

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

Институт электронного обучения

Направление подготовки – Химическая технология

Кафедра – Химической технологии топлива и химической кибернетики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Распределение органических соединений в торфе болота Средне-Васюганское УДК 622.331:615.322

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
3-2Д2С3	Зоркальцева Агата Андреевна		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Дучко М.А.			

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Криницына З.В.	К.Т.Н., доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Гусельников М.Э.	К.Т.Н., доцент		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Зав. кафедрой ХТТ и ХК	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Юрьев Е.М.	К.Т.Н., доцент		

Запланированные результаты

Код результата	Результат обучения (выпускник должен быть готов)
<i>Профессиональные компетенции</i>	
P1	Ставить и решать инновационные задачи инженерного анализа, связанные с созданием и обработкой материалов и изделий, с использованием системного анализа и моделирования объектов и процессов сепарации.
P2	Разрабатывать новые технологические процессы, проектировать и использовать новое оборудование и инструменты для обработки материалов и изделий, конкурентоспособных на мировом рынке.
P3	Внедрять, эксплуатировать и обслуживать современные высокотехнологичные линии автоматизированного производства, обеспечивать его высокую эффективность, соблюдать правила охраны здоровья и безопасности труда на производстве, выполнять требования по защите окружающей среды.
<i>Общекультурные компетенции</i>	
P4	Демонстрировать глубокие знания социальных, этических и культурных аспектов инновационной инженерной деятельности, компетентность в вопросах устойчивого развития.
P5	Самостоятельно учиться и непрерывно повышать квалификацию в течение всего периода профессиональной деятельности.

	Васюганское, краткое описание процесса образования торфа, состав биомаркеров торфа, газовая хроматография-масс спектрометрия как метод исследования торфа. 3) Экспериментальная часть: пробоподготовка торфа методом экстракции, условия хроматографирования, обработка хроматограмм. 4) Результаты и их обсуждение. 5) Заключение. Список используемой литературы.
Перечень графического материала	Изменение степени разложения торфа по глубине разреза. Результаты исследований (таблицы, графики).
Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент	Криницына З.В.
Социальная ответственность	Гусельников М.Э.
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	

Дата выдачи на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	19.11.2015
---	------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Дучко М.А.			15.11.15

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
3-2Д2С3	Зоркальцева А.А.		15.11.2015

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 68 страниц, 20 таблиц, 7 рисунков и 51 литературный источник.

Ключевые слова: торф, стероиды, токоферолы, терпеноиды, газовая хроматография-масс спектрометрия.

Объектом исследования является торф болота Средне-Васюганское, отобранный из скважины глубиной 350 см.

Целью работы было исследование содержания и состава стероидов, терпеноидов и токоферолов в торфе болота Средне-Васюганское.

В работе проводилась экстракция липидов торфа органическими растворителями и анализ группового и индивидуального состава биологически активных компонентов торфа (стероидов, терпеноидов и токоферолов) методом газовой хроматографии-масс спектрометрии.

Область применения: полученные результаты могут использоваться для оценки качества торфа с точки зрения его использования в качестве удобрения или подкормки для скота.

Экономическая эффективность работы: проблема физико-химических исследований торфов болота Средне-Васюганское на сегодняшний день очень актуальна.

Потенциальными потребителями результатов этого исследования являются химические предприятия, расположенные на территории Российской Федерации.

В будущем планируется проанализировать торфа других месторождений для выявления факторов, влияющих на состав биологически активных соединений.

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ	9
1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР	11
1.1. Васюганские болота.....	11
1.2. Процесс торфообразования	13
1.3. Биологически активные соединения торфа.....	15
1.4 Газовая хроматография-масс спектрометрия как метод исследования индивидуального состава торфа.....	22
2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ	26
2.1. Общая характеристика исследуемого объекта.....	26
2.2.Методика проведения работы	27
3.РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ.....	Ошибка! Закладка не определена.
4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ.....	29
4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения. Определение возможных альтернатив проведения научных исследований.....	29
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	29
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений.....	30
4.1.3 SWOT-анализ.....	31
4.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	35
4.2.1.Составление перечня работ	35
4.3 Определение трудоемкости работ	36
4.4 Построение графика работ.....	38
4.5 Бюджет научного исследования	41
4.5.1 Расчет материальных затрат НТИ	41
4.5.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	42
4.5.3 Расчет заработной платы исполнителей темы	43
4.5.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления) ..	45
4.5. 5 Накладные расходы	46
5.5.6 Формирование бюджета затрат научно исследовательского проекта.....	46

4.6 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования .. 47

5 СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ**Ошибка! Закладка не определена.**

5.1 Производственная санитария.....**Ошибка! Закладка не определена.**

5.1.1 Характеристика используемых веществ.**Ошибка! Закладка не определена.**

5.1.2 Средства коллективной и индивидуальной защиты..... **Ошибка! Закладка не определена.**

5.1.3 Метеоусловия.**Ошибка! Закладка не определена.**

5.1.4 Производственное освещение.**Ошибка! Закладка не определена.**

5.1.5 Шумы и вибрация.....**Ошибка! Закладка не определена.**

5.2 Безопасность.....**Ошибка! Закладка не определена.**

5.2.1 Безопасность при работе с вредными веществами..... **Ошибка! Закладка не определена.**

5.2.2 Электробезопасность.**Ошибка! Закладка не определена.**

5.2.3 Пожаровзрывобезопасность. .**Ошибка! Закладка не определена.**

5.3 Охрана окружающей среды**Ошибка! Закладка не определена.**

5.4 Чрезвычайные ситуации**Ошибка! Закладка не определена.**

Заключение.....**Ошибка! Закладка не определена.**

Список использованной литературы...**Ошибка! Закладка не определена.**

Список использованных сокращений

ГХ и МС - газовая хроматография и масс-спектрометрия

ЭУ - электронный удар

ПХИ - положительная химическая ионизация

ОХИ - отрицательная химическая ионизация

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в России и за рубежом повышается интерес к группе природных объектов, таких как торф и сапрпель, по причине их дешевизны и доступности сырьевой базы. Исследователи предпринимают попытки изучения фармакологических свойств и разработки лекарственных препаратов на их основе.

Интерес к изучению торфа связан с его огромными запасами и распространением торфяных месторождений по всей земной поверхности. На долю Томской области приходится порядка 1340 торфяных месторождений с площадью в границах промышленной залежи торфа 7,72 млн га и запасами торфа – 29,34 млрд т. [1].

Изучение элементного и химического состава торфа является актуальной задачей как в теоретическом, так и в практическом плане. Торф характеризуется большим разнообразием биологически активных веществ, благодаря чему он может быть использован в качестве удобрения или подкормки для скота. К одним из наиболее важных биологически активных веществ торфа относятся токоферолы, стероиды и терпеноиды.

Смесь токоферолов, представляющих собой витамин Е, является сильнейшим антиоксидантом, способствующим улучшению клеточного питания, обогащению клеток кислородом, замедлению процессов старения.

Стероиды, в особенности, производные холестерина, обеспечивают стабильность клеточных мембран, они необходимы для выработки витамина D₃, стероидных гормонов, желчных кислот, которые, в свою очередь, улучшают усвоение жиров пищи.

Терпеноиды активно участвуют в процессах обмена и фотохимических реакциях, протекающих в растениях. Пентациклический терпеноид бетулин обладает сильным противогрибковым, противовирусным, а также пластифицирующим действием [2].

Эти соединения также являются биомаркерами, отражающими источник и условия накопления органического вещества. Их состав

свидетельствует о вкладе в торф той или иной группы торфообразующих растений, условиях торфообразования и о процессах, протекавших при разложении торфа.

Целью данной работы было выявление основных факторов, влияющих на содержание биологически активных соединений (стероидов, терпеноидов и токоферолов) торфа по глубине разреза торфа болота Средне-Васюганское.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Определить содержание, а также групповой и индивидуальный состав стероидов, терпеноидов и токоферолов в торфе болота Средне-Васюганское методом газовой хроматографии-масс спектрометрии.
2. Сравнить содержание биологически активных соединений болота Средне-Васюганское с их концентрациями в торфе болота Темное, расположенного в другой природно-климатической зоне.
3. Определить основные факторы, влияющие на содержание биологически активных соединений в торфе.

1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1. Васюганские болота

Болото – это экосистема, в которой степень продуцирования органического вещества растениями значительно превышает степень их разложения. Для образования торфа необходимо накопление и сохранение большого количества растительной биомассы. Эффективность процессов торфообразования сравнительно низкая: менее 10% отмерших растений аккумулируются в виде торфа, большая же их часть разлагается в процессе торфообразования. Для болотных экосистем характерно застойное или слабопроточное увлажнение, определяющее специфический характер растительности и особый болотный тип почвообразования, выражающийся в накоплении торфа.

Заболоченность Томской области составляет около 30%. Годовое количество осадков в этих местах превышает испарение, а недостаточный дренаж приводит к застою влаги, в результате чего болота на территории области распространены практически повсеместно. В целом для сильно заболоченных районов Томской области характерно чередование приречных дренированных полос, обычно покрытых лесом, с заболоченными междуречными пространствами.

На территории Томской области расположены крупнейшие в мире болотные системы, одной из которых являются Васюганские болота. Васюганские болота (или правильно - Большое Васюганское болото) – уникальный природный объект, площадь которого около 53 тыс. км², расположены в Западной Сибири, в междуречье Оби и Иртыша, на территории Васюганской равнины, находящейся большей частью в пределах Томской области, и малыми частями — Новосибирской и Омской областей и Ханты-Мансийского АО [3].

Большое Васюганское болото расположено на границе двух ботанико-географических подзон –южнотаежных и подтаежных лесов. Особенностью болотной системы является приуроченность к наивысшим отметкам

местности, выделяемым как Васюганское куполообразное поднятие. Пестрота почвенного покрова, особенности гидрологических режимов и типов водно-минерального питания обусловили значительное разнообразие растительности по видовому составу и структуре.

Болото – это экосистема, в которой степень продуцирования органического вещества растениями значительно превышает степень их разложения. Для образования торфа необходимо накопление и сохранение большого количества растительной биомассы. Эффективность процессов торфообразования сравнительно низкая: менее 10% отмерших растений аккумулируются в виде торфа, большая же их часть разлагается в процессе торфообразования. Для болотных экосистем характерно застойное или слабопроточное увлажнение, определяющее специфический характер растительности и особый болотный тип почвообразования, выражающийся в накоплении торфа.

1.2. Процесс торфообразования

Торфообразование – это биохимический процесс, осуществляемый микроорганизмами в аэробных условиях в поверхностных слоях залежи и затухающий при затоплении разлагающейся растительной массы грунтовыми водами. Этот поверхностный слой, где наиболее интенсивно протекает процесс торфообразования, носит название торфогенного слоя [4].

Группы растений атмосферного питания образуют торф верхового типа, а торфообразователи, питающиеся грунтовыми водами, – низинный торф [5].

Различный исходный материал и обширный диапазон изменения условий торфонакопления являются причиной многообразия свойств торфа, что определяет широкий спектр его применения.

Торф издавна рассматривается как комплексное сырье для получения различных видов продукции. Помимо использования всей массы торфа (органические удобрения, торфяные брикеты, горшочки и др.), методом экстракции из него получают гуминовые кислоты, битумы, различные биологически активные вещества, нашедшие широкое применение в животноводстве и растениеводстве. Вместе с тем, торф хорошо известен как один из наиболее активных сорбентов, способных накапливать в себе в определенных условиях значительные количества различных металлов, в том числе токсичных и радиоактивных [6].

Торф применяется во многих сферах: разведении животных, биохимической промышленности, медицине, но главными отраслями использующими его, являются энергетическая промышленность и сельское хозяйство. Развитие современных технологий производства позволяет получить высокопродуктивные почвы для выращивания продуктов питания, удобрения, вещества-стимуляторы роста и развития семян, изоляционные и упаковочные материалы, углеродный восстановитель металла, активные угли, графит. Но основные сферы применения можно условно разделить на две группы: энергетика и сельское хозяйство.

Использование торфа как топлива обусловлено его составом: большим содержанием углерода, малым содержанием серы, вредных негорючих остатков и примесей [7].

Торф является легкодоступным природным материалом и источником биологически активных веществ, широко используемых не только в сельском хозяйстве, но и в медицине [8]. В литературе описывается широкий спектр положительного влияния торфа и различных препаратов на его основе на живые организмы. Они оказывают стимулирующее действие на пищеварение, рост и иммунную систему животных [9]. Одним из наиболее важных биологически активных веществ являются стероиды, терпеноиды и токоферолы. Их состав свидетельствует о вкладе в формирование торфа той или иной группы торфообразующих растений и о процессах, протекавших при разложении торфа [10].

Разложение торфа является сложным биологическим, химическим и физическим процессом. Степень разложения торфа оценивается по процентному содержанию в нем бесструктурной части, включающей гуминовые кислоты и мелкие частицы негумифицированных остатков растений.

1.3. Биологически активные соединения торфа

Биологически активные вещества являются особой группой органических соединений. С их помощью осуществляются и регулируются процессы обмена веществ, роста и развития живых организмов. Некоторые биологически активные вещества, выделяемые организмами, оказывают влияние на особей своего и других видов. Например, животные с помощью различных биологически активных веществ способны привлекать особей противоположного пола или отпугивать врагов, а растения — угнетать или стимулировать рост других растений, почвенных микроорганизмов. К биологически активным веществам относятся витамины, гормоны, феромоны, алкалоиды, антибиотики и др.

Сложный и многоуровневый процесс регуляции обмена веществ в организме осуществляется при участии нервной и эндокринной систем. Это происходит как на уровне клетки и отдельных ее органелл, так и на физиологическом уровне, где задействованы центральные и периферические звенья регуляции. Одними из наиболее важных биологически активных веществ являются стероиды, терпеноиды и токоферолы.

Стероиды — вещества животного или, реже, растительного происхождения, обладающие высокой биологической активностью. Стероиды имеют циклическое строение. В основе их структуры лежит скелет стерана, состоящий из трёх конденсированных циклогексановых колец (А, В и С) в нелинейном сочленении и циклопентанового кольца (D).

Общая структура стероидов и принятая нумерация атомов в стеране приведены ниже:

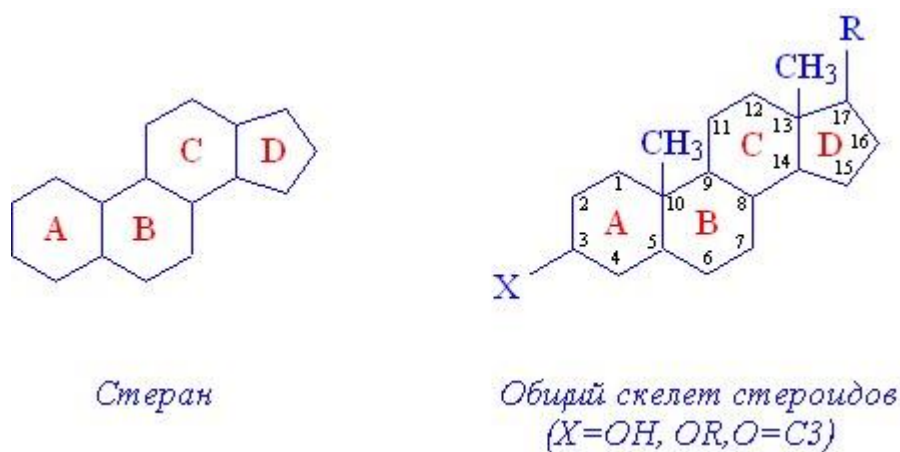


Рисунок 1. Общая структура стероидов

Характерная особенность большинства природных стероидов – наличие кислородосодержащего заместителя у C-3, метильных групп C-18 и C-19, а также алифатического заместителя R у C-17.

Стероидные гормоны играют важнейшую роль в эндокринной системе, контролирующей обменные процессы. Эти гормоны стимулируют биологические реакции в различных тканях организма, оказывают влияние на половую дифференциацию, репродуктивную функцию, поддержание солевого баланса и метаболизм сахара. Они также участвуют в реакции организма на стресс и влияют на поведение. Однако в отличие от животных и людей, у растений нет централизованных органов для производства гормонов, поэтому у растений собственные стероиды приходится вырабатывать каждой клетке. Клетки животных и людей, как правило, отвечают на воздействие стероидов при помощи молекулярных рецепторов, находящихся в ядрах клеток. Однако таких рецепторов нет у растений, здесь есть лишь рецептороподобные киназы, которые прикреплены к внешним стенкам клеток и связаны с внутренними структурами через сеть мембран.

Ученым уже на протяжении некоторого времени известен механизм регуляции роста и развития растений при помощи особого растительного стероида – брассиностероида, однако до сих пор неизвестными оставались некоторые моменты, касающиеся производства и регуляции этого растительного стероида.

Последние исследования показали, что brassinosteroids оказывают прямое воздействие на внешние раздражители, способствуют росту клеток и увеличивают стойкость растений к патогенам. Все это будет полезно в сельском хозяйстве, уверены ученые. По их словам, до недавнего времени оставалось неясным, как один стероид может регулировать так много функций[11].

Геостероиды, повсеместно встречающиеся в органическом веществе осадков, происходят от стероидов, которые входят в структуру клеточных стенок эукариотов [12]]. Они контролируют проницаемость и жесткость клеточных мембран. Современные осадки характеризуются большим разнообразием стероидов с двойными связями и различными функциональными группами – гидроксигруппами, алкильными и другими заместителями.

Биологические стероиды обычно содержат 27, 28 и 29 атомов углерода. Стероиды состава C_{27} являются общими у животных и красных водорослей, C_{28} содержатся в микроводорослях (например, диатомовых) и грибах, в то время как стероиды состава C_{29} в основном синтезируются наземными растениями. Присутствие в торфе соединений, имеющих растительное происхождение в неизменном виде указывает на незрелость органического вещества [13].

Терпены – это углеводороды, имеющие общую формулу $(C_5H_8)_n$, терпены и терпеноиды могут быть соединениями алифатического, гидроциклического или ароматического ряда. Но, несмотря на их принадлежность к столь различным классам органических соединений, они построены по одному «архитектурному плану»; наблюдается кратность углеродных атомов в их скелете. Большинство известных терпенов построено из изопреновых фрагментов, которые образуются за счет связывания друг с другом по типу присоединения «голова к хвосту» – (изопреновое правило).

Терпеноиды — это кислородсодержащие терпены. Считается, что терпены и терпеноиды по численности превосходят все другие вещества

вторичного происхождения. Терпены — это ненасыщенные углеводороды с числом углеродных атомов, кратным пяти. Терпены можно рассматривать как производные изопрена[14].

Терпеноиды широко распространены в природе, главным образом, в растительных, реже – в животных организмах. Терпеноиды обнаружены практически во всех тканях растений (содержатся в эфирных маслах, скипидаре, смолах, бальзамах), найдены в продуктах жизнедеятельности некоторых бактерий и грибов. Происхождение дитерпеноидов может быть связано с преобразованием абиетиновой кислоты, широко распространенной в смоле высших растений. Растения, относящиеся к семейству сосновых, характеризуются высоким содержанием таких дитерпеноидов как абиепаны и пимараны.

Большое число важнейших тритерпеноидов, обнаруженных в составе организмов, рассматривается в качестве прямых предшественников углеводов древних осадков и нефтей. Хотя для высших растений весьма характерны различные тритерпеноиды, в клетках бактерий и синезеленых водорослей в относительно высокой концентрации присутствуют лишь соединения ряда гопана. Другие тритерпеноиды встречаются только у высших растений [15]. К тритерпеноидам растительного происхождения относятся производные олеанана, лупана, и тараксастана.

Терпеновые соединения являются активными участниками обменных процессов, протекающих в растительном организме, о чем свидетельствует их высокая реакционная способность. Терпеноиды служат вторичными метаболитами смешанного биосинтеза, к ним относятся алкалоиды, флавоноиды, олигосахариды и т.д. Растущий интерес к природным тритерпеноидам вызван не только научными аспектами структурного анализа этих соединений, но и широким спектром их биологической активности. Они обладают бактерицидным, противогрибковым, противовирусным, цитотоксическим, болеутоляющим, противоопухолевым и

противоаллергическим действием, а также способствуют работе сердечно-сосудистой системы [16].

Терпеноиды служат вторичными метаболитами смешанного биосинтеза, к ним относятся алкалоиды, флавоноиды, олигосахариды и т.д. Растущий интерес к природным тритерпеноидам вызван не только научными аспектами структурного анализа этих соединений, но и широким спектром их биологической активности. Они обладают бактерицидным, противогрибковым, противовирусным, цитотоксическим, болеутоляющим, противоопухолевым и противоаллергическим действием, а также способствуют работе сердечно-сосудистой системы [17].

Витамины представляют собой группу органических соединений разнообразной химической структуры. Большинство из них поступает в организм человека с пищей в виде витаминов как таковых или их предшественников-провитаминов. Они участвуют во всех процессах обмена веществ, предупреждают избыточное отложение холестерина на стенках кровеносных сосудов и имеют существенное значение для поддержания нормального состава крови и предупреждения физиологического увядания организма.

Важными биологически активными веществами липофильной природы являются токоферолы (витамин E). По химической природе токоферолы относятся к семейству терпеноидов (содержат в своей структуре изопрен) и являются производными хромана (бензо-g-дигидропирана) [18].

Группа веществ, объединяемых общим названием «Витамин E» включает несколько соединений — производных хромана, являющихся природными антиоксидантами, которые предотвращают окисление ненасыщенных липидов, предохраняют от разрушения клеточные мембраны и вследствие этого широко применяются для профилактики и лечения ряда заболеваний. К настоящему времени выделены из природных источников или получены синтетически восемь различных веществ, обладающих E-витаминной активностью.

Токоферолы (витамин Е) известны своими антиоксидантными, иммуноукрепляющими, противовоспалительными и антитромбоцитарными свойствами. Витамин Е используется в клинических условиях для предотвращения сердечно-сосудистых заболеваний, рака, катаракты, осложнений сахарного диабета, а также для улучшения иммунной функции [19].

Основной биологически активной формой является RRR- α -токоферол. Свободная OH-группа обуславливает свойства витамина Е как антиоксиданта.

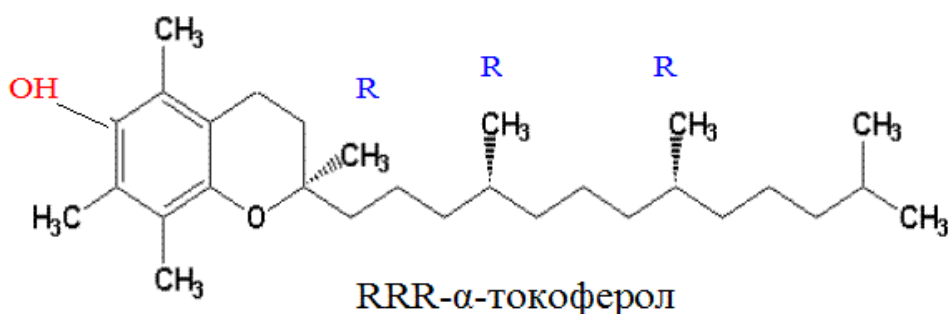


Рисунок 2. Структура α -токоферола

Кроме токоферолов к группе витамина Е относятся α , β , γ и δ -токотриенолы – аналоги соответствующих токоферолов, которые отличаются от последних наличием двойных связей в боковой цепи. Токоферолы – прозрачные, светло-желтые, вязкие масла, хорошо растворимые в большинстве органических растворителей. Медленно окисляются на воздухе, разрушаются под действием УФ-лучей [20].

Токоферолы играют важнейшую роль во всех репродуктивных процессах: оплодотворении, развитии плода, росте организма, развитии и функционировании половой системы.

Различные токоферолы имеют неодинаковую биологическую активность. Физиологическое действие ослабевает в последовательности: α -токоферол > β -токоферол > γ -токоферолы > δ -токоферол. При этом замечено, что продукты метаболизма также обладают Е-витаминной активностью [21].

Токоферолы (витамин Е) известны своими антиоксидантными, иммуноукрепляющими, противовоспалительными и антитромбоцитарными свойствами [19].

Химический состав болотных растений и торфов Западной Сибири в настоящее время изучен слабо [22]. В работе представлены данные об элементном составе и содержании основных групп органических веществ в фускум-торфе и сфагновом мочажинном торфе с низкой степенью разложения, отобранных на южнотаежных верховых болотах Западной Сибири. Были идентифицированы следующие классы соединений: н-алканы, терпеноиды, токоферолы, карбоновые кислоты, кетоны, би- и трициклические ПАУ.

Работа посвящена сравнительному исследованию различных торфов болота Тёмное. Были идентифицированы различные биологически активные вещества: фенольные соединения, битумы, гуминовые вещества, гуминовые кислоты, фульвокислоты и др. [23].

В работе проводилось моделирование начальной стадии процесса торфообразования. Определяли содержание липидов, водорастворимых компонентов, легкогидролизуемых компонентов, лигнина в осоке, пушице, *S. fuscum* и *S. Magellanicum* [24].

1.4 Газовая хроматография-масс спектрометрия как метод исследования индивидуального состава торфа

Хроматография – метод разделения, анализа и физико-химических исследований веществ, основанный на перемещении зоны вещества вдоль слоя сорбента в потоке подвижной фазы с многократным повторением сорбционных и десорбционных актов. При этом разделяемые вещества распределяются между двумя несмешивающимися фазами (в зависимости от их относительной растворимости в каждой фазе): подвижной и неподвижной.

Характерными особенностями любых хроматографических методов являются следующие:

- Высокая разрешающая способность процесса разделения, обусловленная высокой эффективностью процесса, дающая возможность разделения даже близких по природе, структуре и свойствам веществ.
- Мягкие условия разделения [25].

Газовая хроматография – метод разделения летучих компонентов, при котором подвижной фазой служит инертный газ (газ-носитель), протекающий через неподвижную фазу с большой поверхностью. В качестве подвижной фазы используют водород, гелий, азот, аргон, углекислый газ. Газ-носитель не реагирует с неподвижной фазой и разделяемыми веществами. Этим требованиям отвечает около 5% известных органических соединений, но именно эти соединения оставляют 70-80 % соединений, которые использует человек в сфере производства и быта [26].

На рисунке 3 представлена принципиальная схема газового хроматографа.

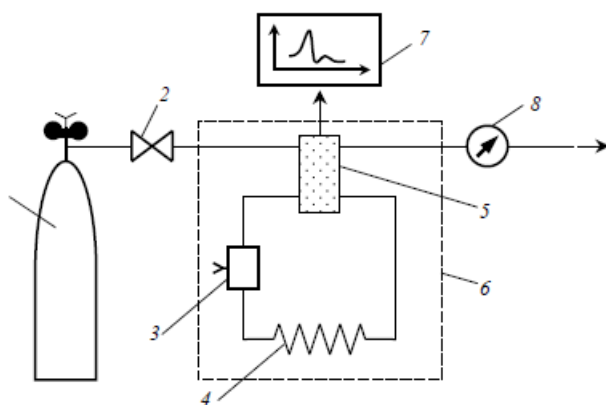


Рис. Принципиальная схема газового хроматографа
(1 – источник газа-носителя; 2 – вентиль тонкой регулировки скорости потока газа-носителя; 3 – устройство для ввода пробы; 4 – хроматографическая колонка; 5 – детектор; 6 – термостат колонки и термостат детектора; 7 – регистратор; 8 – измеритель скорости потока газа-носителя)

Рисунок 3. Схема газового хроматографа

ГХ-МС — комбинация двух мощных аналитических инструментов: газовой хроматографии, обеспечивающей высокоэффективное разделение компонентов сложных смесей в газовой фазе, и масс-спектрометрии, позволяющей идентифицировать как известные, так и неизвестные компоненты смеси [27].

Аналитические возможности ГХ и масс-спектрометрии идеально дополняют друг друга, и сочетание методов позволяет получать большой объем информации спектров. Масс-спектрометрия позволяет идентифицировать вещества путем передачи электрического заряда молекулам образца, придания им ускорения при пропускании через магнитное поле, разрушая молекулы на заряженные фрагменты и определяя различные заряды. Участок спектра отображает массу каждого фрагмента.

В камере ускорения скорости заряженных частиц увеличиваются под влиянием ускоряющего напряжения. При каждом значении напряжения только частица с определенной массой ускоряется настолько, чтобы достичь детектора. Ускоряющее напряжение меняется, чтобы покрыть весь диапазон масс, для того, чтобы все фрагменты в итоге достигли детектора.

Заряженные частицы движутся к детектору по кривой траектории. Когда отдельные заряженные частицы сталкиваются с поверхностью детектора,

несколько электронов (также заряженных частиц) выбиваются с поверхности детектора. Затем эти электроны ускоряются до столкновения с другой поверхностью, выбивая еще больше электронов, которые бомбардируют другую поверхность. Каждый электрон несет заряд. В конце концов, многочисленные столкновения со многими поверхностями генерируют тысячи электронов, которые излучаются последней поверхностью. В результате происходит усиление первоначального заряда через каскад электронов, приходящих на коллектор. В этот момент прибор измеряет заряд и фиксирует массу фрагмента, которая пропорциональна обнаруженному заряду.

Масс-спектрометр выводит полученные данные в виде массива пиков на графике, "масс-спектр". Каждый пик представляет собой значение для массы осколка. Высота пика растет с увеличением числа обнаруженных фрагментов с одной конкретной массой. Как и в случае с детекторы в газовой хроматографии, пики могут отличаться по высоте в зависимости от чувствительности детектора.

Обычно масс-спектр отражает пик нефрагментированной молекулы образца. Это обычно самый массивный осколок с "родительской массой." Как картинка на коробке с головоломкой, родительская масса используется для того, чтобы собрать вместе фрагменты, исходя из других пиков в масс-Родительская масса отражает массу молекулы, в то время как другие пики указывают на ее структуру.

Определение родительского пика и, следовательно, молекулярной массы образца, является наиболее трудной частью масс-спектрометрического анализа [28].

Существуют "библиотеки" масс-спектров, содержащие спектры более 70000 органических соединений, по которым можно проводить их идентификацию.

Для каждого класса соединений в хромато-масс-спектрометрии существует свое значение соотношения масса/заряд (m/z), которое зависит от

пути фрагментации соединения. Ионы с различными значениями m/z , как правило, разделяются по времени пролета определенного расстояния [29].

Наиболее распространенным вариантом ГХ-МС был и остается анализ с применением ионизации электронным ударом (ЭУ). При проведении скрининга спектры, полученные при нормированных условиях ионизации (70 эВ), сравниваются с библиотечными масс-спектрами. Для повышения селективности применяют альтернативные методы ионизации, чаще всего — химическую ионизацию с детектированием положительных (ПХИ) или отрицательных ионов (ОХИ) [27]. К сожалению, стандартизация спектров ХИ затруднена и является в основном специфичной для каждого прибора. Тем не менее воспроизводимость спектров на конкретном приборе, как правило, удовлетворительна и позволяет успешно проводить качественный (по молекулярному иону) и количественный анализ конкретных компонентов. ХИ редко применяется как скрининговый метод, чаще всего она используется для целевого определения аналитов или их групп.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

2.1. Общая характеристика исследуемого объекта

В качестве объектов исследования были выбраны торфа болота Средне-Васюганское. Болото Средне-Васюганское расположено в подзоне средней тайги Западной Сибири, залегает на I левобережной надпойменной песчаной террасе р. Васюган, в 2 км на север от п. Средний Васюган. Торфяной разрез заложен в типичном сосново-кустарничково-сфагновом (*Sphagnum fuscum*) фитоценозе – низком ряме. Торфа ряма болота Средне-Васюганское были отобраны из скважины глубиной 352 см. Современная среднегодовая температура воздуха в районе болота Средне-Васюганское составляет -1.7оС.

Болото Темное расположено в южнотаежной подзоне Западной Сибири, на Обь-Чулымском междуречье, II надпойменной песчаной террасе р. Томи. Верховые торфа ряма болота Тёмное были отобраны из скважины глубиной 635 см.

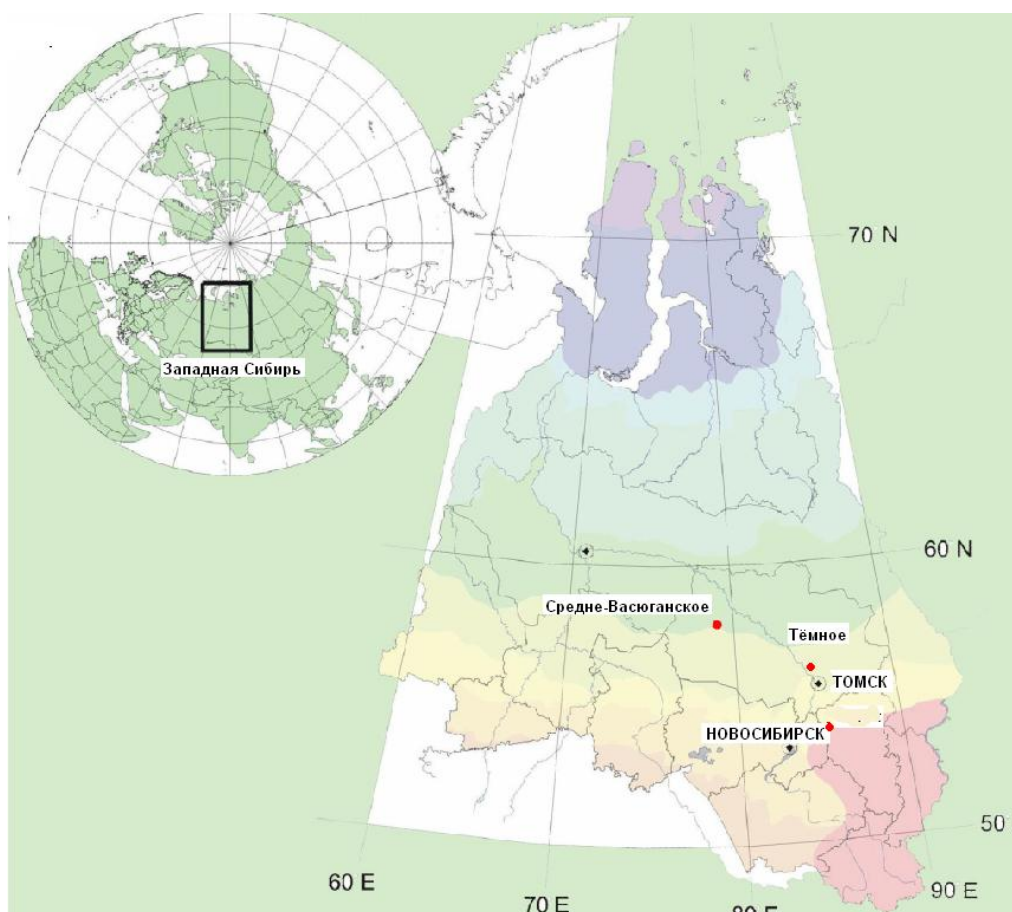


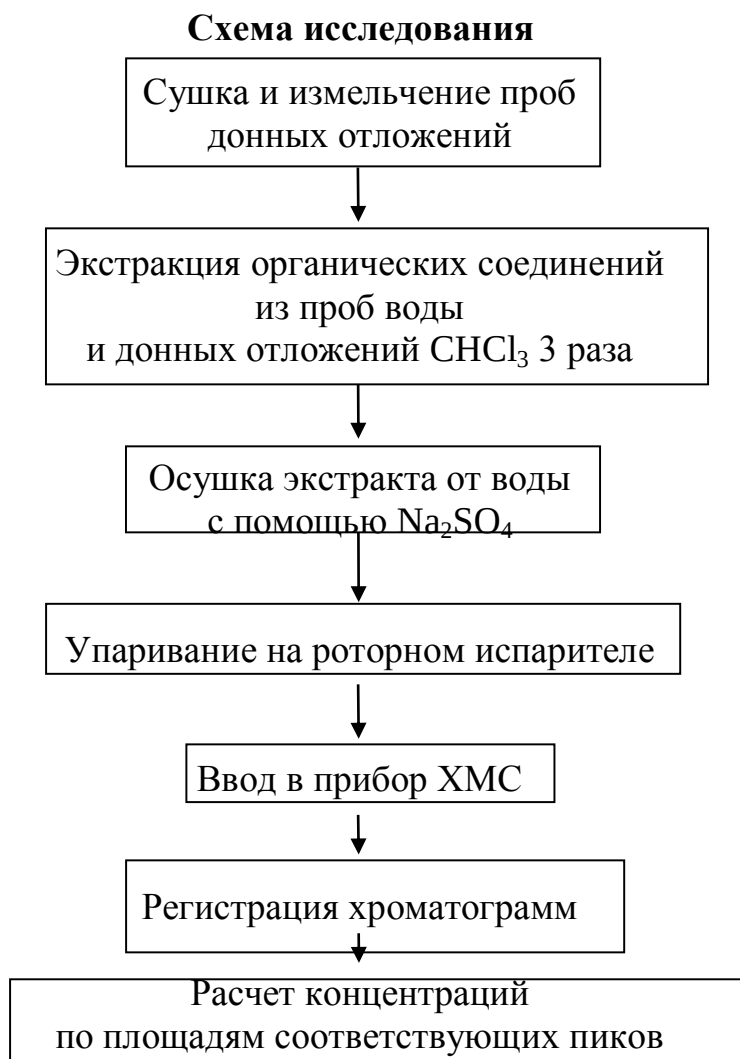
Рисунок 4. Площади отбора торфа

Ботанический состав торфов определяли микроскопическим методом, а степень разложения – методом центрифугирования.

2.2.Методика проведения работы

Молекулярный состав органических соединений исследовали методом ГХ-МС с использованием магнитного хромато-масс-спектрометра DFS фирмы "Thermo Scientific" (Германия).

Непосредственно перед анализом все образцы были высушены и измельчены.



Битумоиды были сконцентрированы путем экстракции 7% раствором метанола в хлороформе при 60°C, затем экстракт упаривали на ротаторном испарителе и затем осуществляли ввод в хроматограф.

Режим работы хроматографа: кварцевая капиллярная хроматографическая колонка фирмы “Thermo Scientific” с внутренним диаметром 0.25 мм, длиной 30 м, толщина фазы 0.25 мкм, неподвижная фаза – TR-5MS; газ-носитель – гелий, температура испарителя 250°C, температура интерфейса 250°C; программа нагрева термостата хроматографа: $t_{\text{нач}} = 80^\circ\text{C}$, изотерма в течение 2 минут, затем нагрев со скоростью 4 град/мин. до $t_{\text{макс}} = 300^\circ\text{C}$. Режим работы масс-спектрометра: метод ионизации – электронный удар; энергия ионизирующих электронов – 70 эВ; температура ионизационной камеры – 250°C; диапазон регистрируемых масс – 50-500 а.е.м.; длительность развертки спектра – 1 сек.

Индивидуальные соединения идентифицировали по полным масс-спектрам, для этого использовали спектро-структурные корреляции программы X-Calibur 10, имеющиеся в литературе, а также компьютерную библиотеку масс-спектров NIST, насчитывающую более 163 тыс. наименований. Содержание отдельных структур определяли по площади соответствующих пиков на хроматограммах с использованием внутреннего стандарта и поправочных коэффициентов, определенных для каждого класса соединений.

Концентрации индивидуальных соединений рассчитывали по формуле:

$$C_x = \frac{S_x \times V_{\text{введ}}}{S_{\text{ст}} \times m_{\text{нав}}}, \text{ где}$$

S_x – площадь пика компонента x на хроматограмме,

$V_{\text{введ}}$ – объем экстракта, введенный в испаритель хроматографа (мкл),

$S_{\text{ст}}$ – площадь пика стандарта на хроматограмме,

$m_{\text{нав}}$ – масса навески донных отложений для экстракции (г).

4 ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ

4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения. Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Проблема физико-химических исследований торфов болота Средне-Васюганское на сегодняшний день очень актуальна.

Потенциальными потребителями результатов этого исследования являются химические предприятия, расположенные на территории Российской Федерации.

Проведем сегментирование рынка по следующим критериям: размер химического предприятия – существующие расчетно-аналитические методы изучения термической стабильности полупродуктов и реакционных масс в изотермических условиях.

Таблица 3 – Карта сегментирования рынка услуг по исследованию ГК торфов

Размер компании	Методы анализа ГК торфов		
	ГХ-МС	ИК-спектроскопия	ГЖХ
Крупные	+	+	+
Средние	+	+	-
Малые		-	-

«+» - удобство применения данного метода; «-» - нерациональность использования данного метода компанией.

Как видно из приведенной карты сегментирования, методом хромато-масс-спектрометрии является наиболее универсальным для исследования торфов крупными и средними компаниями.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений

Проведем данный анализ с помощью оценочной карты, приведенной ниже.

Таблица 4 - Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений (разработок)

Критерий оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Простота эксплуатации оборудования	0,1	5	5	3	0,5	0,5	0,3
2. Потребность в дополнительных исследованиях	0,2	5	2	4	1	0,4	0,8
3. Универсальность метода	0,13	5	4	5	0,65	0,52	0,65
4. Специальное оборудование	0,05	3	4	3	0,15	0,2	0,15
5. Предоставляемые возможности	0,17	5	3	3	0,85	0,51	0,51
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Суммарная стоимость оборудования	0,1	5	4	3	0,5	0,4	0,3
2. Конкурентоспособность	0,05	5	4	3	0,25	0,2	0,15
3. Цена исследования	0,1	5	4	3	0,5	0,4	0,3
4. Уровень проникновения на рынок	0,05	4	4	3	0,2	0,2	0,15
5. Сотрудники узкого профиля для работы с методикой	0,05	3	4	3	0,15	0,2	0,15
Итого	1	45	38	33	4,75	3,53	3,46

где B_{ϕ} - УФ-спектроскопия; B_{K1} – ИК-спектроскопия; B_{K2} - скоростной (экспрессный) метод; B_{K3} - спектроскопия электронного парамагнитного резонанса.

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i \quad (1)$$

где K – конкурентоспособность инженерного решения или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя

Опираясь на полученные результаты, можно сделать вывод, что метод ГХ-МС является наиболее эффективным и целесообразным способом для исследования состава торфа. Уязвимость конкурентов объясняется наличием таких причин, как наличие дополнительных исследований для получения достоверных результатов, недостаточное удобство в эксплуатации.

4.1.3 SWOT-анализ

SWOT представляет собой комплексный анализ инженерного проекта. SWOT-анализ применяют для того, чтобы перед организацией или менеджером проекта появилась отчетливая картина, состоящая из лучшей возможной информации и данных, а также сложилось понимание внешних сил, тенденций и подводных камней, в условиях которых научно-исследовательский проект будет реализовываться. Он проводится в несколько этапов.

Результаты первого этапа SWOT-анализа представлены в таблице 5.

Таблица 5 – Матрица SWOT

	Сильные стороны научно-исследовательского проекта:	Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Малая изученность торфов данного
--	--	--

	С1. Принципиально новая методика С2. Наличие опытного руководителя С3. Способность разрабатываемого метода быть применимым к мало изученным веществам и материалам.	месторождения. Сл2.Возможность появления новых методов. Сл3. Могут потребоваться дополнительные испытания Сл4. Медленный процесс вывода на рынок объекта исследования.
--	--	--

Продолжение таблицы 5

	С4. Актуальность разработки. С5. Не требует уникального оборудования.	
Возможности: В1.Возможность создания партнерских отношений с рядом исследовательских институтов. В2. Большой потенциал применения метода хромато-масс-спектрометрии в России. В3. Возможность выхода на внешний рынок. В4. Рост потребности в обеспечении натуральным сырьем для медицинской и сельскохозяйственной промышленности. В5. В случае принятия рынком выход на большие объемы	Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности» 1 Анализ позволяет использовать данные для определения направленности дальнейшей переработки торфа. 2 Невысокая затратность проекта может привлечь больше сотрудников и исполнителей.	Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и возможности» 1. Повышение квалификации кадров 2. Привлечение новых заказчиков 3.Разработка научного исследования 4. Приобретение необходимого оборудования для анализа опытного образца
Угрозы: У1. Отсутствие спроса на методики определения группового состава торфа. У2. Противодействие со стороны конкурентов: снижение цен, усовершенствование текущих методов. У3. Захват внутреннего рынка иностранными компаниями.	Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и угрозы» 1. Продвижение новой технологии в медицине с целью появления спроса 2. Изучение фармакологических свойств торфа	Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы» 1. Повышение квалификации кадров 2. Привлечение новых заказчиков 3. Продвижение новой технологии с целью появления спроса

У4.Закрытие фармакологических предприятий на территории РФ.		
--	--	--

Выявим соответствия сильных и слабых сторон научно-исследовательского проекта внешним условиям окружающей среды. Данные соответствие или несоответствие помогут выявить потребность в проведении стратегических изменений[30]. Для этого построим интерактивные матрицы проекта (таблицы 6-9).

Таблица 6 – Интерактивные матрицы проекта

Сильные стороны проекта						
Возможно сти проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	B1	+	+	-	+	-
	B2	+	-	+	+	0
	B3	+	0	+	+	0
	B4	+	-	0	+	-
	B5	+	0	0	0	0

При анализе данной интерактивной таблицы можно выявить следующие коррелирующие сильные сторон и возможности: B1C1C2C4, B2B3C1C3C4, B4C1C4, B5C1.

Таблица 7 – Интерактивные матрицы проекта

Слабые стороны проекта					
Возможно сти проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	B1	0	0	+	0
	B2	-	-	0	0
	B3	0	-	-	-
	B4	0	0	0	-

	B5	-	-	-	0
--	----	---	---	---	---

При анализе данной интерактивной таблицы можно выявить следующие коррелирующие слабых сторон и возможности: B1Сл3.

Таблица 8 – Интерактивные матрицы проекта

Сильные стороны проекта						
Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	У1	+	-	0	+	0
	У2	-	-	+	0	+
	У3	-	0	0	0	0
	У4	0	-	-	0	0

При анализе данной интерактивной таблицы можно выявить следующие коррелирующие сильных сторон и угроз: У1С1С4, У2С3С5.

Таблица 9 – Интерактивные матрицы проекта

Слабые стороны проекта					
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4
	У1	0	0	0	+
	У2	0	0	0	0
	У3	-	0	0	0
	У4	-	0	-	-

При анализе данной интерактивной таблицы можно выявить следующие коррелирующие слабых сторон и угроз: У1Сл4.

4.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

Таблица 10 - Морфологическая матрица методов исследования ГК торфов

	1	2	3
А. Метод исследования	ГХ-МС	ИК-спектроскопия	ГЖХ
Б. Исследуемые характеристики	Групповой состав органической части торфа	Спектральные характеристики торфа в ИК-области, обнаружение функциональных групп.	Групповой состав органической части торфа

4.2.1. Составление перечня работ

Трудоемкость выполнения ВКР оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов.

Разделим выполнение дипломной работы на этапы, представленные в таблице 9:

Таблица 11– Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ра б	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка задания НИР	1	Составление и утверждения технического задания НИР	Руководитель
Выбор направления исследования	2	Выбор направления исследования	Руководитель

Продолжение таблицы 11

	3	Обзор современных методов исследований по выбранному направлению	Бакалавр
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, Бакалавр
Теоретическое обоснование и проведение экспериментальных исследований	5	Теоретическое обоснование и выбор экспериментальных методов исследований	Руководитель, Бакалавр
	6	Построение моделей и проведение экспериментов	Бакалавр
	7	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Бакалавр
Обобщение и оценка результатов	8	Анализ полученных результатов, выводы	Бакалавр, руководитель
	9	Оценка эффективности полученных результатов	Бакалавр, руководитель
Оформление отчета по НИР	10	Составление пояснительной записки	Бакалавр

4.3 Определение трудоемкости работ

Расчет трудоемкости осуществляется опытно-статистическим методом, основанным на определении ожидаемого времени выполнения работ в человеко-днях по формуле

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

где $t_{ож\ i}$ - ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы, чел.-дн.;

$t_{\min\ i}$ - минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\max i}$ - максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Рассчитаем значение ожидаемой трудоемкости работы:

Для установления продолжительности работы в рабочих днях используем формулу:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}, (3)$$

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

$t_{ож i}$ - ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.;

$Ч_i$ - численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Для удобства построения календарного план-графика, длительность этапов в рабочих днях переводится в календарные дни и рассчитывается по следующей формуле:

$$t_{ki} = T_{pi} k, (4)$$

где T_{ki} - продолжительность выполнения одной работы, календ.дн.;

T_{pi} - продолжительность одной работы, раб.дн.;

k – коэффициент календарности, предназначен для перевода рабочего времени в календарное.

Коэффициент календарности рассчитывается по формуле:

$$k = \frac{T_{кг}}{T_{кг} - T_{вд} - T_{пд}}, (5)$$

где $T_{кг}$ — количество календарных дней в году;

$T_{вд}$ — количество выходных дней в году;

$T_{пд}$ — количество праздничных дней в году.

Определим длительность этапов в рабочих днях и коэффициент календарности:

$$k = \frac{T_{\text{кг}}}{T_{\text{кг}} - T_{\text{вд}} - T_{\text{пд}}} = \frac{365}{365 - 104 - 10} = 1,45 (6)$$

тогда длительность этапов в рабочих днях, следует учесть, что расчетную величину продолжительности работ T_k нужно округлить до целых чисел[31].

Результаты расчетов приведены в таблице 12.

Таблица 12 – Временные показатели проведения ВКР

№ раб.	Исполнители	Продолжительность работ						
		$t_{\min}$, чел-дн.	$t_{\max}$, чел-дн.	$t_{\text{ож}}$, чел-дн.	T_p , Раб.дн	T_k Кал.дн	Y_i , %	Γ_i , %
1	Руководитель	4	7	5	5,2	8	5,57	5,57
2	Руководитель	12	43	24	24,4	35	26,15	31,73
3	Бакалавр	5	17	10	9,8	14	10,50	42,23
4	Руководитель, бакалавр	2	13	6	3,2	5	3,43	45,66
5	Руководитель, бакалавр	17	32	23	11,5	17	12,33	57,98
6	Бакалавр	9	19	13	13	19	13,93	71,92
7	Бакалавр	8	21	13	13,2	19	14,15	86,07
8	Руководитель, бакалав	2	6	4	1,8	3	1,93	88,00
9	Руководитель, бакалав	4	14	8	4	6	4,29	92,28
10	Бакалавр	4	12	7	7,2	10	7,72	100,00
Итого:						135		

4.4 Построение графика работ

Наиболее удобным и наглядным видом календарного плана работ является построение ленточного графика проведения НИР в форме диаграмм Ганта.

Диаграмма Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

График строится в рамках таблицы с разбивкой по месяцам и неделям (7 дней) за период времени дипломирования. При этом работы на графике

выделяются различной штриховкой в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу:

 – Руководитель;  – Бакалавр

Таблица 13 - Календарный план проекта

Этапы	Вид работы	Исполнитель	t _к	Декабрь				Январь				Февраль				Март				Апрель			
1	Составление и утверждения технического задания НИР	Руководитель	6																				
2	Выбор направления исследования	Руководитель	36																				
3	Обзор современных методов исследований по выбранному направлению	Бакалавр	16																				
4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, Бакалавр	6																				
5	Теоретическое обоснование и выбор экспериментальных методов исследований	Руководитель, Бакалавр	16																				
6	Построение моделей и проведение экспериментов	Бакалавр	17																				
7	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Бакалавр	18																				
8	Анализ полученных результатов, выводы	Бакалавр, руководитель	3																				
9	Оценка эффективности полученных результатов	Бакалавр, руководитель	6																				
10	Составление пояснительной записки	Бакалавр	8																				

4.5 Бюджет научного исследования

При планировании бюджета НТИ должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с его выполнением

4.5.1 Расчет материальных затрат НТИ

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$З_{\text{м}} = (1 + k_{\text{т}}) \cdot \sum_{i=1}^m \Pi_i \cdot N_{\text{расх}i}, \quad (7)$$

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

$N_{\text{расх}i}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м² и т.д.);

Π_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м² и т.д.);

$k_{\text{т}}$ – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

Материальные затраты, необходимые для данной разработки, отражены в таблице 11

Таблица 14–Материальные затраты

Наимено-вание затрат	Ед. изм.	Количество			Цена за ед., руб			Затраты на материалы (З _м), руб.		
		Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
Торф	кг	1	1	1	200	200	200	200	200	200
Метанол	кг	0,06	-	-	20	-	-	1,2	-	-
Четыреххлористый углерод	л	-	-	0,7	-	-	1317	-	-	922
Бромид калия	кг	-	0,1	-	-	490		-	49,0	-
Хлороформ	кг	0,6	-	-	327	-	-	196,2	-	-
Бумага	шт.	100	100	100	2	2	2	200,0	200,0	200,0
Ручка	шт.	2	2	2	20	20	20	40,0	40,0	40,0
Итог								637,4	489,0	1361,9

4.5.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ

В данную статью включают все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по конкретной теме, с учетом амортизации. При приобретении спецоборудования необходимо учесть затраты по его доставке и монтажу в размере 15% от его цены.

Таблица 15- Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Количество единиц			Цена единицы оборудования, руб	Общая стоимость, руб.		
	Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3		Исп.1	Исп.2	Исп.3
Магнитного хромато-масс-спектрометр DFS фирмы "ThermoScientific"	1	-	-	150000	172500	-	-
Система высокоэффективной жидкостной хроматографии Agilent 1200	-	-	1	500000	-	-	575000
ИК- Фурье - спектрометре Nicolet 5700	-	1	-	162000	-	186300	-
Аналитические весы Pionir	1	1	1	10257	11795	11795	11796
Колба плоскодонная, 500 мл	2	2	2	262	524	524	524
Колба мерная, 100 мл	2	2	2	105	210	210	210
Колба мерная, 1000 мл	1	1	1	130	130	130	130
Мерный цилиндр, 100 мл	1	1	1	88	88	88	88
Пипетка градуированная, 10 мл	2	2	2	165	330	330	330
Эксикатор	1	1	1	702	702	702	702

Промывалка	1	1	1	120	120	120	120
Итого					186400	200200	588900

4.5.3 Расчет заработной платы исполнителей темы

В состав основной заработной платы включается премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 10 % от тарифа или оклада. Расчет основной заработной платы сводится в табл. 16.

Таблица 16 - Расчет основной заработной платы

№ п/п	Наименование этапов	Исполнители по категориям	Трудоемкость, чел.-дн.			Заработная плата, приходящаяся на 1 чел.-дн, руб.	Всего заработная плата по тарифу (окладам), руб		
			Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3		Исп. 1	Исп. 2	Исп. 3
1	Составление и утверждения технического задания НИР	Руководитель	2	2	2	3440	7568	7568	7568
2	Выбор направления исследования	Руководитель	14	14	14	3440	52976	52976	52976
3	Обзор современных методов исследований по выбранному направлению	Бакалавр	5	5	5	560	3080	3080	3080
4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, бакалавр	5	5	5	4000	22000	22000	22000
5	Теоретическое обоснование и выбор экспериментальных методов исследований	Руководитель, бакалавр	20	20	20	4000	88000	88000	88000
6	Построение моделей и проведение экспериментов	Бакалавр	7	12	8	560	4312	7392	4928
7	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиям	Бакалавр	10	10	10	560	6160	6160	6160

	и								
8	Анализ полученных результатов, выводы	Руководитель, бакалавр	4	4	4	4000	17600	17600	17600

Продолжение таблицы 16

9	Оценка эффективности и полученных результатов	Руководитель, бакалавр	7	7	7	4000	30800	30800	30800
10	Составление пояснительной записки	Бакалавр	4	4	4	560	2464	2464	2464
	Итого						234960	238040	235576

Проведем расчет заработной платы относительно того времени, в течение которого работал руководитель и студент. Принимая во внимание, что за час работы руководитель получает 430 рублей, а студент 70 рублей (рабочий день 8 часов).

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НТИ и дополнительную заработную плату:

$$З_{зп} = З_{осн} + З_{доп} \quad (8)$$

Максимальная основная заработная плата руководителя равна примерно 160 тыс. рублей, а студента 74,9 тыс. рублей.

Дополнительная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$З_{доп} = k_{доп} \cdot З_{осн} \quad (9)$$

где $k_{доп}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0,12%).

Таким образом, заработная плата руководителя равна 179200 рублей, студента – 83955 рублей.

4.5.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$З_{внеб} = k_{внеб} \cdot (З_{осн} + З_{доп}), \quad (10)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.) [32].

Отчисления во внебюджетные фонды представим в табличной форме – табл.17.

Таблица 17 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата			Дополнительная заработная плата		
	Исп. 1	исп. 2	Исп. 3	Ис п.1	исп.2	Исп.3
Руководитель	160000	160000	160000	19200	19200	19200
Бакалавр	74960	78040	75576	8995,2	9364,8	9069,1
Коэффициент отчислений во внебюджетный фонд	0,302					
Итого						
Исполнение 1	79473					
Исполнение 2	80515					

Исполнение 3	79681
-----------------	-------

4.5. 5 Накладные расходы

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

$$З_{\text{накл}} = (\sum \text{сумма}) \cdot k_{\text{нр}}, \quad (9)$$

где $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов можно взять в размере 16%.

4.5.6 Формирование бюджета затрат научно исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в таб.18.

Таблица 18 - Расчет бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.		
	Исп.1	Исп.2	Исп.3
Материальные затраты НТИ	637,4	489,0	1361,9
Затраты на специальное оборудование для экспериментальных работ	186400	200200	588900
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	234960	238040	235576

Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	28195,2	28564,8	28269,1
Отчисления во внебюджетные фонды	79473	80515	79681
Накладные расходы	84746,4	87649,2	149406, 0
Бюджет затрат НТИ	614412	635458	108319 4

4.6 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:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}} \quad (10)$$

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.

$$\text{Для нашей разработки: } I_{\text{финр}}^p = \frac{614412}{1083194} = 0,57$$

$$\text{Для первого аналога: } I_{\text{финр}}^{a1} = \frac{635458}{1083194} = 0,59$$

$$\text{Для второго аналога: } I_{\text{финр}}^{a2} = \frac{1083194}{1083194} = 1$$

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

$$I_{pi} = \sum a^i * b^i,$$

$$I_{исп.i} = \frac{I_{pi}}{I_{финр}}, \quad I_{pi} = \sum a^i * b^i, \quad (11)$$

$$\Xi_{cp} = \frac{I_{исп.i}}{I_{исп.маx}}$$

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

a^i - весовой коэффициент i-го варианта исполнения разработки;

b^i - бальная оценка i-го варианта исполнения разработки, устанавливается экспертным путем по выбранной шкале оценивания;

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности проведем в форме таблицы (табл. 19).

Таблица 19 - Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Бальная оценка			Интегральный показатель ресурсоэффективности		
		Ис п.1	Ис п.2	Ис п.3	Ис п.1	Исп .2	Исп .3
1. Надежность	0,2	5	4	5	1	0,8	1
2. Универсальность	0,2	5	4	4	1	0,8	0,8
3. Уровень материалоемкости	0,15	5	4	5	0,75	0,6	0,75
4. Функциональная мощность	0,2	5	4	5	1	0,8	1
5. Ремонтопригодность	0,1	4	4	3	0,4	0,4	0,3
6. Энергосбережение	0,15	4	4	4	0,6	0,6	0,6
Итого	1				4,75	4	4,4

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

$$I_{исп.i} = \frac{I_{pi}}{I_{финр}}, \quad (12)$$

Для нашего исследования: $I_{исп1} = 4,75/0,57 = 8,4$.

Для первого аналога: $I_{исп1} = 4/0,59 = 6,8$.

Для второго аналога: $I_{исп1} = 4,45/1 = 4,5$.

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта [33]. Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathfrak{E}_{cp} = \frac{I_{исп.i}}{I_{исп.max}}, \quad (13)$$

Таблица 20 - Сравнительная эффективность разработки

Показатели	Исп.1	Исп.2	исп. 3
Интегральный финансовый показатель разработки	0,57	0,59	1,00
Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,75	4	4,45
Интегральный показатель эффективности	8,4	6,8	4,5
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,8	0,5

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволило определить, что существующий вариант решения поставленной в бакалаврской работе технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности является наиболее приемлемым.

