механических характеристик образцов.....	52
3.4.1	Испытание на статический изгиб	53
3.4.2	Испытание на растяжение	55
3.5	Оценка стойкости материалов к органическим растворителям.....	58
4	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	61
4.1	Предпроектный анализ.....	61
4.1.1	Оценочная карта	61
4.1.2	Мера готовности научной разработки и разработчика к коммерциализации	64
4.1.3	Выбор предпочтительного метода коммерциализации.....	65
4.2	Инициирование проекта.....	66
4.2.1	Цель и результаты проекта.....	66
4.2.2	Рабочая группа.....	67
4.2.3	Ограничения и допущения проекта.	67

4.3 Планирование управления научно-техническим проектом	68
4.3.1 Иерархическая структура работ проекта с индексами работ	68
4.3.2 План проекта	69
4.3.3 Бюджет научного исследования	71
4.3.4 Группировка затрат по статьям.....	75
4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	76
5 Социальная ответственность	79
5.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	79
5.2 Профессиональная социальная безопасность	80
5.3 Экологическая безопасность.....	87
5.3.1 Защита атмосферы.....	87
5.3.2 Защита гидросферы	87
5.3.3 Защита литосферы	88
5.3.4 Защита селитебной зоны	88
5.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	88
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	90
СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СТУДЕНТА	91
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	92
ПРИЛОЖЕНИЕ А	97

ВВЕДЕНИЕ

Продуктом полимеризации дициклопентадиена является сшитый полимер, обладающий высокой ударопрочностью при надрезе и обладающий свойствами, стойкими к высоким температурам и коррозии, а также высокой стойкостью по отношению к химическим веществам.

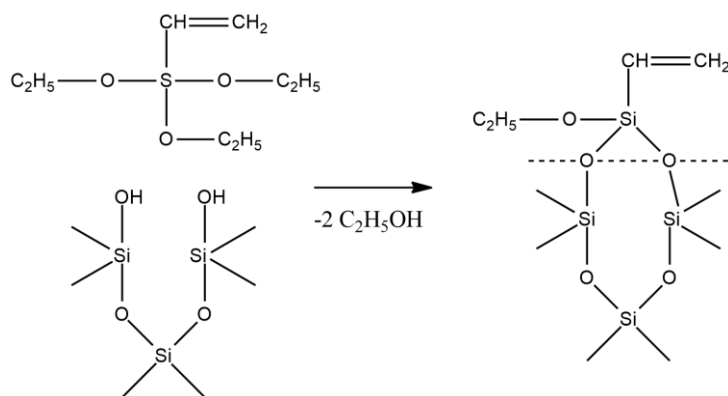
Кроме того, поверхность полимера быстро окисляется на воздухе, и, таким образом, образуется относительно полярная поверхность, которую можно легко окрашивать. ПДЦПД на основе метатезисной полимеризации используется, например, при производстве сельскохозяйственной техники, кузовных панелей и элементов для хлорно-щелочной промышленности или в нефтехимической промышленности для трубопроводов. ПДЦПД в основном обрабатывается с помощью реакционного литья под давлением (RIM), литья с переносом смолы (RTM) и вакуумного RTM (VTRTM). Эти методы позволяют изготавливать сложные и крупные детали быстрым и эффективным способом. Его сравнительно низкая плотность в сочетании с хорошими механическими свойствами делает его экологически выгодным для применения в автомобильной промышленности, где топливная эффективность является острой проблемой.

Новой областью применения ПДЦПД является его применение в области создания композиционных материалов. Однако необходимым условием для создания таких изделий является сродство полимерной матрицы к наполнителю, чтобы намеренно увеличить адгезию матрицы, наполнители не только подвергают физической обработке, но и аппретированию. Проблему создания аппретов способных к образованию ковалентных связей с матрицей и наполнителей для ПДЦД позволяют решить аппреты с функциональным норборненовым кольцом способным вступать в реакцию метатезисной полимеризации с раскрытием цикла.

1 Литературный обзор

1.1 Кремнийорганические аппреты

В производстве композитов наполнители из диоксида кремния изготавливаются в виде стеклотканей, стеклошариков и в виде дисперсных порошков. Обработка кремнийорганическими аппретами может снижать напряжение на границе раздела фаз, снижает напряжения, связанные разностью линейных коэффициентов теплового расширения. Для лучшего формирования межфазного слоя наполнители подвергают аппретированию. Аппретами считают полифункциональные вещества, которые могут взаимодействовать с полимерной матрицей во время её отверждения и с группами на поверхности наполнителя, например, SiOH- группами на поверхности диоксида кремния.



Взаимодействие полимерной матрицы было подтверждено с использованием инфракрасной спектроскопии частиц наполнителя отделённых от полимерной матрицы при помощи растворителя, результаты свидетельствовали о хемосорбции полимера на поверхности [1]. Лучшая смачиваемость наполнителя полимерной матрицей обеспечивает высокую адгезионную прочность обусловленной физической адсорбцией, будет превышать когезионную, однако наличие адсорбированной воды и других веществ негативно сказываются на адгезионной прочности.

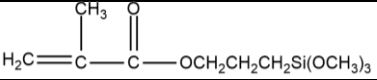
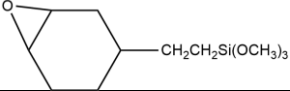
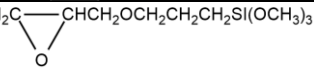
Взаимодействие аппретов с поверхностью наполнителя объясняют [2]:

- 1) удалением воды с поверхности стекловолокна;

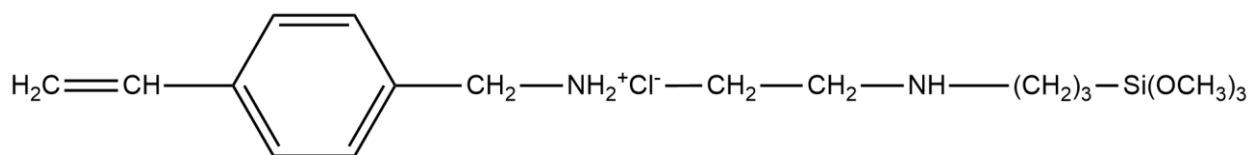
- 2) возникновением водородной или ковалентной связи с поверхностью стекловолокна;
- 3) устранение микротрещин наполнителя.

При подборе аппретов важно учитывать тип полимерной матрицы, так кремний органические аппретов в зависимости от органической функциональной группы имеют разное применение. Аппретов, содержащие винильные группы, сочетаются с ненасыщенными полиэфиром и полиолефинами, также существуют соединения, имеющие в своём составе эпоксидные группы (γ -глицидоксипропилтриметоксисилан, β -(3,4-эпоксидциклогексил) этилтриметоксисилан), для совмещения наполнителя с фенолформальдегидными смолами и полиамидами применяют аминоксодержащие аппретов (γ -аминопропилтриэтоксисилан) (таблица 1).

Таблица 1 — Промышленные аппретирующие силаны [2]

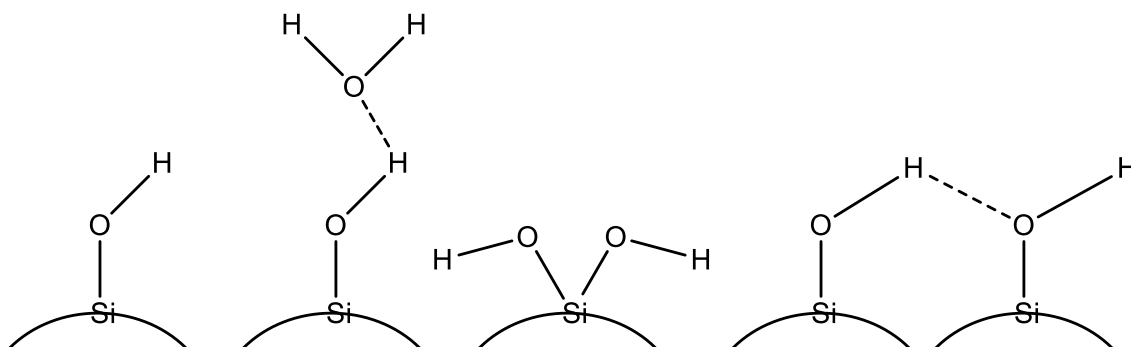
Химический состав	Структурная формула	Полимерные матрицы
винилтриэтоксисилан	$\text{H}_2\text{C}=\text{CHSi}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$	Полиэфиры, DAP, алкиды, полиэтилен, сшитый
винил-три (2-метоксиэтокси)силан	$\text{H}_2\text{C}=\text{CHSi}(\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3)_3$	полиэтилен, термореактивные
γ -метакрилоксипропил-триметоксисилан		полибутадиены, полипропилен, EPDM, EPM
γ -аминопропилтриэтоксисилан	$\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$	Фенольные, эпоксидные и меламиновые смолы,
N- β -(аминоэтил- γ -аминопропилтриметоксисилан)	$\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{NHCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Si}(\text{OCH}_3)_3$	полиамиды, полиимиды, поликарбонаты, полибензимидазолы, полиуретаны, EPDM, полихлоропрен, полинитрил
β -(3,4-эпоксидциклогексил)-этилтриметоксисилан		Эпоксидные и фенольные смолы, поливинилхлорид, циклоалифатические
γ -глицидоксипропилтриметоксисилан		эпоксидные смолы, полиуретаны, полимеры на основе эпихлоргидрина
γ -меркаптопропилтриметоксисилан	$\text{HSCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{Si}(\text{OCH}_3)_3$	EPDM, SBR, NR, полихлоропрен,
амилтриэтоксисилан	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_3$	полисульфиды, поливинилхлорид, полимеры на основе эпихлоргидрина

Также существуют универсальные вещества, которые могут в себе нести несколько групп: аминную, винильную, фенильную группы [3].



1.2 Реакционная способность поверхности диоксида кремния

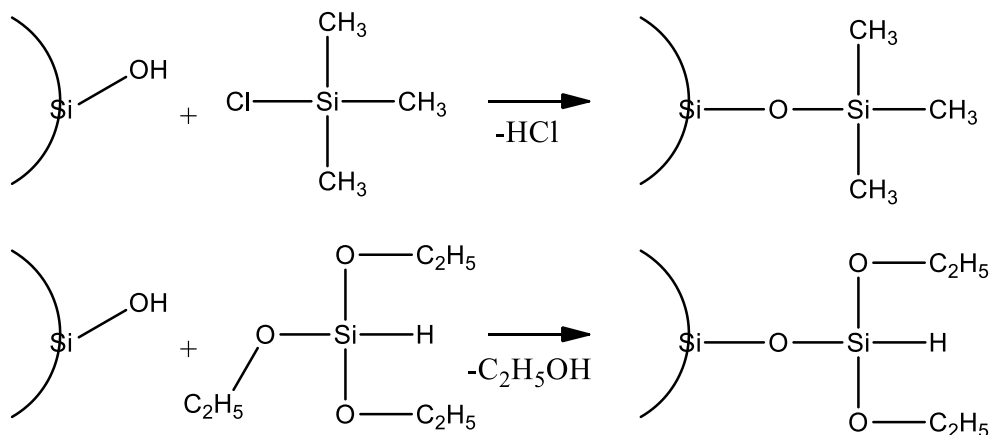
На поверхности диоксида кремния реакционноспособные группы представлены следующим образом (рисунок 1) [4]:



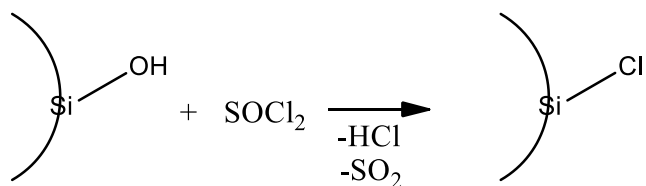
- а) свободная ОН-группа; б) связанная ОН-группа; в) гемеинальная ОН-группа;
г) реакционноспособная ОН-группа

Рисунок 1 — Группы на поверхности кремнезёма

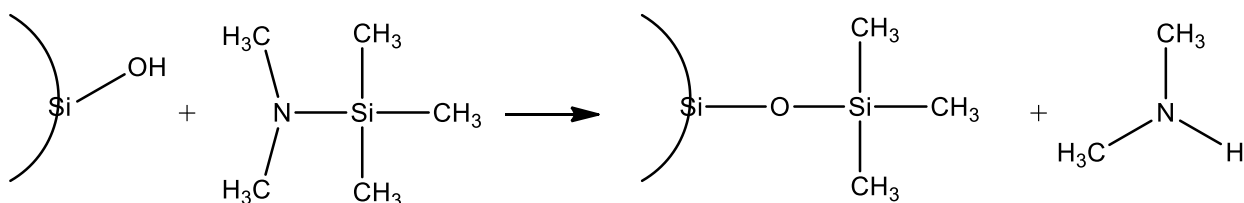
Силанольные группы на поверхности аэросила с удельной площадью поверхности не более 600 м²/г могут вступать в реакции с метокси-, этоксильными группами и хлорсиланами [5].



Возможно хлорирование хлористым тионилем с образованием Si-Cl групп.



При комнатных температурах также взаимодействуют с триметил-(диметиламино) силаном.



Достаточная разрозненность SiOH групп позволяет прививать практически любые якорные группы.

Для обеспечения максимальной активности силанольных групп кремнезём необходимо прогреть до $400 \div 600$ °С для удаления связанной воды с его поверхности. Так физически адсорбированные молекулы воды удаляются с поверхности от 25 °С в вакууме или при атмосферном давлении начиная со 120 °С. Если кремнезём обладает мелкопористой структурой, то температура может достигать 180 °С. Хемосорбированная вода начинает отделяться в интервале температур от 200 до 800 °С [4].

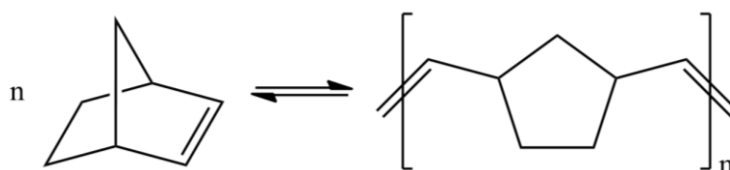
1.3 Метатезисная полимеризация с раскрытием цикла

Метатезисные реакции разделяют на несколько видов [6]:

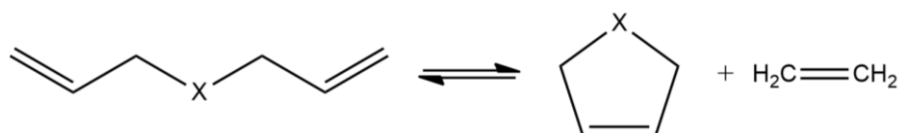
1) диспропорционирование;



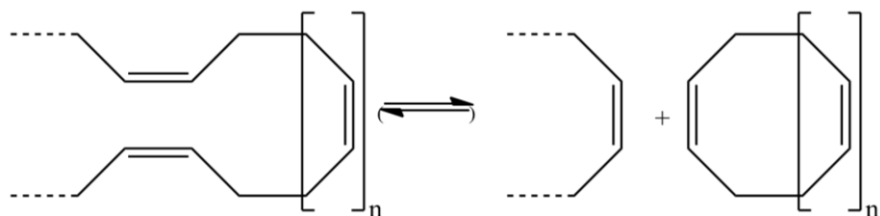
2) метатезисная полимеризация с раскрытием цикла;



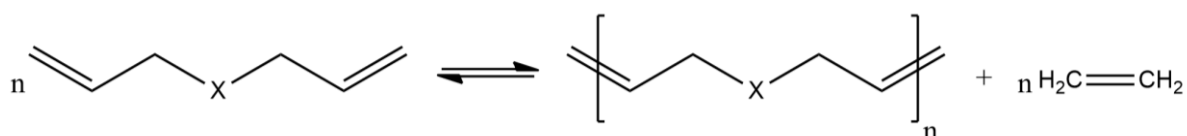
3) метатезис с замыканием кольца;



4) деградация ненасыщенного полимера;



5) ациклический диеновый метатезис.



Метатезис олефинов быстро стал одним из наиболее широко используемых методов образования углерод-углеродной связи формирование в органическом синтезе. Катализаторы метатезиса, известные как катализаторы Шрока-Граббса, успешно применяется во многих областях исследований и также в области ациклического диенового метатезиса и метатезисной полимеризацией с открытием кольца.

Этот тип полимеризации инициируется и распространяется металлокарбеновыми комплексами и металациклобутановыми комплексами, как показано на рисунке 2. Эта реакция обратима, и обратные реакции могут приводить как к циклическим олигомерам, так и обратно к исходному мономеру [7].

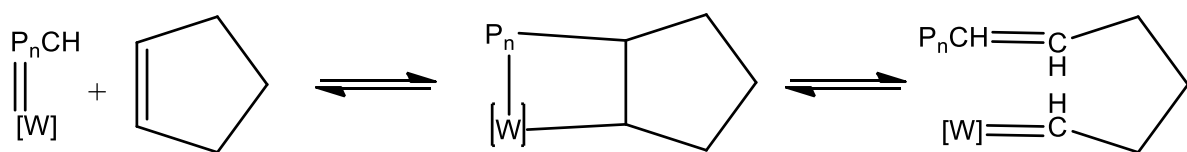


Рисунок 2 — Взаимодействие катализатора с мономером

Для норборнена и его производных раскрытие бициклических структур приводит к значительному ослаблению кольцевой деформации, когда в процессе полимеризации расщепляется двойная связь, и мономеры полимеризуются с высокой степенью конверсии. Реакция метатезиса двойных связей в исходных мономерах гораздо менее термодинамически благоприятна (рисунок 3), но в конечном итоге может привести к образованию сшитых полимеров.

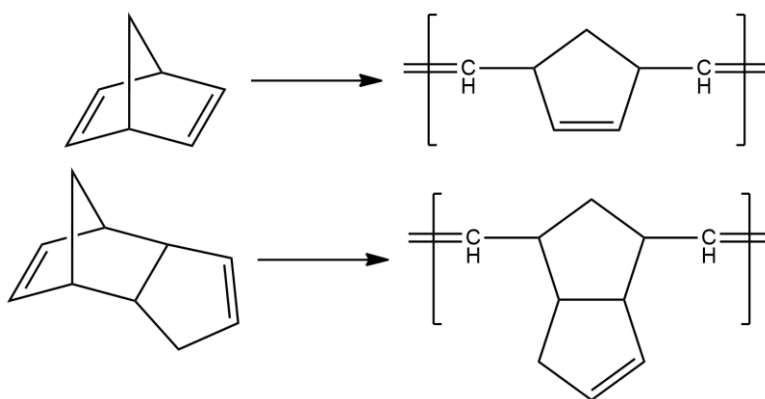
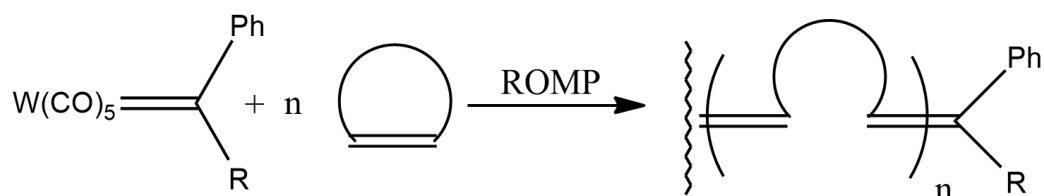


Рисунок 3 — Раскрытие кольца при метатезисной полимеризации

Первым применением четко определенного инициатора было использование карбенов фишеровского типа, полученных Кейси и Буркхардтом, для полимеризации напряженных олефинов, таких как норборнен и циклобутены.



Эти системы плохо контролируют молекулярную массу, но демонстрируют некоторые характеристики живой полимеризации, такие как способность получать блочные полимеры и включение нечетко определенного фрагмента инициатора в полученный полимер.

Следующим этапом в развитии полимеризации по метатезисному типу стало использование титаноценметиленового комплекса. Поскольку метатезис является обратимой реакцией, мономеры должны быть выбраны таким образом, чтобы мономер был более реакционноспособным, чем двойная связь в полимере.

Если это не так, полимер будет конкурировать с мономером за реакцию передачи цепи и приведет к реакции переноса цепи. Поэтому, в большинстве случаев использовался норборнен и его производные.

Высокоактивные катализаторы метатезиса на основе вольфрама, которые были в центре внимания этого исследования, открыли следующую главу в метатезисной полимеризации. Высокая активность этих систем потребовала разработки дополнительных методов контроля за полимеризацией. Если катализаторы были слишком активны, то реакции обрыва и передачи цепи разрушали жизнеспособность систем.

Было обнаружено, что активностью этих вольфрамовых систем можно управлять с помощью структуры алкокси-лигандов. Комплекс гексафтор-трет-бутанола был гораздо более активным, чем комплекс трет-бутоксидила. Менее активный комплекс давал меньшую полидисперсность, поскольку более активный комплекс вступал в реакцию с полимером, конкурируя с мономером. Кроме того, более низкая активность катализатора привела к гораздо лучшему балансу скоростей инициирования и молекулярно-массового распределения конечного полимера.

В отличие от систем на основе Mo и W, где электроноакцепторные группы повышали активность катализаторов, в системах с рутением было обнаружено, что добавление более богатого электронами трициклогексилфосфина к исходным комплексам трифенилфосфина приводило к образованию гораздо более реакционноспособного комплекса.

В результате изучения более богатых электронами лигандов было разработано семейство N-мезитильных N-гетероциклических карбеновых комплексов. Эти комплексы, по-видимому, действуют по тому же основному механизму, что и бисфосфиновые комплексы, с более медленной стадией инициации и более быстрым распространением.

Инициаторы Граббса первого поколения основаны на фосфинах, в то время как инициаторы Граббса второго поколения содержат как N-гетероциклический карбен (NHC), так и фосфин. Наконец, инициаторы Граббса третьего поколения содержат один NHC и один или два замещенных пиридина. Другим прорывом в области каталитической активности стала разработка инициаторов типа Граббса с внутренним хелатированным кислородом алкилиденем рутения (рисунок 4). Их обычно относят к катализаторам Ховейды-Граббса, они обладают выраженной стабильностью и долговечностью [8].

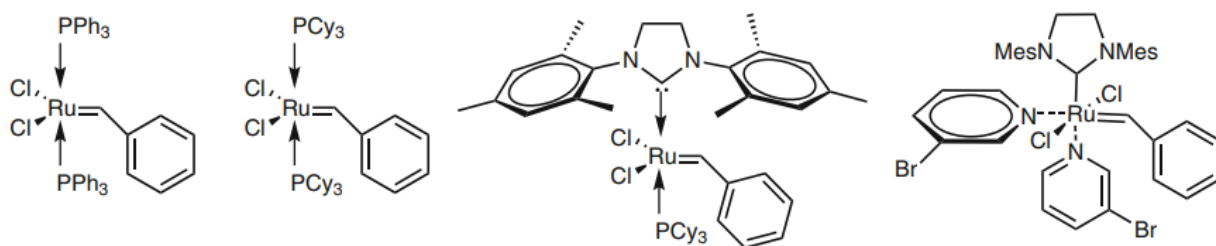
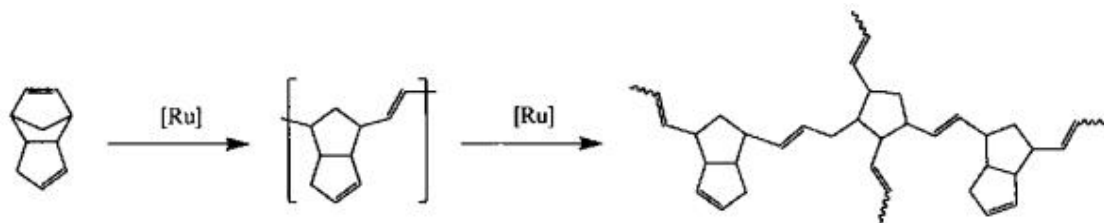


Рисунок 4 — Катализаторы Шрока-Граббса

В промышленности преобладает получение полимерных материалов, основанных на метатезисной полимеризации с открытием цикла с получением полидициклопентадиена, полициклопентена и полициклооктена [9]:



Движущей силой метатезисной полимеризации с размыканием кольца является размыкание напряженного кольца. Так основными мономерами для данного типа полимеризации являются норборнены, однако полимеры после полимеризации имеют двойные связи, их устойчивость поэтому к атмосферному кислороду снижена.

При полимеризации ДЦПД во многих случаях и при большинстве условий образуется сшитый нерастворимый материал. Возможны три реакции сшивания. Наиболее вероятным является метатезис раскрытия кольца второй, менее реакционноспособной двойной связи, приводящий к сшиванию полимера. Этот

механизм работает уже при низкой температуре. Второй возможностью является добавление олефинов, которое скорее происходит при повышенных температурах. Третий вариант – это окислительное сшивание, которое происходит при старении ПДЦПД на воздухе. Усиление сшивания обычно отражается в более высоких температурах стеклования, которые обычно варьируются от 140 до 165 °С (для сшитых версий).

Сшивание является основным фактором, определяющим механические свойства материала. При изменении плотности сшивания ПДЦПД путем сополимеризации удлинителей цепи или сшивающих элементов было исследовано влияние сшивок на механические свойства. Типичные механические свойства ПДЦПД включают модуль Юнга в диапазоне 1,6 ÷ 2,0 ГПа, напряжение при растяжении при пределе текучести около 35 ÷ 70 МПа и удлинение при разрыве от 5 ÷ 100 %. В отличие от других термореактивных материалов, таких как эпоксидные смолы, ПДЦПД не обладает сильными нековалентными взаимодействиями, и, таким образом, сшивание происходит только за счет ковалентных связей. Это является причиной выраженной пластичности ПДЦПД по сравнению с эпоксидными смолами (с аналогичной температурой стеклования). Пластичность приводит к высокой ударной вязкости и замечательным ударным характеристикам ПДЦПД. Пластичность сохраняется даже при температуре -195 °С. При более глубоком изучении эти благоприятные свойства объясняются легкой пластической деформацией и образованием пустот наноразмерного размера, которые приспособляются к деформации. Выбор инициатора (вместе с условиями обработки) определяет не только степень сшивания, но и микроструктуру полимерной основы.

Литье с переносом смолы и вакуумная инфузия являются наиболее часто используемыми методами получения композитов из ПДЦПД. ПДЦПД является интересной альтернативой традиционным эпоксидным и фенолформальдегидным смолам по двум основным причинам. Во-первых, вязкость типичной смолы на основе ДЦПД аналогична вязкости воды и намного

ниже, чем у обычных смол. Таким образом, пропитка волокнистых матов, особенно при изготовлении больших деталей, требует меньше энергии и времени. Во-вторых, матрица ПДЦПД менее хрупкая, чем многие другие матрицы аналогичной прочности, что обеспечивает отличительную ударопрочность [10].

1.4 Взаимодействие Дильса-Альдера

Реакция Дильса-Альдера является одной из общего класса реакций циклоприсоединения, которая включает также реакции 1,3-дипольного циклоприсоединения и 1,4- циклоприсоединения.

Полезность реакции Дильса-Альдера в синтезе обусловлена ее универсальностью и высокой регио- и стереоселективностью. Может быть использовано большое разнообразие диенов и диенофилов, содержащих различные функциональные группы, и создано множество различных типов кольцевых структур (рисунок 5).

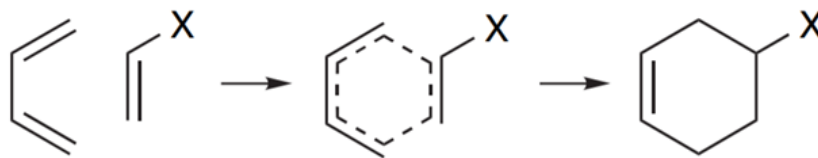
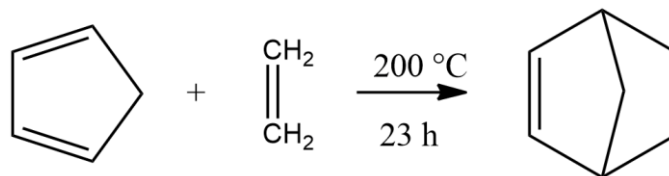


Рисунок 5 — Реакция Дильса-Альдера

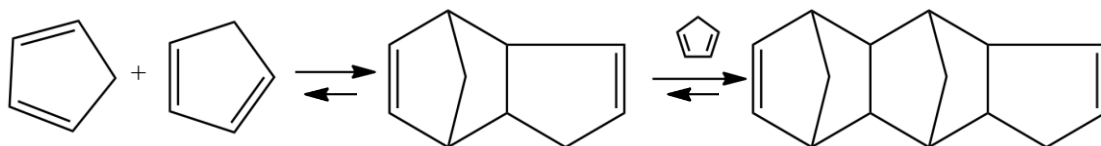
Не все атомы, участвующие в замыкании кольца, должны быть атомами углерода, так что с помощью реакции можно получить как карбоциклические, так и гетероциклические кольца [11].

В реакции Дильса-Альдера присутствует диенофил и диен. Не все диенофилы реагируют одинаково легко; реакционная способность зависит от структуры. Акцепторных заместители в двойной или тройной связи увеличивают реакционную способность диенофила. Акриловые эфиры и нитрилы, ацетиленовые эфиры, а также ненасыщенные кетоны и хиноны являются типичными диенофилами.

Одними из самых реакционных соединений являются цикlopentadiены, они проявляют свойства диенофила и диена. При повышенной температуре они реагируют с малоактивными диенофилами: винилхлорид, винилацетат, аллиловый спирт, а в жёстких с этиленом, пропиленом [12]:



В промышленности реакцию Дильса-Альдера применяют при изготовлении фармацевтических препаратов, инсектицидов, может применяться в процессе сшивания предварительно дегидрофторированных сополимеров винилиденфторида и гексафторпропилена с диаминами.



На основе реакции Дильса-Альдера основано извлечение цикlopentadiена из продуктов пиролиза так как цикlopentadiен является и диенофилом, и диеном одновременно, его димеризуют в присутствии других летучих компонентов и на основании высокой температуры кипения ДЦПД отделяют, полученный ДЦПД затем обратно разлагают с получением цикlopentadiена, для отделения от высококипящих фракций.

1.5 Получение композитов на основе полидициклопентадиена

Существует способ получения композиционного материала на основе дициклопентадиена и стеклянных микросфер. Композиты получают путём смешения мономера, кремнийорганического аппрета (винилтриметоксисилана, 3-аминопропилтриэтоксисилана, 5-триалкоксисилил-2-норборнена) и стабилизатора, например, ионола, затем добавляются микросферы. Смесь выдерживают при температурах от 50 до 220 °C в течение 15 ÷ 360 минут в инертной атмосфере, после нагревания в смесь вводят инициатор радикальной полимеризации: ди-трет-бутилпероксид или трифенилметан, а также

катализатор метатезисной полимеризации на основе рутения, который растворяют в эфире метакриловой кислоты (глицидилметакрилат, этилендиметакрилат). Полученную смесь доводят до $50 \div 340$ °С и выдерживают до 360 минут. Концентрации компонентов представлены в таблице 2.

Таблица 2 — Концентрация компонентов композита ПДЦПД + стеклянные микросферы

Компонент	Концентрация, масс %
Органосилан	$0,2 \div 3,0$
Стабилизатор	$0,1 \div 3,0$
Радикальный инициатор	$0,1 \div 4,0$
Эфир метакриловой кислоты	$0,3 \div 25$
Катализатор Широка-Граббса	$0,001 \div 0,02$
ДЦПД	$1,0 \div 60,0$
Стеклянные микросферы	остальное

В результате происходит взаимодействие аппрета с поверхностью микросфер и сшивка смеси олигоциклопентадиенов с метакриловыми эфирами. Недостатком данного метода для использования в исследовательской работе, является отсутствие подготовки поверхности стеклянных микросфер и применения радикального инициатора [13].

Существует разработка композиционного материала на основе ПДЦПД и стеклоткани, полиэфирной ткани и рубленного стеклянного волокна. В качестве полимерной матрицы использована смесь мономеров из дициклопентадиена (75 %) и эндо,экзо-2,3-дикарбометокси-5-норборнена (25 %), концентрация катализатора составила 0,01 % от мономерной фазы. В данной работе методом вакуумной инфузии на наполнитель наносили предварительно нагретую мономерную фазу, смешанную с растворённым в толуоле катализатором до 40 °С. После пропитывания алюминиевую матрицу нагревали до 90 °С, время полимеризации составило 30 минут. В работе не был использован кремнийорганический аппрет, при полимеризации только ДЦПД отмечалось

плохая смачиваемость волокон, поэтому для повышения адгезии работе применяли эндо,экзо-2,3-дикарбометокси-5-норборнена с целью увеличения адгезии полимерной матрицы к наполнителю [14].

В работе [15] авторы получали армированный ДЦПД с рубленым стекловолокном, обработку волокон проводили норборненовым производным (рисунок 6).

Обработку силаном (рисунок 6) проводили после сушки стекловолокна при 200 °С в течение 24 часов для удаления влаги и загрязнений с поверхности. Специальным раствором для обработки поверхности была смесь силана, этанола и уксусной кислоты, смешанных в массовом соотношении 5:4:1. Обработывающий раствор добавляли к стекловолкну в массовом соотношении 100:1.

Обработанные стекловолокна использовались после дополнительной сушки в течение 4 часов при 140°С. Используемый аппарат был приобретён в компании Gelest inc.

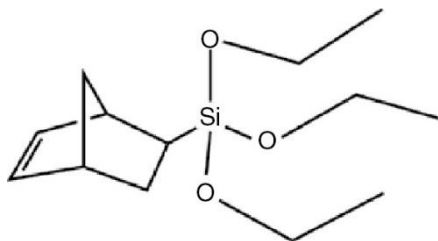


Рисунок 6 — Структурная форма используемого силана с норборненовой группой

Композиты были получены методом S-RIM литья (рисунок 7).

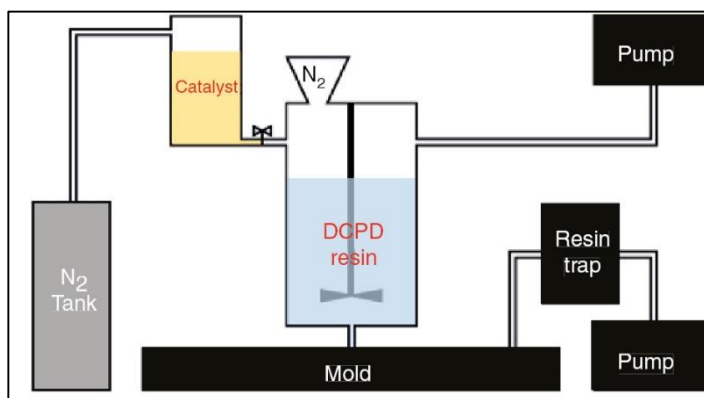


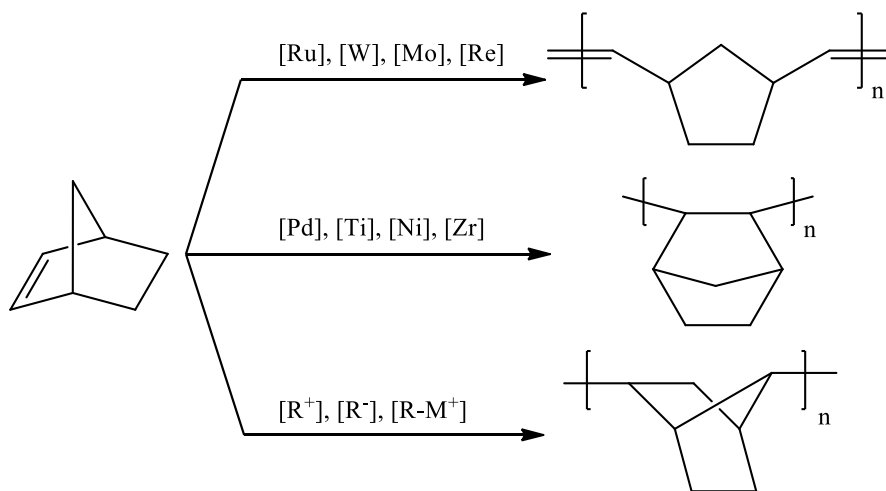
Рисунок 7 — Принципиальная схема оборудования [15]

Результатом данной работы является установление повышенной прочности на сдвиг, обусловленной взаимодействием между силаном и поверхностью стекловолокна. После поверхностной обработки на поверхности стекловолокна закрепилась группа норборнена. Когда ДЦПД полимеризовался с помощью катализатора, реакция на поверхности также происходила и с норборненовой частью. В результате удалось значительно улучшить межфазную адгезию между волокнами и смолой.

1.6 Получение сополимеров

Норборнен и его производные обладают высоким циклическим конформационным напряжением, вследствие чего их двойная связь является весьма реакционноспособной. Легко вступает в реакцию полимеризации, трёх разных типов [6]:

- 1) метатезисная полимеризация с раскрытием цикла (ROMP);
- 2) винтовая (аддитивная) полимеризация;
- 3) изомеризационная (катионная, радикальная) полимеризация.



Для сополимеризации дициклопентадиена по метатезисному механизму с раскрытием кольца применяют производные норборнена. В работе [16] получали сополимер ДЦПД и диметилового эфира норборнен-2,3-дикарбоновой кислоты. Особенностью данного сомономера является линейная структура полученного полимера со степенью конверсии более 98 %, а физико-механические близки к

ПДЦПД. Результатом работы было получение сополимеров, установление оптимального температурного режима для сополимеризации (нагрев от 60 до 120 °С, время полимеризации 90 мин).

В другой работе [17] были получены сополимеры дициклопентадиена и 5-этилиден-2-норборнена, а также гомополимеры. Массовые соотношения 5-этилиден-2-норборнена и ДЦПД в смесях были 0/100, 5/95, 10/90, 20/80, 40/60, 60/40, 80/20 и 100/0 соответственно. Особенностью работы является высокотемпературная полимеризация при 200 ÷ 250 °С в течение трёх часов, авторы утверждают, что такой температурный режим способствует получению лучших прочностных результатов. Подтверждение сополимеризации осуществляли ИК-спектроскопии.

1.7 Получение ДЦПД

В промышленном количестве ЦПД и ДЦПД первоначально извлекали из бензольных фракций, образующихся в коксохимическом производстве, однако не смотря на высокую степень извлечения, количество получаемого ДЦПД недостаточно, поэтому основным способом получения стало извлечение ЦПД из жидких продуктов пиролиза. В которых эти соединения присутствуют и в виде мономера, и в виде димера. Качественная переработка пиролизных фракций повышает экономичность производства мономеров (этилена, пропилена).

Извлечение цикло- и дициклопентадиена основывается на способности мономера к димеризации и содимеризации его с ациклическими углеводородами $C_4 \div C_6$ и на обратимости данных реакций, что позволяет отделять их от углеводородов, кипящих в том же температурном диапазоне.

Выделение начинается с поступления C_5 фракции в реактор димеризации, где при температуре 110 ÷ 135 °С ЦПД начинал превращаться в ДЦПД, после удаления высококипящих компонентов смесь, обогащённая ДЦПД может подвергаться разложению, и повторной димеризации и ректификации с целью

очистки ДЦПД от образованных в процессе побочных продуктов, что позволяет применять более широкие фракции углеводородов.

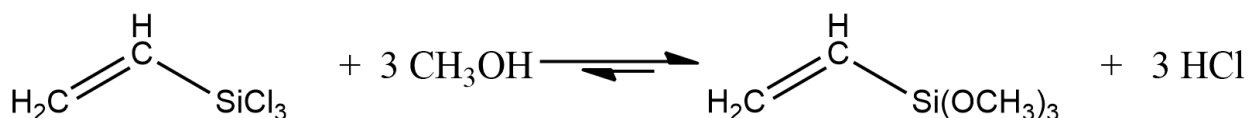
Разложение димеров проводят термическим путём, которое может быть проведено в жидкой или в паровых фазах. Разложение в жидкой фазе сопровождается высоким смолообразованием, поэтому его проводят в органической высококипящей жидкости, которая выполняет роль не только разбавителя, но и теплоносителя, также она облегчает процесс ректификации и увеличивает выход мономеров. Разложение ДЦПД в паровой фазе смол образуется меньше, процесс также протекает в среде инертных разбавителей (метан, водяной пар) [18].

2 Объект и методы исследования

2.1 Используемые вещества

2.1.1 Винилтриметоксисилан

Винилтриметоксисилан (ВТМС) — бесцветная низковязкая с характерным сильным запахом. ВТМС получают парофазной этерификацией винилхлорсилана метанолом при температуре $50 \div 80\text{ }^{\circ}\text{C}$ [19].

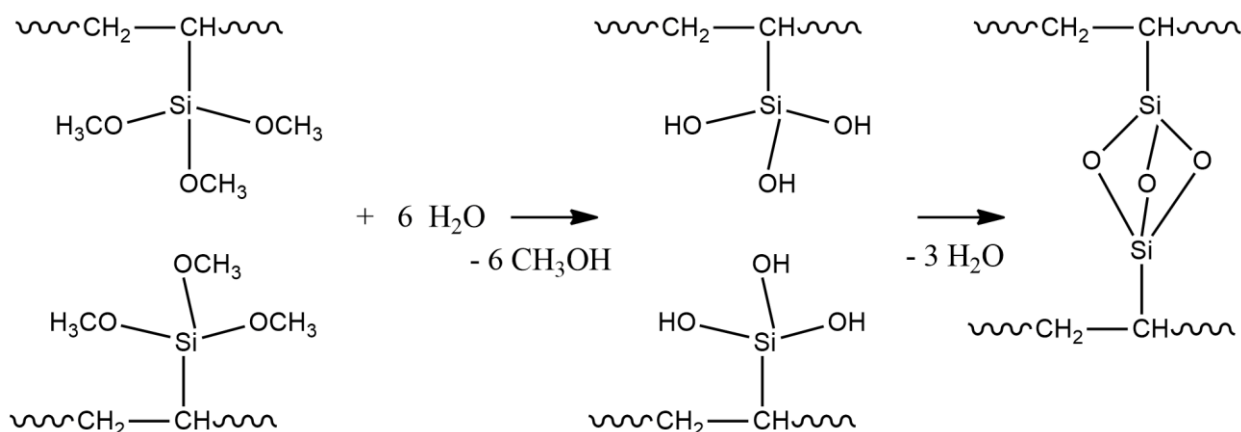


Физические свойства ВТМС перечислены в таблице 3.

Таблица 3 — Физические свойства ВТМС [20]

Температура плавления, $^{\circ}\text{C}$	$<-40\text{ }^{\circ}\text{C}$
Температура кипения, $^{\circ}\text{C}$	122-124
Плотность, г/см^3	0,97
Коэффициент преломления	1,392
Молекулярная масса	148,23

ВТМС является бифункциональным соединением, по двойной связи вступает в реакции радикальной сополимеризации с этиленом, пропиленом, бутиленом, а благодаря силанольным группам в реакцию гидролиза, что образует в сополимере сшитые структуры:



Силанольное сшивание увеличивает термостойкость полимера, а также его физико-механические свойства. Сшивание проводят в паровых банях при $80 \div 100$ °С.

2.1.2 Дициклопентадиен

Дициклопентадиен в чистом виде является твёрдым кристаллическим веществом с резким камфорным запахом. Его получают как побочный продукт пиролиза прямогонного бензина, газойля, этана, пропана в процессах синтеза этилена и пропилена [21].

Пары вызывают раздражение глаз и дыхательной системы. Подвержен полимеризации при длительном нагревании или загрязнении. Если полимеризация происходит внутри ёмкости для хранения, контейнер может разорваться. Стабилизируется бутилированным гидрокситолуолом в концентрации (0,05 % масс.) Нерастворим в воде. Используется в красках, лаках, в качестве промежуточного продукта в инсектицидах, в качестве антипирена в пластмассах. Хорошо растворим в этиловом эфире, этаноле, легко растворяется в ацетоне, дихлорметане, этилацетате, н-гексане и толуоле.

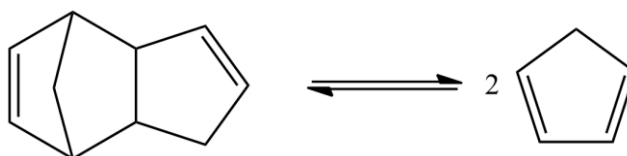
Физические свойства дициклопентадиена приведены в таблице 4.

Таблица 4 — Физические свойства ДЦПД [22]

Температура плавления	32,5
Температура кипения, °С	170
Плотность, г/см ³	0,975
Коэффициент преломления	1,51
Молекулярная масса	132,20

Дициклопентадиен — димерная форма циклопентадиена, который при комнатной температуре вступает в реакцию Дильса-Альдера, однако при высоких температурах (170 °С) равновесие смещается в сторону разложения:

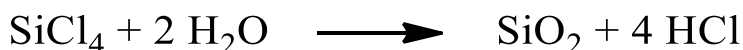
Дициклопентадиен активно используется в высокомолекулярной химической промышленности, изделия из полидициклопентадиена (ПДЦПД) отличаются высокой твёрдостью и прочностью при низкой плотности и низких температурах, кроме того полимер достаточно инертен к воздействию кислот и щелочей, также его используют в составе этилен-пропилен-диеновых каучуков, как производное норборнена.



2.1.3 Аморфный диоксид кремния

Аморфный диоксид кремния является глиссантом и антислеживательной добавкой для порошков, применяется для стабилизации суспензий и эмульсий, обладает высокими абсорбирующими свойствами. Двуокись кремния в аморфном виде применяется в нефтеперерабатывающей, нефтехимической промышленности. Высокодисперсный кремнезём в составе каучуков способствует улучшению их тепло- и температуростойкости [23].

Основным способом получения аморфного диоксида кремния является гидролиз тетрахлорсилана.



В таблице 5 приведены свойства используемого коллоидного диоксидного кремния марки А-175.

Таблица 5 — Характеристики аморфного диоксида кремния А-175 [24]

Наименование показателя	Значение нормы
Насыпная плотность, г/л:	
неуплотнённого	40 ÷ 60
уплотнённого	120 ÷ 140
Потери в массе при прокаливании, %, не более	1 ÷ 2
Удельная поверхность, м ² /г	175 ± 25

2.1.4 Ксилол нефтяной

Нефтяной ксилол — жидкость, состоящая из смеси изомеров ксилола: орто-, пара-, мета-диметилбензола и этилбензола. Используется в качестве растворителя для лаков и красок и обезжиривающего агента, применяется при производстве полимерных изделий, фенолформальдегидных смол.

Прямой контакт с кожей и слизистыми вызывает раздражение, а его пары при высоких концентрациях обладают наркотическим эффектом и угнетающе воздействуют на нервную систему.

Таблица 6 — Основные физические свойства нефтяного ксилола [25]

Свойство	Значение
Плотность, г/см ³	0,860 ÷ 0,870
Температура кипения, °С	не ниже 137
Молекулярная масса, г/моль	106,17

2.1.5 Натрий металлический технический

Натрий металлический — мягкий металл серебристого цвета, может обладать бледно-розовым оттенком, быстро окисляется на воздухе. При контакте с водой интенсивно окисляется с выделением водорода и большого количества тепла, способного вызвать взрыв смеси выделяемого газа и кислорода. Хранится в герметичной металлической таре, заполненной обезвоженным минеральным маслом [26].

Таблица 7 — Основные физические свойства нефтяного ксилола [27]

Свойство	Значение
Плотность, г/см ³	0,968
Температура плавления, °С	97,82
Молекулярная масса, г/моль	22,99

2.1.6 Нефтяной растворитель 80/120

Нефтяной растворитель или нефрас — деароматизированная бензиновая фракция растворителей резиновой промышленности, представляющие собой легкокипящую жидкость. Обладает наркотическим действием, негативно воздействует на нервную систему, прямой контакт с кожными покровами влечёт появление дерматитов и экзем.

Таблица 8 — Основные физические свойства нефтяного растворителя 80/120 [28]

Свойство	Значение
Плотность, г/см ³	0,700 ÷ 0,730
Температура начала перегонки, °С	80,0
Остаток после перегонки при 120 °С, %	не более 1,5

2.1.7 Irganox 1010

Irganox 1010 представляет из себя стерически затрудненный фенольный антиоксидантный стабилизатор, защищает органические вещества от термоокислительной деструкции. Добавляется в полиуретаны, гомо- и сополимеры стирола, каучуки. Не обладает запахом, практически не летуч. Хорошо растворим в ацетоне, хлороформе, этилацетате, дихлорметане [29].

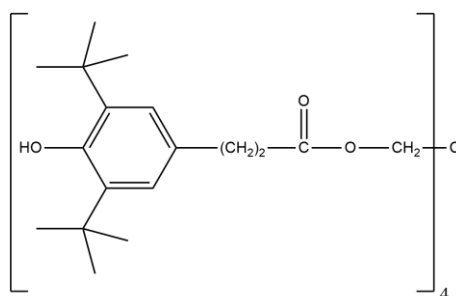


Рисунок 8 — Структурная формула Irganox 1010

2.1.8 Катализатор Шрока-Граббса

Катализатором метатезисной полимеризации дициклопентадиена использован карбеновый комплекс 1-(1,3-бис-(2,4,6-триметилфенил)-2-

имидазолидинилен) дихлоро(орто-N,N-диметиламинометилфенилметиле) рутения (рисунок 9). Растворение катализатора проводили в толуоле.

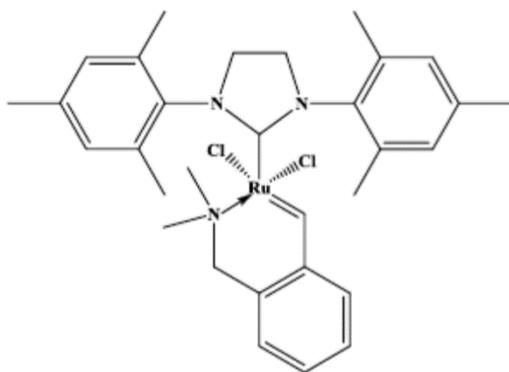


Рисунок 9 — Структурная формула катализатора

2.1.9 Ацетон технический

Ацетон выглядит как прозрачная бесцветная жидкость со сладковатым запахом. Основные физические свойства технического ацетона представлены в таблице 9. Пары тяжелее воздуха. Используется в качестве промышленного и бытового растворителя. Смешивается с водой, спиртом, эфиром, хлороформом и большинством стойких масел [30].

Таблица 9 — Основные физические свойства технического ацетона [31].

Свойство	Значение
Плотность, г/см ³	0,789 ÷ 0,792
Температура кипения, °С	56,08
Молекулярная масса	58,08

2.1.10 Толуол

Толуол выглядит как прозрачная бесцветная жидкость с характерным ароматическим запахом, основные физические свойства приведены в таблице 10.

Применяется в качестве добавок к бензину и авиационному топливу для увеличения октанового числа. Растворитель для красок и покрытий, смол, большинства масел и каучуков. Растворим в этаноле, бензоле, диэтиловом эфире, ацетоне, хлороформе, ледяной уксусной кислоте и сероуглероде. Пары

раздражают глаза и верхние дыхательные пути, вызывают головокружение, головную боль, анестезию, остановку дыхания. Жидкость раздражает глаза и вызывает пересыхание кожи [32].

Таблица 10 — Основные физические свойства толуола [33]

Свойство	Значение
Плотность, г/см ³	0,862
Температура кипения, °С	110,6
Молекулярная масса	92,14

2.2 Используемые методики

2.2.1 Получение целевого норборненвого производного

Для получения модификатора использовали взаимодействие ДЦПД и ВТМС, в исходную смесь была внесена добавка антиоксиданта фенольного типа: «Ирганокс 1010» в размере 0,2 % от всей реакционной массы.

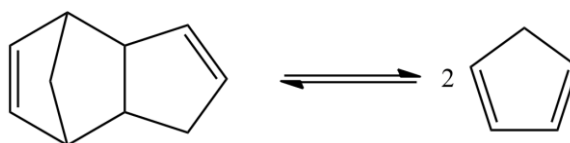
Реакция взаимодействия ДЦПД и ВТМС проводилась при следующих условиях:

- 1) запаянные стеклянные ампулы;
- 2) температура 190 °С;
- 3) мольное соотношение ВТМС к ДЦПД 1:0,55;
- 4) время реакции: 24 часа.

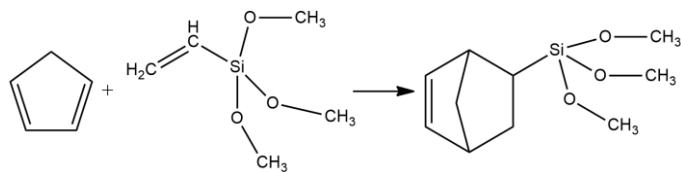
Реакция проводилась в масляной бане при ручном перемешивании (встряхивании).

Получение норборнен-2-ил-триметоксисилана протекает в две стадии:

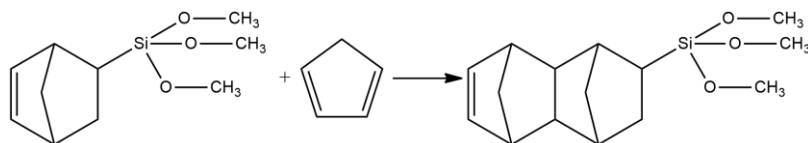
- 1) разложение дициклопентадиена на циклопентадиен;



2) присоединение ВТМС к ДЦПД по реакции циклоприсоединения;



Возможно протекание побочных реакций с образованием двойного цикла:

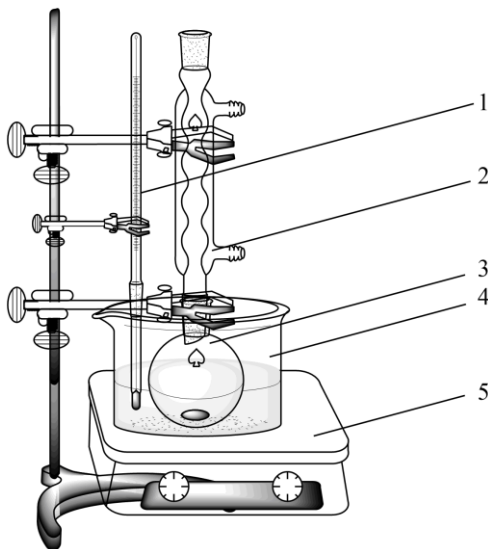


2.2.2 Подготовка дициклопентадиена к полимеризации

При хранении дициклопентадиен подвергается окислению и образованию смолистых соединений. Данные процессы негативно сказываются на полимеризационной активности ДЦПД. Очистка ДЦПД проводилась в два этапа:

- 1) Кипячение дициклопентадиена с металлическим натрием при температуре $100 \div 110^\circ\text{C}$.

Конструкция установки для очистки ДЦПД приведена на рисунке 10. Обработка проводилась в течение четырёх часов при постоянном перемешивании, концентрация металлического натрия составила 0,1 % от массы загружаемого дициклопентадиена.



1 – термометр; 2 – обратный холодильник; 3 – колба с ДЦПД, натрием и магнитной мешалкой; 4 – масляная баня; 5 – магнитная мешалка с подогревом;

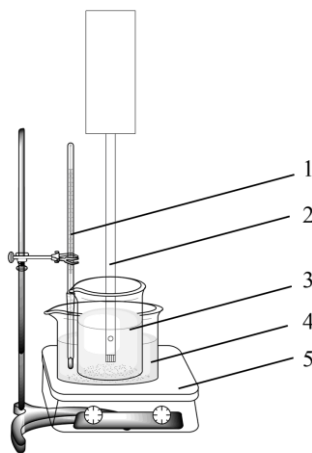
Рисунок 10— Установка очистки ДЦПД

2) Вакуумная перегонка.

Вакуумная перегонка осуществлялась в роторном испарителе при температуре $90 \div 100$ °С и давлении 50 мбар. Чистоту полученного ДЦПД определяли методом ГХМС. Остатки металлического натрия нейтрализовали этиловым спиртом.

2.2.3 Получение обработанного диоксида кремния

Аморфный диоксид кремния предварительно подвергался выдержке при 550 °С в течение четырёх часов в муфельной печи. Обработка норборненовым производным происходила в среде ксилола при концентрации модификатора 5 и 10 % от массы аэросила в течение четырёх часов при температуре 110 °С при интенсивном перемешивании ($7000 \div 8000$ об/мин).



1 – термометр; 2 – мешалка; 3 – стакан с реакционной массой; 4 – масляная баня; 5 – плита

Рисунок 11 — Схема установки получения модифицированного SiO_2

После обработки полученная суспензия отфильтровывалась, влажный диоксид кремния подвергался сушке при 140 °С в печи под вытяжной вентиляцией в течение двух часов. Полученный продукт вручную перемалывался и подвергался дальнейшей сушке до исчезновения голубого оттенка и постоянной массы. Реакция, протекавшая при обработке приведена на рисунке 12.

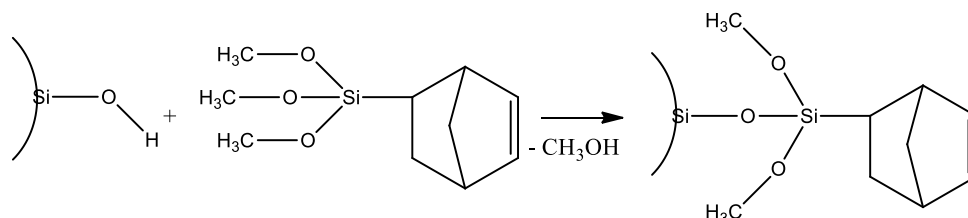


Рисунок 12 — Реакция взаимодействия норборненового производного с поверхностными группами диоксида кремния

2.2.4 Испытания на статический изгиб

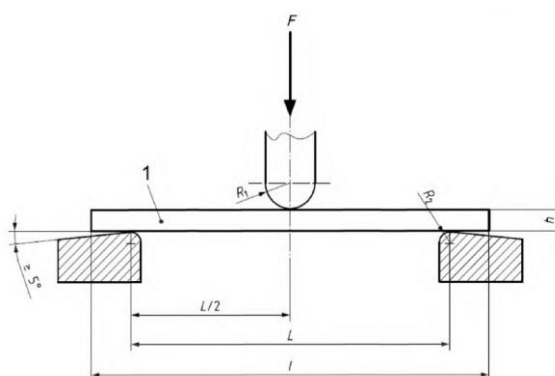
В качестве основного регламента проведения испытаний, подготовки образцов и используемого оборудования использовался ГОСТ 4648–2014 (ISO 178:2010). Смысл метода состоит в запечатлении нагрузки прикладываемой к испытываемому образцу прямоугольного сечения, которую необходимо приложить для достижения заданной величины относительной деформации.

Рекомендуемые параметры образцов приведены в таблице 11.

Таблица 11 — Параметры образцов для испытаний, мм [34]

Номинальная толщина h	Ширина $b \pm 0,5$	Длина l
$1 < h \leq 3$	25,0	80 ± 2
$3 < h \leq 5$	10,0	
$5 < h \leq 10$	15,0	
$10 < h \leq 20$	20,0	

Схема, по которой образец подвергается испытания представлена на рисунке 13.



1 – образец для испытания; F – прилагаемая нагрузка; R_1 – радиус нагружающего наконечника; R_2 – радиус опор; h – толщина образца; l – длина образца; L – расстояние между опорами

Рисунок 13 – Положение образца при испытании на изгиб:

По полученным результатам строят график изменения изгибающего напряжения от относительной деформации при изгибе. Значения напряжений (σ_f , МПа) и относительной деформации (ε_f) определяют по следующим формулам:

$$\sigma_f = \frac{3FL}{2bh^2},$$

где F – прилагаемая нагрузка, Н;

L – расстояние между опорами, мм;

b – ширина образца, мм;

h – толщина образца, мм.

$$\varepsilon_f = \frac{6sh}{L^2},$$

где s – прогиб, мм;

h – толщина образца, мм;

L – расстояние между опорами, мм.

Из полученной зависимости определяют максимальное напряжение при изгибе и модуль упругости материала.

2.2.5 Измерение прочности при растяжении

Нормативным документом, регламентирующим определение прочности пластмасс при растяжении, является ГОСТ 11262–2017 (ISO 527-2:2012). Метод основан на фиксации значений прилагаемой нагрузки к образцу при его равномерном растягивании. В результате получают кривую зависимости прилагаемой нагрузки к удлинению образца (рисунок 14).

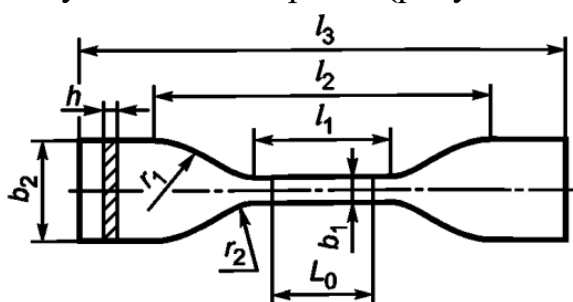


Рисунок 14 — Образец типа 1 [35]

Размеры образца приведены в таблице 12.

Таблица 12 — Параметры образца типа 1, мм

Размер	Значение
l_3 Общая длина	≥ 115
l_1 Длина узкой части с параллельными сторонами (рабочая часть)	33 ± 1
r_1 Большой радиус закругления	25 ± 1
r_2 Малый радиус закругления	$14,0 \pm 0,5$
b_2 Ширина головки	25 ± 1
b_1 Ширина узкой (рабочей) части	$6,0 \pm 0,4$
L_0 Расчётная длина	25 ± 1

После проведения испытаний дополнительно строят кривые «напряжение — относительное удлинение» для определения прочности при разрыве, прочности при растяжении и предела текучести или условного предела текучести. Значение прочности в МПа рассчитывают по формуле:

$$\sigma = \frac{F}{A_0},$$

где F — растягивающая нагрузка, Н

A_0 — первоначальное сечение образца, мм²

Для всех измерений был определён условный предел текучести, он равен значению напряжения в точке пересечения кривой параллельной прямой с тангенсом угла наклона равным линейному участку проходящей из значения относительного удлинения равному 0,2 % (рисунок 15)

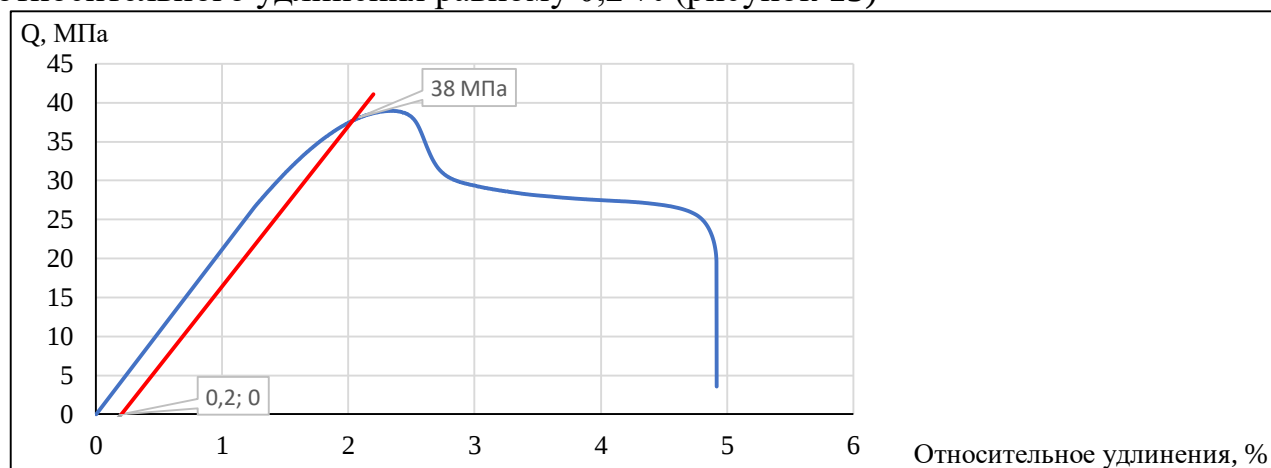


Рисунок 15 — Определение условного предела текучести

2.2.6 Проведение анализа набухания композитов

В качестве растворителей были выбраны:

- 1) ацетон технический — один из самых востребованных полярных органический растворитель;
- 2) ксилол нефтяной — распространённый ароматический растворитель;
- 3) нефрас 80/120 — деароматизированный неполярный органический растворитель на основе бензиновой фракции.

Образцы композитов в виде кубиков были помещены в растворители, для отслеживания изменений линейных размеров образцов и изменений их веса. После окончания испытаний были составлены кинетические кривые набухания образцов.

2.2.7 Получение композиционных материалов

Для приготовления композита к жидкому ДЦПД подогретому до 30 °С добавляли необходимое количество наполнителя, полученную смесь подвергали ультразвуковой диспергации с охлаждением в течение 5 минут. Затем к полученному гомогенному составу при постоянном перемешивании приливали растворённый в 2,5 г толуола катализатор Широка-Граббса. Полимеризация протекала в металлической форме объёмом 200 мл при температуре в 140 °С в течение четырёх часов.

4 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Исследования осуществлялись в лаборатории ОХИ ИШПР Томского политехнического университета. Цель исследования: синтез мономеров норборненового ряда и полимеров на их основе с изучением свойств полученных материалов. В качестве объектов исследования были использованы дициклопентадиен, винилтриметоксисилан, аэросил марки А-175.

4.1 Предпроектный анализ

Возможными потребителями на рынке композиционных материалов на основе ПДЦД являются предприятия, специализирующиеся на:

- 1) Создании конструкционных изделий из ПДЦПД
- 2) Изготовлении аппретов для стеклотканей и кремнезёмов

4.1.1 Оценочная карта

Анализ конкурентных технических решений проводили при помощи составления оценочной карты. Основным конкурентом является компания METTON LMR предоставляющая технологии для RIMM-литья изделий на основе ПДЦПД. На российском рынке данная технология применяется компаниями ООО ПК «Селеста» и ОАО «РИАТ». В таблице 15 представлено сравнение ключевых критериев для композиционных материалов в виде оценочной карты.

Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю экспертным путем по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путем, в сумме должны составлять 1.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

Таблица 15 — Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы		Конкурентоспособность	
		Б _ф	Б _{к1}	К _ф	К _{к1}
Технические критерии оценки ресурсоэффективности					
Технологичность	0,2	4	3	0,8	0,6
Совместимость с ПДЦПД	0,1	4	4	0,4	0,4
Совместимость с катализатором полимеризации	0,2	5	5	1	1
Удельная поверхность наполнителя	0,1	5	3	0,5	0,3
Эффективная степень наполнения	0,2	5	3	1	0,6
Экономические критерии оценки эффективности					
Цена	0,2	3	4	0,6	0,8
Итого	1	26	22	4,3	3,7

Основным преимуществом разработки является повышенная степень наполняемости композитов и удельная поверхность наполнителя, обеспеченная высокой дисперсностью наполнителя в отличие от стекловолокна применяемой в технологии компании METTON. Однако технология обработки наполнителя потребует больше ресурсов. Поэтому готовое решение будет незначительно уступать в стоимости.

Для определения причин проблем и потенциальных факторов, способных негативно повлиять на результаты проекта построим причинно-следственную диаграмму Исикавы. Данная диаграмма применяется для структурирования процессов на предприятии и оценки их причинно-следственных связей.

Причинно-следственная диаграмма Исикавы для данного проекта представлена на рисунке 40.

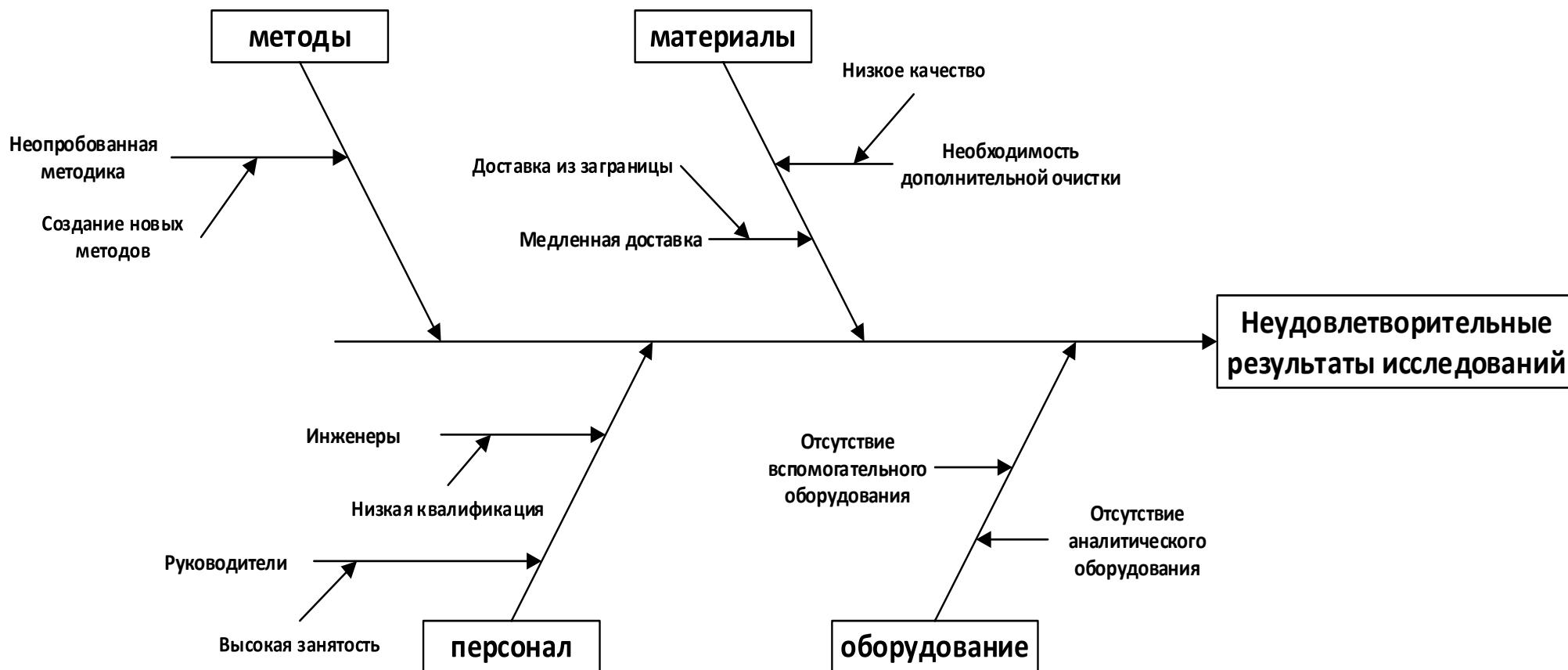


Рисунок 40 — Причинно-следственная диаграмма

4.1.2 Мера готовности научной разработки и разработчика к коммерциализации

Оценку готовности проекта к коммерциализации необходимо проводить на каждой стадии реализации проекта. Оценка проекта производилась при помощи специальной формы, содержащей показатели о степени проработанности проекта и уровня компетенций разработчиков проекта. Результаты оценки проекта представлены в таблице 16.

Таблица 16 — Бланк оценки степени готовности научного проекта к коммерциализации

№	Наименование	Степень проработанности научного проекта	Уровень имеющихся знаний у разработчика
1.	Определен имеющийся научно-технический задел	2	2
2.	Определены перспективные направления коммерциализации научно-технического задела	1	2
3.	Определены отрасли и технологии (товары, услуги) для предложения на рынке	3	3
4.	Определена товарная форма научно-технического задела для представления на рынок	2	3
5.	Определены авторы и осуществлена охрана их прав	4	3
6.	Проведена оценка стоимости интеллектуальной собственности	2	2
7.	Проведены маркетинговые исследования рынков сбыта	1	2
8.	Разработан бизнес-план коммерциализации научной разработки	2	2
9.	Определены пути продвижения научной разработки на рынок	1	1
10	Разработана стратегия (форма) реализации научной разработки	3	3
11	Проработаны вопросы международного сотрудничества и выхода на зарубежный рынок	1	1

Продолжение таблицы 16

12	Проработаны вопросы использования услуг инфраструктуры поддержки, получения льгот	1	2
13	Проработаны вопросы финансирования коммерциализации научной разработки	1	1
14	Имеется команда для коммерциализации научной разработки	1	2
15	Проработан механизм реализации научного проекта	3	3
	ИТОГО БАЛЛОВ	28	32

Суммы баллов говорят о средней перспективности проекта и недостаточной готовности проекта к коммерциализации, такая оценка обусловлена за счёт недостаточной оценки рынков и финансовых сторон, также недостаточно изучены вопросы сотрудничества с другими компаниями. Поэтому перед реализацией проекта рекомендуется провести дополнительное обучение разработчиков проекта.

4.1.3 Выбор предпочтительного метода коммерциализации

Процесс изготовления товарного продукта требует больших капиталовложений: изготовление ёмкостей для хранения сырья, реактора, оборудование для ИК-спектроскопии и газовой хроматографии, наличие оборудования по очистке воздуха от паров растворителя и сточных вод. Также для эксплуатации основного аппарата и вспомогательного оборудования требуется большое количество электро- и теплоэнергии. Поэтому основными методами коммерциализации станут:

- 1) передача интеллектуальной собственности в уставной капитал предприятия;
- 2) торговля патентными лицензиями

Поскольку необходимую ресурсную базу могут обеспечить уже действующие развитые предприятия.

4.2 Инициирование проекта

4.2.1 Цель и результаты проекта

Для постановки целей и результатов проекта необходимо определить заинтересованные стороны. Под заинтересованными сторонами проекта понимаются лица или организации, которые активно участвуют в проекте или интересы которых могут быть затронуты как положительно, так и отрицательно в ходе исполнения или в результате завершения проекта. Информация по заинтересованным сторонам проекта представлена в таблице 17.

Таблица 17 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
НИ ТПУ	Выпуск высококвалифицированных специалистов
	Получение дополнительного финансирования от заинтересованных компаний
Компании по производству композиционных материалов на основе ПДЦПД	Получение нового композиционного материала

В таблице 18 представлена информация об иерархии целей проекта и критериях достижения целей.

Таблица 18 – Цели и результат проекта

Цели проекта:	Разработать методику получения вещества для обработки наполнителя – диоксида кремния
Ожидаемые результаты проекта:	Вещество с необходимыми свойствами получено
	Разработана его методика получения
Критерии приемки результата проекта:	Сходимость результатов испытаний готового продукта
Требования к результату проекта:	Требования к методике:
	Провести аналитический контроль используемых веществ

Продолжение таблицы 18

	Провести исследования физико-механических свойств композитов
	Произвести оценку влияния степени наполнения полимера на свойства композитов
	Провести анализ рынка, определить области применения продукта
	Провести испытания устойчивости композитов на воздействие разных типов растворителей
	Оценить стойкость композита к кислотам и щелочам
	Выявить оптимальную концентрацию наполнителя в составе композиционных материалов
	Установить оптимальную степень обработки наполнителя аппретирующей добавкой

4.2.2 Рабочая группа

Рабочая группа проекта представлена в таблице 19.

Таблица 19 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Функции	Трудо-затраты, час.
1.	Бондалетов В.Г., д.т.н., профессор ОХИ ИШПР	Руководитель проекта	Консультирование, координация деятельности, определение задач, контроль выполнения, обеспечение оборудованием и материалами	200
2.	Федецов С.Ю., магистрант ОХИ ИШПР	Исполнитель проекта	Анализ литературных источников, получение целевых веществ и материалов, анализ лабораторных данных, написание работы	3000
ИТОГО:				3200

4.2.3 Ограничения и допущения проекта.

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

реализованных в рамках данного проекта. Факторы ограничения проекта приведены в таблице 20.

Таблица 20 – Ограничения проекта

Фактор	Ограничения/допущения
Сроки проекта	01.09.2021-31.05.2023
Дата утверждения плана управления проектом	15.09.2021
Дата завершения проекта	16.06.2023

4.3 Планирование управления научно-техническим проектом

4.3.1 Иерархическая структура работ проекта с индексами работ

План управления научным проектом должен включать иерархическую структуру работ. В процессе её создания структурируется и определяется содержание всего проекта. ИСР представлена на рисунке 41.

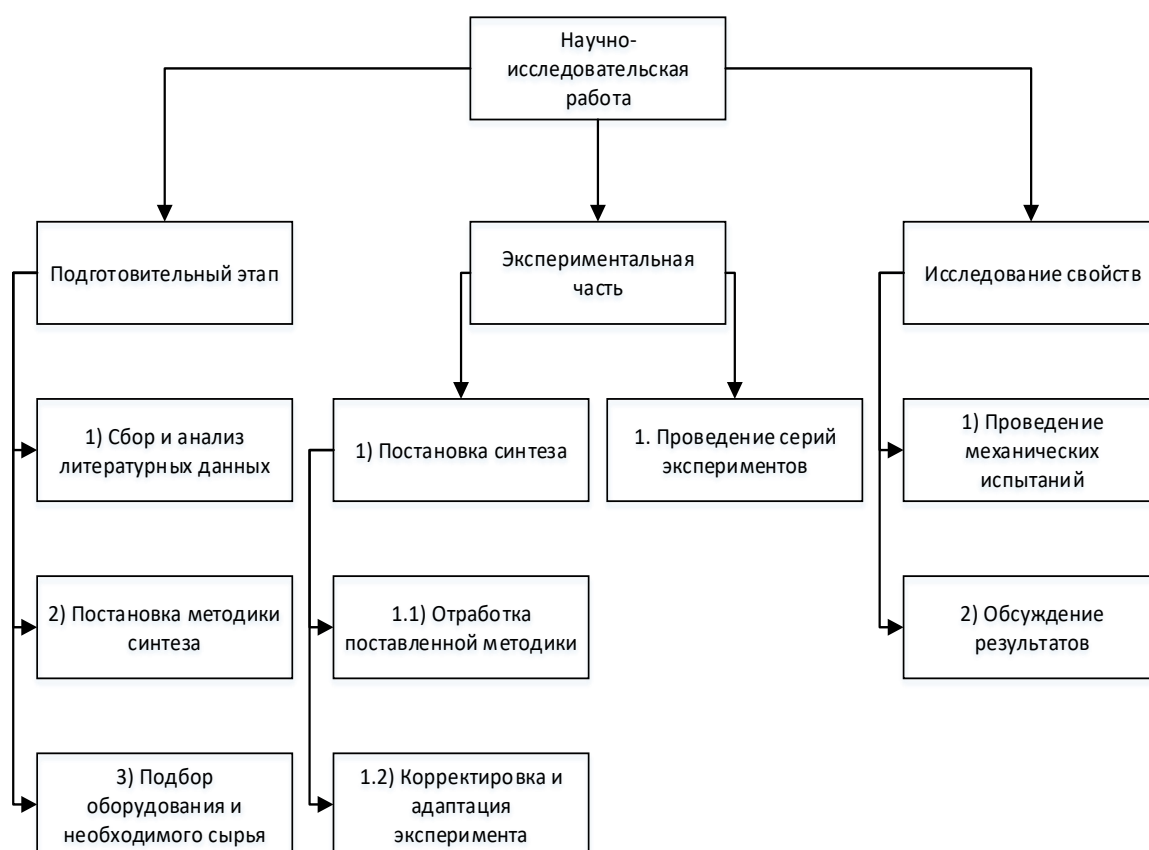


Рисунок 41 — Иерархическая структура работ проекта

4.3.2 План проекта

План проекта основывается на календарном графике. В таблице 21 содержится информация о линейном графике научного проекта.

Таблица 21 — Линейный график научного проекта

Название	Длительность, дни	Дата начала работ	Дата окончания работ	Состав участников
Постановка цели и задач проекта	5	01.09.2021	07.09.2021	Бондалетов В.Г., Федецов С.Ю.
Обзор литературных данных	5	08.09.2021	14.09.2021	Федецов С.Ю.
Составление плана работы	3	15.09.2021	17.09.2021	Бондалетов В.Г., Федецов С.Ю.
Отработка методики	188	20.09.2021	30.06.2022	Федецов С.Ю.
Получение целевых веществ и материалов	153	01.09.2022	14.04.2023	Федецов С.Ю.
Проведение механических и аналитических испытаний	16	17.04.2023	12.05.2023	Федецов С.Ю.
Подготовка отчёта по проделанной работе	12	15.05.2023	31.05.2023	Бондалетов В.Г., Федецов С.Ю.
Итого	382			

Для иллюстрации календарного плана проекта построена диаграмма Ганта (рисунок 42).

№	Вид работ	Т _к , кал, дн.	Продолжительность выполнения работ																			
			2021				2022								2023							
			Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май	Июнь	Сентябрь	Октябрь	Ноябрь	Декабрь	Январь	Февраль	Март	Апрель	Май	
1	Постановка цели и задач проекта	5																				
2	Обзор литературных данных	5																				
3	Составление плана работы	3																				
4	Отработка методики	188																				
5	Получение целевых веществ и материалов	153																				
6	Проведение механических и аналитических испытаний	16																				
7	Подготовка отчёта по проделанной работе	12																				

	Федецов С.Ю.		Бондалетов В.Г., Федецов С.Ю.
---	--------------	---	-------------------------------

Рисунок 42 — Календарный план проведения НИОКР

4.3.3 Бюджет научного исследования

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

Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты (таблица 22).

В данную статью включены затраты на приобретение всех видов материалов, комплектующих изделий и полуфабрикатов, необходимых для выполнения работ по данной теме.

Таблица 22 — Сырье, материалы, покупные изделия и полуфабрикаты

Наименование	Ед. изм.	Количество	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Журнал лабораторный	шт.	1	150	150
ДЦПД	1 кг	5	450	2250
Аэросил А-175	0,5 кг	0,5	1000	500
Колба круглодонная, 1000 мл	шт.	1	1900	1900
Колба круглодонная 500 мл	шт.	1	1300	1300
Лабораторный стакан 500 мл	шт.	2	400	800
Лабораторный стакан 300 мл	шт.	2	150	300
Натрий металлический	100 г	1	700	700
Ксилол	1 л	5	490	2450
Винилтриметоксисилан	1 л	1	900	900
Тетрабутоксититан	1 л	1	600	600
Ацетон технический	1 л	2	350	700
Всего за материалы				12550
Транспортно-заготовительные расходы (5 %)				628
Итого по статье C_m				13178

Специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ (таблица 23).

В данную статью включены все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной

аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ.

Таблица 23 — Спецоборудование для научных работ

№ п/п	Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1	Магнитная мешалка с подогревом MS-H280	1	27360	27360
2	Весы аналитические OHAUS Adventurer AX224/E	1	171000	171000
3	Печь муфельная LF 7/11-G1	1	91200	91200
4	Вакуумный насос DSZH WK-125N	1	5700	5700
Транспортно-заготовительные расходы (15%)				44289
Итого:				339549

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) руководителя (лаборанта, инженера) от предприятия (при наличии руководителя от предприятия) рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{р}},$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника;

$T_{\text{р}}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб.дн.

$Z_{\text{дн}}$ - среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}},$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн.

Годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала приведён в таблице 24.

Таблица 24 – Баланс рабочего времени

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

Месячный должностной оклад работника:

$$З_m = З_{тс} \cdot (k_{пр} + k_d) \cdot k_p,$$

где $З_{тс}$ – базовый оклад, руб.;

$k_{пр}$ – премиальный коэффициент (определяется Положением об оплате труда);

k_d – коэффициент доплат и надбавок;

k_p – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Должностной оклад профессора в 2023 году без учета районного коэффициента составил 40500 руб. Расчет основной заработной платы отображён в таблице 25.

Таблица 25 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	З _{ТС} , руб.	k _{пр}	k _д	k _р	З _м , руб.	З _{дн} , руб.	T _р , раб. дн.	З _{осн} , руб.
Руководитель, д.т.н.	40500	1,1	0,05	1,3	60 547,5	2 403,4	25	60 085
Магистрант	26200	1,0	0,00		34 060	1 563,4	382	597 218,8
Итого З _{осн} :								532 513,67

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$З_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot З_{\text{осн}},$$

где $k_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0,10 – 0,15).

Результаты занесены в таблицу 26.

Таблица 26 – Расчет дополнительной заработной платы

Исполнители	$k_{\text{доп}}$	$З_{\text{осн}}$, руб.	$З_{\text{доп}}$, руб.
Руководитель	0,13	60 085	7 811
Магистрант	0,10	597 218,8	59 721
Итого:			67 532

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

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

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

В соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 №212-ФЗ установлен размер страховых взносов равный 30%. Стипендиальные выплаты студентам, магистрам и аспирантам не облагаются налогом.

Отчисления на социальные нужды представлены в таблице 27.

Таблица 27 – Отчисления на социальные нужды

Исполнитель	$k_{\text{внеб}}$	$З_{\text{осн}}$	$З_{\text{доп}}$	$C_{\text{внеб}}$
Руководитель	0,3	60 085	7 811	20 368,8
Итого:				20 368,8

На статью расходов «Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями» в данном проекте относится анализ полученных продуктов в ходе цепочки синтезов методом ЯМР-

спектроскопии, выполняемые ФГБУН Институт химии нефти СО РАН, г. Томска. Расчет затрат на подрядные работы представлен в таблице 28.

Таблица 28 – Расчет затрат на подрядные работы

Метод анализа	Количество проб	Стоимость, руб.	Итого, руб.
ЯМР-спектроскопия	2	650	1300
ИК-спектроскопия	8	350	2800
Итого, руб			4100

Также в данную статью следует включить услуги по лазерной резке (2 500 руб) и использование сети Internet (20 000 руб). Суммарные затраты в данной статье расходов составят: 26 600 руб.

В накладные расходы входят прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов.

Их величина определяется по следующей формуле:

$$C_{\text{накл}} = (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}) \cdot k_{\text{нр}},$$

где $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы (0,7).

$$C_{\text{накл}} = (532\,514 + 67\,532) \cdot 0,7 = 420\,032,2 \text{ руб.}$$

4.3.4 Группировка затрат по статьям

Сводная таблица бюджета научно-исследовательского проекта приведена в таблице 29. Суммарные затраты составили 1419775 руб.

Таблица 29 – Затраты по статьям

Сырье и материалы	13178
Спец. оборудование	339549
Основная заработная плата	532514
Доп. заработная плата	67532
Отчисления на соц. нужды	20369
Оплата работ, выполняемых сторонними организациями и предприятиями	26600
Накладные расходы	420033
Итоговая плановая себестоимость	1419775

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

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

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

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

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки;

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

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

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

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i,$$

где I_{pi} – интегральный показатель ресурсоэффективности для i -го варианта исполнения разработки;

a_i – весовой коэффициент i -го варианта исполнения разработки;

b_i^a, b_i^p – балльная оценка i -го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

n – число параметров сравнения.

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности представлен в таблице 30.

$$I_{\text{р-дан. проект}} = 0,2 \cdot 4 + 0,1 \cdot 4 + 0,2 \cdot 5 + 0,1 \cdot 5 + 0,2 \cdot 5 + 0,2 \cdot 3 = 5,2;$$

$$I_{\text{р-аналог}} = 0,2 \cdot 3 + 0,1 \cdot 4 + 0,2 \cdot 5 + 0,1 \cdot 3 + 0,2 \cdot 3 + 0,2 \cdot 4 = 3,7;$$

Таблица 30 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Объект исследования		
	Весовой коэффициент параметра	Данный проект	Аналог
1 Технологичность	0,2	4	3
2 Совместимость с ПДЦПД	0,1	4	4
3 Совместимость с катализатором полимеризации	0,2	5	5
4 Удельная поверхность наполнителя	0,1	5	3
5 Эффективная степень наполнения	0,2	5	3
6 Цена	0,2	3	4
Итого	1	26	22

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки ($I_{исп.i}$) определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{исп.1} = \frac{I_{р-исп1}}{I_{финр.1}}, \quad I_{исп.2} = \frac{I_{р-исп2}}{I_{финр.2}}.$$

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта (таблица 31) и выбрать наиболее оптимальный вариант из предложенных.

Сравнительная эффективность проекта ($\mathcal{E}_{ср}$) определяется по следующей формуле:

$$\mathcal{E}_{ср} = \frac{I_{исп.1}}{I_{исп.2}}$$

где $\mathcal{E}_{ср}$ - сравнительная эффективность проекта;

$I_{исп.1}$ – интегральный показатель разработки;

$I_{\text{исп.2}}$ - интегральный технико-экономический показатель аналога.

Таблица 31 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Данный проект	Аналог
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,938	1
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	5,2	3,7
3	Интегральный показатель эффективности	5,54	3,7
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,5	

Выводы: в результате оценки коммерческой ценности разработки были определены основные потребители разработки и составлена её оценочная карта. В результате оценки готовности научной разработки к коммерциализации были выявлены недостаточная проработанность способа продвижения разработки и отсутствие маркетинговой оценки рынка композитов из ПДЦПД. Составленная причинно-следственная диаграмма отображает наиболее вероятные проблемы и угрозы для результатов исследования.

Также был составлен бюджет научного исследования и составлен календарный график работ. В заключение была определена сравнительная эффективность проекта по сравнению с аналогичной разработкой. Его полученное значение свидетельствует об оптимальности проекта в финансовом и ресурсном показателях эффективности.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СТУДЕНТА

1. Федецов, С. Ю. Синтез силоксановых мономеров норборненового ряда и полимеров на их основе / С. Ю. Федецов ; науч. рук. В. Г. Бондалетов // Химия и химическая технология в XXI веке : материалы XXIII Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков Л. П. Кулёва и Н. М. Кижнера, Томск, 16-19 мая 2022 г. : в 2 т. — Томск : Изд-во ТПУ, 2022. — Т. 2. — [С. 303-304].