

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

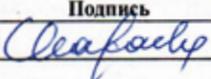
БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы

Тестирование соединений на гербицидную активность

УДК 54-3:543.2:632.254

Студент

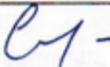
Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д71	Шараева Александра Андреевна		06.06.2021

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент НОЦ Н.М. Кижнера	Белянин М.Л.	к.х.н.		09.06.2021

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

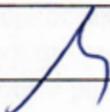
По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Спицына Л.Ю.	к.э.н.		25.05.2021

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ассистент	Черемискина М.С.	-		27.04.2021

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ООП 19.03.01 Биотехнология	Лесина Ю.А.	к.х.н.		09.06.2021

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП

по направлению 19.03.01 Биотехнология

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

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

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

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

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 19.03.01 Биотехнология
 26.01.2021, Лесина Ю. А.
 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

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

Студенту:

Группа	ФИО
4Д71	Шараевой Александре Андреевне

Тема работы:

Тестирование соединений на гербицидную активность	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	№34-53/с от 03.02.2021
Срок сдачи студентом выполненной работы:	06.06.2021

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, импульсный и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объектом исследования является влияние различных соединений, полученных методом химического синтеза на рост однодольных и двудольных растений, а также корреляция гербицидных свойств веществ и их химической структуры.</p>
--	---

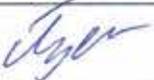
<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> • Обзор литературы • Объект и методы исследования • Описание экспериментальной части • Результаты и обсуждение проведенного исследования • Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение • Социальная ответственность • Заключение
--	--

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

<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</p> <p><i>(с указанием разделов)</i></p>	
<p>Раздел</p>	<p>Консультант</p>
<p>Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</p>	<p>Спицына Л. Ю., доцент ОСГН ШБИП ТПУ, к.э.н.</p>
<p>Социальная ответственность</p>	<p>Черемискина М. С., ассистент</p>

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	<p>26.01.2021</p>
--	-------------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
<p>доцент НОЦ Н.М. Кижнера</p>	<p>Белянин М.Л.</p>	<p>к.х.н.</p>		<p>26.01.2021</p>

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
<p>4Д71</p>	<p>Шараева Александра Андреевна</p>		<p>26.01.2021</p>

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

Студенту:

Группа	ФИО
4Д71	Шараевой Александре Андреевне

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

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

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Бюджет проекта – не более 308 868,212 руб., в т.ч. затраты по оплате труда – не более 217 254,83 руб.
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Значение показателя интегральной ресурсоэффективности – не менее 4,5 баллов из 5
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Ставка на отчисление во внебюджетные фонды для учреждений 30%. Коэффициент накладных расходов 0,16.

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Оценены коммерческий потенциал, а также перспективность научного исследования с позиции ресурсосбережения и перспективности.
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Проведено планирование основных этапов научно-исследовательской работы, с привязкой к исполнителям, также проведен расчет бюджета научных исследований.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Определены показатели ресурсной, финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности проекта.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Спицына Любовь Юрьевна	К.Э.Н.		01.02.21

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д71	Шараева Александра Андреевна		01.02.2021

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
4Д71	Шараевой Александре Андреевне

Школа	Инженерная школа новых производственных технологий	Отделение (НОЦ)	НОЦ Н.М. Кижнера
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	19.03.01 Биотехнология

Тема ВКР:

Тестирование соединений на гербицидную активность	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
<p>1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения</p>	<p>Объектом исследования являются влияние различных соединений, полученных методом химического синтеза на рост однодольных и двудольных растений, а также зависимость гербицидных свойств веществ от их химической структуры.</p> <p>Рабочая зона – лаборатория НОЦ Н.М. Кижнера ТПУ, 311 аудитория.</p> <p>Область применения исследования – сельское хозяйство, научно-исследовательские работы</p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ul style="list-style-type: none"> – Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 29.12.2020); – ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования; – ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования; – специальная должностная инструкция работника.
<p>2. Производственная безопасность:</p> <p>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p>	<p>Опасные и вредные факторы:</p> <ul style="list-style-type: none"> – недостаточная освещенность рабочей зоны; – отклонение показателей микроклимата; – превышение уровня шума; – связанные с электрическим током; – пожарная опасность; – проникновение раздражающих, токсичных, канцерогенных и sensibilizing веществ в организм человека через органы дыхания, желудочно-кишечный тракт,

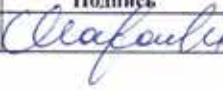
	оболочки;
3. Экологическая безопасность:	<p>Область воздействия на гидросферу:</p> <ul style="list-style-type: none"> – загрязнение бытовыми стоками в результате удаления реагентов в хозяйственно-бытовую канализацию; <p>Область воздействия на атмосферу:</p> <ul style="list-style-type: none"> – возможность попадания в атмосферу летучих токсичных веществ; <p>Область воздействия на литосферу:</p> <ul style="list-style-type: none"> – загрязнение литосферы вследствие неправильной утилизации органического материала, содержащего токсичные вещества, загрязнение бытовым мусором.
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<p>Возможные ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения:</p> <ul style="list-style-type: none"> – техногенного характера: пожары, обрушения зданий, аварии на тепловых сетях (системах горячего водоснабжения) в холодное время года; – природного характера: землетрясения, метеорологические опасные явления; – биолого-социального и социального характера: инфекционные заболевания людей, терроризм, массовые беспорядки; – военного характера: последствия введения боевых действий. <p>Наиболее типичная ЧС:</p> <ul style="list-style-type: none"> – возникновения пожара;

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Черемискина Мария Сергеевна	-		08.02.2021

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д71	Шараева Александра Андреевна		08.02.2021

Реферат

Выпускная квалификационная работа 110 с., 18 рис., 44 табл., 32 источников, 2 прил.

Ключевые слова: гербицидная активность, ингибирование, угнетение роста, пшеница, первичный скрининг, структура.

Объектом исследования является влияние различных соединений, полученных методом химического синтеза на рост однодольных и двудольных растений, а также корреляция гербицидных свойств веществ и их химической структуры.

Цель работы – исследование гербицидной активности соединений различной структуры на двудольных и однодольных растениях, а также влияния структуры веществ на их гербицидные свойства, для выявления потенциальных ингибиторов роста.

В процессе исследования проводилось определение гербицидной активности методом первичного скрининга.

В результате исследования были протестированы 69 соединений, из них выявлены явные ингибиторы и активаторы роста. Описана корреляция структуры соединения и его гербицидной активности.

Область применения: сельское хозяйство.

В будущем планируется протестировать известные соединения в различных дозировках, проверить безопасность некоторых соединений на живых объектах, а также исследовать новые соединения.

Список использованных сокращений:

2,4-Д кислота – 2,4-дихлорфеноксипропановая кислота

ГФПД (HPPD) – 4-гидроксибензилпируват диоксигеназа

ППО (PPO) – протопорфириноген IX оксидаза

ДМСО – диметилсульфоксид

HRAC – Herbicide Resistance Action Committee – Комитет по резистентности к гербицидам

ААС – ацетилкофермент А-карбоксилаза

ALS – ацетолактатсинтаза

АНАС – синтаза ацетогидроксикислот

EPSPS – 5-енолпировилшикимат-3-фосфатсинтаза

GS – глутаминсинтаза

DHPS – дигидроптероатсинтаза

Оглавление

Введение	14
1 Литературный обзор.....	16
1.1 Применение гербицидов в сельском хозяйстве. Влияние на окружающую среду и человека	16
1.2 Гербициды. Общая характеристика. Классификация	19
1.3 Общая характеристика ферментов. Механизм влияния гербицидов на ферментативную активность	23
1.3.1 Общая характеристика ферментов	23
1.3.2 Механизмы влияния гербицидов на ферментативную активность ..	24
2 Объект и методы исследования	32
3 Экспериментальная часть	33
3.1 Методика проведения исследования гербицидной активности на проростках пшеницы	33
3.2 Методика проведения исследования гербицидной активности на проростках гороха	35
3.3 Статистический анализ результатов	38
4 Результаты проведенного исследования.....	43
4.1 Обсуждение результатов.....	47
4.2 Выводы по обсуждению результатов.....	56
5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение... 57	
5.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	57
5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	57
5.1.2 Анализ конкурентных технических решений.....	59

5.1.3 SWOT-анализ.....	61
5.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований.....	63
5.3 Планирование научно-исследовательских работ	64
5.3.1 Структура работ в рамках научного исследования	64
5.3.2 Определение трудоемкости выполнения работ.....	65
5.3.3 Разработка графика проведения научного исследования	66
5.4 Бюджет научно-технического исследования.....	69
5.4.1 Расчет материальных затрат НТИ	70
5.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для экспериментальных работ.....	71
5.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы	73
5.4.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы.....	75
5.4.5 Отчисления во внебюджетные фонды	76
5.4.6 Накладные расходы.....	77
5.4.7 Формирование бюджета научно-исследовательского проекта.....	78
5.5 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования ..	79
6 Социальная ответственность	82
Введение	82
6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	83
6.1.1 Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства.	83
6.1.2 Проектирование рабочей зоны	84
6.2 Профессиональная социальная безопасность.....	85

6.2.1 Недостаточная освещенность рабочей зоны.....	86
6.2.2 Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.....	86
6.2.3 Шум.....	87
6.2.4 Электробезопасность	88
6.2.5 Пожарная безопасность	88
6.2.6 Вредные вещества	89
6.3 Экологическая безопасность	91
6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	92
6.4.1 Анализ возможных чрезвычайных ситуаций.....	92
6.4.2 Анализ наиболее вероятной чрезвычайной ситуации.....	92
Выводы по разделу.....	94
Заключение	95
Список используемой литературы	96
Приложение А	100
Приложение Б.....	110

Введение

Актуальность работы: в настоящее время, когда остро стоит вопрос о проблеме перенаселения, человечество ищет способы прокормить себя. Во всем мире количество обрабатываемых площадей растет ежегодно, но соотношение населения Земли и площадей только уменьшается. Урожайность сельскохозяйственных культур зависит не только от климата, погодных условий, орошения и их сортовых особенностей, но и от потерь, вызываемых болезнями, вредителями и сорняками. Основная доля потерь урожая связана с сорными растениями (около 30%) и в меньшей степени с вредителями, болезнями. Гербициды изобрели в XX веке и до сих пор эти разработки используются в сельском хозяйстве. Здесь приходится сталкиваться с такой проблемой, как приобретенная устойчивость, когда сорняки становятся невосприимчивыми к агрохимикатам. Также широко обсуждается токсичность и канцерогенность используемых средств, ведь они попадают в почву, воду, в пищу. Поэтому они должны быть безопасными не только для живых организмов, но и для экологии. Такой список требований касательно свойств агрохимических средств, привлекает внимание исследователей и крупных компаний. Индустрия гербицидов крайне прибыльна. Продажи ведущих компаний составляют десятки миллиардов долларов. Компании агробизнеса охотно вкладывают средства на развитие или разработку новых соединений. Уже на основе этих фактов можно утверждать, что поиск или создание новых соединений, обладающими гербицидными свойствами является актуальным и пользуется спросом.

Цель работы: исследование гербицидной активности соединений различной структуры на двудольных и однодольных растениях, а также влияния структуры веществ на их гербицидные свойства, для выявления потенциальных ингибиторов роста.

Задачи:

1. Протестировать соединения 1-69 на семенах пшеницы для выявления угнетения роста побегов.
2. Провести повторные опыты с некоторыми соединениями, которые будут выбраны случайным образом.
3. Протестировать соединения 50, 51, 53, 64 на семенах гороха для выявления угнетения роста побегов.
4. Обработать полученные результаты, провести статистический анализ.
5. Для проявивших угнетающую или стимулирующую активность провести анализ «структура-активность», выявить возможные закономерности.

Объект исследования: влияние различных соединений, полученных методом химического синтеза на рост однодольных и двудольных растений, а также корреляция гербицидных свойств веществ и их химической структуры.

Научная новизна работы: исследован ряд новых соединений различной структуры и описана их гербицидная активность

Практическая значимость результатов: найдены соединения, обладающие, как стимулирующим, так и угнетающим действием на рост растений, которые могут являться потенциальными агрохимическими средствами.

1 Литературный обзор

1.1 Применение гербицидов в сельском хозяйстве. Влияние на окружающую среду и человека

В связи с постоянно растущим населением Земли и нехваткой плодородных почв, человечество, как следствие, сталкивается с повсеместной нехваткой продовольствия. Сорняки – одна из современных проблем сельского хозяйства. Для борьбы с побочной культурой фермеры прибегают к различным стратегиями: севооборот, обработка почвы и использование гербицидов. Последние все чаще используются в растениеводстве и, соответственно, спрос на рынке гербицидов быстро растет.

В течение последних десятилетий технология выращивания сельскохозяйственных культур не мыслится без применения химических средств уничтожения сорных растений. Гербициды в мире, особенно в странах с развитым земледелием, занимают едва ли не основное место в химизации сельского хозяйства, заметно опережая в этом отношении другие средства защиты растений.

На протяжении нескольких лет гербициды способствовали значительному увеличению урожайности, обеспечивая высокую эффективность и экономичность, при использовании относительно простого средства для контроля роста сорняков.

Однако использование агрохимикатов неизбежно причиняет серьезный вред как людям, так и нашей экосистеме. Насчитывается около 3 миллионов случаев госпитализации при остром отравлении гербицидами по всему миру каждый год, и примерно 10% из них (около 300 000) приводят к смертельному исходу [1].

Агрохимикаты быстро распространяются в воду и почву, нанося серьезный экологический ущерб, являясь причиной гибели диких животных.

Наиболее известным и распространенным гербицидом является 2,4-дихлорфеноксиуксусная кислота. Средство было впервые синтезировано в

1941 году и поступило в продажу в США в 1944 году [2]. 2,4-Д кислота широко и интенсивно используется для борьбы с некоторыми однолетними и многолетними широколистными сорняками при выращивании пшеницы, кукурузы, хлопчатобумажных, соевых и табачных растений, а также для обработки несельскохозяйственных почв.

Не смотря на снижение использования в США 2,4-Д кислоты в качестве гербицида с 18 миллионов кг в год в 1950-х годах до нынешнего уровня – около 1 миллиона кг в год, по всему миру она остается важным компонентом селективной борьбы с двудольными сорняками на посевах, дерновых и придорожных зонах [3]. Например, В Китае 2,4-Д в основном используется для защиты зерновых культур. При этом дозировка составляет от 0,8 кг активного ингредиента на 1 га до 1,5 кг на 1 га [2].

Однако широко распространенное и частое применение 2,4-Д кислоты в сельском хозяйстве может вызвать токсикологическое загрязнение окружающей среды, проблемы со здоровьем человека и привести к появлению устойчивых к данному соединению сорняков. Несмотря на ее короткий период полураспада, 2,4-Д кислота часто обнаруживается в почве, грунтовых и поверхностных водах в концентрациях от нескольких единиц до нескольких сотен микрограммов на литр. Это связано с ее высокой растворимостью и низкой сорбцией почвой.

Известны различные токсические эффекты, вызываемые 2,4-Д кислотой. Некоторые исследования предположили, что 2,4-Д кислота может влиять на физиологические и поведенческие реакции морских организмов, а также быть причиной рака желудка, инфаркта миокарда и диабетом 2 типа у человека [4]. В 2015 году Международное агентство по изучению рака определило гербициды глифосат и 2,4-Д как «возможные канцерогены» [5].

Кроме того, 2,4-Д кислота может влиять на микробиомы почвы, изменяя баланс между микробными популяциями [2].

Существуют и другие химических соединений, используемые для борьбы с сорняками и классифицируемые по принципу воздействия на

ферменты. Например, гербициды, ингибирующие синтазу ацетогидрокси кислоты, обладают рядом преимуществ, таких как превосходная селективность сельскохозяйственных культур, низкий уровень расхода, благоприятное воздействие на окружающую среду и низкая токсичность для млекопитающих. Однако длительное чрезмерное использование гербицидов, ингибирующих синтазу ацетогидрокси кислоты, привело к развитию серьезной устойчивости сорняков к данному типу веществ.

В случае ингибирования 4-гидроксифенилпируват диоксигеназы, многие исследования отмечают, что некоторые продукты коммерческого класса и их метаболиты, если они существуют, могут оказывать токсическое действие на живые организмы [6].

Тем не менее новые проблемы, такие как приобретенная устойчивость сорняков, токсичность гербицидов, низкая селективность, высокая стоимость исследований, производства, и регистрации гербицидов только растут с годами. Следовательно, по-прежнему существует серьезная потребность в разработке мощных, селективных, экологически чистых и выгодных с экономической точки зрения гербицидов, которые смогут бороться с широким спектром сорняков, а также с их устойчивыми биотипами.

1.2 Гербициды. Общая характеристика. Классификация

Гербициды (от лат. herba – трава и caedo – убиваю) – химические соединения, применяемые для контроля роста или полного уничтожения нежелательной растительности.

Гербициды делятся на две основные группы:

- сплошного действия, уничтожающие все виды растений;
- избирательного действия, уничтожающие растения определенных видов и в оптимальных дозах безопасны для других.

Первые применяются для уничтожения растительности вокруг промышленных объектов, на лесных вырубках, аэродромах, железных и шоссейных дорогах, под высоковольтными линиями электропередачи, в дренажных каналах, прудах и озерах. А вторые – для защиты культурных растений от сорняков, другими словами, для химической прополки.

В свою очередь вещества в каждой из групп подразделяются на:

- контактные, действующие при контакте с наземными частями растений, при этом гибнут те участки тканей, которые непосредственно соприкасаются с гербицидами; также успех обработки зависит от погодных условий во время и после обработки, от возраста и чувствительности сорных растений; у некоторых из них уже на следующий день появляются пятна вследствие ожога, жизнедеятельность нарушается, однако сорняки, у которых органы возобновления находятся в почве, после обработки гербицидами способны отрастать;
- системные, попадающие внутрь растения при контакте или с почвенным раствором; при опрыскивании вегетирующих растений они уничтожают их надземные и подземные органы; попадая на лист, гербициды всасываются и по сосудисто-проводящей системе передвигаются в корни и другие органы, что впоследствии приводит к гибели сорных растений.

В 1990-х гг. Комитет по резистентности к гербицидам (HRAC) разработал систему классификации гербицидов, признанную во всем мире [7].

Группы обозначаются буквами латинского алфавита. В некоторых группах существуют подгруппы, которые обозначаются буквой с численным индексом, необходимые из-за разных молекулярных механизмов действия этих гербицидов. Полная классификация HRAC представлена в таблице 1.1.

Таблица 1.1 – Классификация гербицидов по механизму действия (HRAC, 2013) [7]

Группы HRAC	Механизм действия (мишень)	Группы HRAC	Механизм действия (мишень)
A	Ингибиторы ACC	H	Ингибиторы GS
B	Ингибиторы ALS/AHAS	I	Ингибиторы DHPS
C ₁	Ингибиторы фотосинтеза в фотосистеме II	K ₁	Ингибиторы сборки микротрубочек
C ₂	Ингибиторы фотосинтеза в фотосистеме II	K ₂	Ингибиторы митоза/организации микротрубочек
C ₃	Ингибиторы фотосинтеза в фотосистеме II	K ₃	Ингибиторы элонгаз жирных кислот (клеточного деления)
D	Акцепторы электронов в фотосистеме I	L	Ингибиторы биосинтеза целлюлозы (клеточной стенки)
E	Ингибиторы PPO	M	Разобщители окислительного фосфорилирования (H ⁺ -ионофоры)
F ₁	Обесцвечивающие гербициды: ингибиторы PDS	N	Ингибиторы биосинтеза липидов (не связанные с AAC)
F ₂	Обесцвечивающие гербициды: ингибиторы HPPD	O	Синтетические ауксины
F ₃	Обесцвечивающие гербициды: ингибиторы биосинтеза каротиноидов с неизвестной мишенью действия	P	Ингибиторы транспорта ауксинов
G	Ингибиторы EPSPS	Z	Неизвестный механизм действия

Позиции R-Y пока остаются незанятыми, а в группу Z помещены гербициды неизвестными или множественными мишенями биологического действия, которым в будущем может быть отведено свое место в классификации.

Список применяемых гербицидов огромен, поэтому следует остановиться лишь на трех основных и наиболее перспективных группах селективных гербицидов: группа арилоксиуксусных кислот, группа триазина и группа замещенных мочевины.

Арилоксикарбоновые кислоты. Замещенные арилоксикарбоновые кислоты продолжительное время использовались как системные гербициды избирательного действия, уничтожающие двудольные сорняки в посевах однодольных (злаковых) растений. К данной группе относятся такие соединения, как 2,4-дохлорфенксиуксусная (2,4-Д кислота) и 2-метил-4-хлорфенксиуксусная (2М-4Х) кислоты (рисунок 1.1).

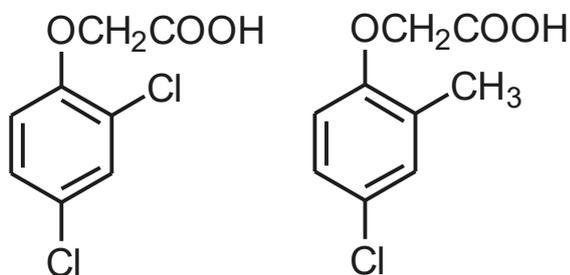


Рисунок 1.1 – 2,4 Д и 2М-4Х кислоты

Большинство этих соединений оказывали гербицидное действие при содержании, большем, чем 0,01%, при меньшем же содержании (менее 0,001%) являлись стимуляторами роста [8].

Группа триазина. В 1955 году были впервые описаны гербицидные свойства 2-хлор-4,6-бис(диэтиламино)-*симм*-триазина.

Вещество обладает малой токсичностью для теплокровных, не действует на большинство культурных растений (морковь, капусту, томаты, огурцы и др.) в дозах до 10 кг/га и качественно уничтожает большинство сорняков [8]. В ходе исследования этой группы соединений был найден целый ряд активных и малотоксичных соединений: 2-хлор-4,6-бис(этиламино)-*симм*-триазин (симазин), а также пропазин и атразин (рисунок 1.2).

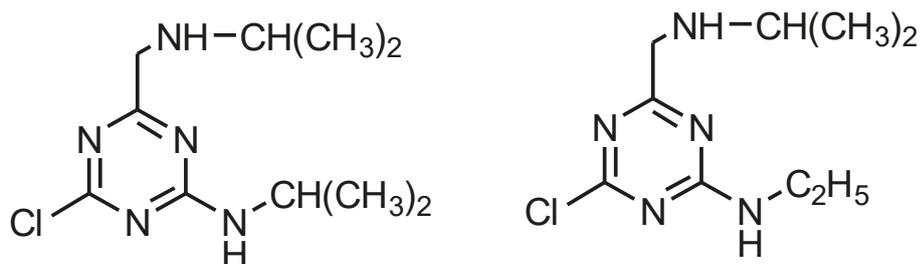


Рисунок 1.2 – Пропазин и атразин

Группы замещенных мочевины или сульфонилмочевины. В начале 80-х годов XX столетия был запатентован первый представитель данного класса – хлорсульфурон (рисунок 1.3).

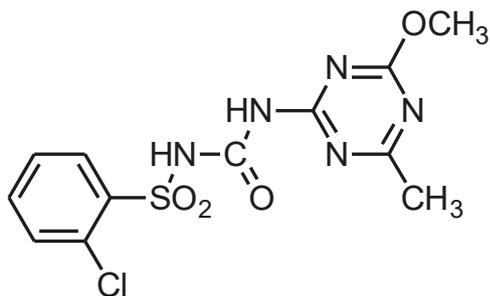


Рисунок 1.3 – Хлорсульфурон

При применении данного соединения в качестве избирательного гербицида, уничтожающего двудольные сорняки в посевах злаковых и льна, действующие дозы были всего 5-15 г на гектар при полной нетоксичности для теплокровных. Даже при его высокой стоимости прибавка урожая составляет до 50% [8].

1.3 Общая характеристика ферментов. Механизм влияния гербицидов на ферментативную активность

1.3.1 Общая характеристика ферментов

Ферменты – это белки, катализирующие химические реакции. В биологической клетке ферменты необходимы для протекания практически всех химических реакций. Как и катализаторы, ферменты работают за счет снижения энергии активации, таким образом увеличивая скорость протекания реакции, в результате быстрее достигается равновесное состояние и образуются продукты реакции.

Биологическая функция фермента обусловлена наличием в его структуре активного центра. Лиганд, взаимодействующий с активным центром белка, называют субстратом. В активном центре фермента есть аминокислотные остатки, функциональные группы которых обеспечивают связывание субстрата, и аминокислотные остатки, функциональные группы которых осуществляют химическое превращение субстрата.

Ускоряя лишь некоторые реакции среди многих, ферменты, образованные в клетке, определяют какие метаболические изменения происходят в этой клетке. Так, группа ферментов, действующих последовательно один за другим, определяют метаболические пути превращения исходных веществ через ряд промежуточных соединений в продукты.

1.3.2 Механизмы влияния гербицидов на ферментативную активность

Одним из способов регулирования активности фермента является ингибирование. Ингибиторы – молекулы, которые снижают активность ферментов. Они действуют через различные механизмы, такие как ингибирование биосинтеза amino- или жирных кислот, или вмешательство в формирование микротрубочек или в фотосинтетические световые реакции переноса электронов (рисунок 1.4).

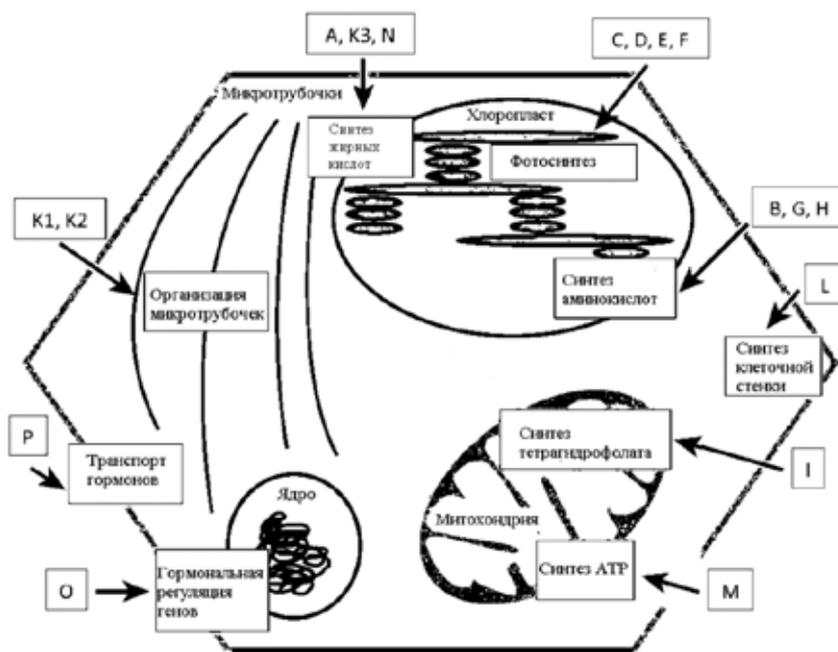


Рисунок 1.4 – Клеточные мишени действия гербицидов и классификация HRAC гербицидов по механизму действия [7]

Продолжительное использование одного и того же гербицида или гербицидов, имеющих одну и ту же мишень, приводит к появлению сорняков, устойчивых к таким химическим веществам.

В последнее десятилетие были разработаны некоторые аналоги природных продуктов, которые используются в качестве гербицидов, но они составляют лишь около 8% всех химикатов, используемых для выращивания и защиты сельскохозяйственных культур [9]. Природные соединения являются экологически безопасными, так как их период полураспада в почве

обычно короче по сравнению с синтетическими гербицидами. Более того, их широкое структурное разнообразие дает возможности для открытия новых гербицидов.

Несколько активных веществ, используемых в настоящее время, нацелены на фотосинтетический процесс, и их можно классифицировать как ингибиторы транспорта электронов, разобщающий агент, ингибитор переноса энергии, ингибирующие разобщители или акцепторы электронов [9].

Рассмотрим некоторые наиболее важные ферменты, которые являются целевыми в процессе разработки гербицидов с ингибирующими свойствами.

Одним из таких ферментов является 4-гидроксифенилпируват диоксигеназа (ГФПД). Во всех аэробных организмах, за исключением некоторых грамположительных бактерий, ГФПД катализирует превращение 4-гидроксифенилпирувиноградную кислоту в гомогентизированную кислоту по пути метаболизма тирозина.

Изучение этого пути привело к появлению нескольких видов коммерческих гербицидов, ингибирующих ГФПД (таблица 1.4) [5].

Таблица 1.4 – Широко используемые коммерческие гербициды, ингибирующие ГФПД

Действующее вещество	Год выпуска	Компания-производитель	Культура	Сорняки
1	2	3	4	5
тефурилтрион	2010	Bayer Crop Science	рис	одно- и многолетние
темботрион	2007		кукуруза	широколистные
мезотрион	2001	Syngenta		одно- и многолетние
бициклопирон	2015			широколистные
сулькотрион	1991	ICI	рис	широколистные
бензобициклон	2001	SDS Biotech		
изоксафлютол	1998	Bayer Crop Science	кукуруза, сахарный тростник	широколистные
	2013		соя	

бензофенап	1987	Mitsubishi Chemical	рис	одно- и многолетние, широколиственные
------------	------	---------------------	-----	---------------------------------------

Продолжение таблицы 1.4

пирасульфотол	2008	Bayer Crop Science	пшеница, ячмень, тритикале	широколиственные
пиразоксифен	1985	Ishihara	рис	одно- и многолетние, широколиственные
пиразолинат	1980	Sankyo		одно- и многолетние
топрамезон	2006	BASF	кукуруза	однолетние и широколиственные

Исследования показали, что ГФПД-ингибиторы обладают рядом преимуществ, например, активность широкого спектра против широколиственных сорняков, в том числе устойчивых к другим гербицидам, высокая селективность, низкий уровень расхода, низкая токсичность, а также возможность применения в периоды до и после появления всходов.

В растениях ГФПД играет роль физиологического необходимого фермента для типичного роста. Действительно, его продукт, гомогентизированная кислота превращается в пластохинон-9, ключевой компонент биосинтеза каротиноидов и токоферолов. Эти соединения выполняют защитные функции в растениях, без которых невозможно их нормальное существование.

Таким образом происходит ингибирование реакции, катализируемой ГФПД, которая протекает в хлоропластах, зеленых пластидах, которые являются ключевым пигментом для фотосинтеза. Вследствие ингибирования процесс фотосинтеза становится невозможным и пигмент в листьях растения обесцвечивается [5].

Существуют гербициды, ингибирующие синтазу ацетогидрокси кислоты. Они имеют широкий спектр действия для борьбы со многими видами сорняков, и их открытие стало популярной темой исследований в области

гербицидов. Ацетогидрокси кислота синтаза – важный фермент биосинтеза аминокислот с разветвленной цепью (изолейцин, лейцин и валин), катализирует превращение 2-кетобутирата и пирувата в 2-ацето-2-гидроксибутират и превращение двух молекул пирувата в 2-ацетолактат [9]. В растениях изолейцин, лейцин и валин необходимы для построения белка и влияют на нормальный рост растений [10]. Ингибиторы синтазы ацетогидрокси кислоты проявляют свою биологическую активность путем прерывания вышеупомянутых биосинтетических путей.

Другой важной гербицидной мишенью является протопорфириноген IX оксидаза (ППО), которая катализирует окисление протопорфириногена IX до протопорфирина IX [11].

В растениях протопорфирин IX также является субстратом для биосинтеза хлорофиллов. Реакция, катализируемая ППО, протекает в хлоропластах и митохондриях. Ингибирование ППО может привести к накоплению протопорфирина IX в хлоропластах, что вызывает просачивание протопорфирина IX в цитоплазму. Там протопорфириноген IX в присутствии света и O₂ может генерировать активные формы кислорода, которые могут вызывать перекисное окисление липидов, что, в свою очередь, приводит к гибели клеток и обесцвечиванию растений [12]. Поэтому гербициды ППО еще называют перекисными гербицидами.

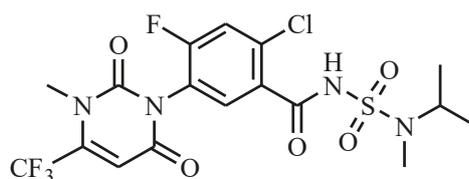
Гербициды ППО имеют ряд преимуществ, такие как низкая токсичность для млекопитающих, благоприятное воздействие на окружающую среду, широкий спектр действия, включая двудольные и однодольные сорняки, и низкий уровень расхода.

Гербициды, ингибирующие ППО, могут эффективно контролировать некоторые виды сорняков, устойчивых к триазину, синтазе ацетогидрокси кислоте и глифосату. Примечательно, что механизмы действия старых и новых ингибиторов схожи. Недавно разработанные гербициды, ингибирующие ППО, способны подавлять рост даже устойчивых к ППО-ингибиторам виды растений, например, сорняки рода *Amaranthus*.

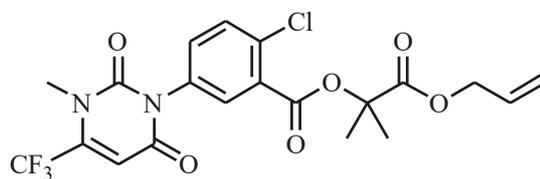
На сегодняшний день в литературе описаны более тысячи ингибиторов ППО, и только около 30 из них в настоящее время используются как гербициды для уничтожения сорняков на полях. Это зависит от структурных особенностей, многие ППО-гербициды имеют гидрофобные боковые цепи, с помощью которых легче протекает листовая абсорбция и производится перенос этих веществ в растениях. Некоторые коммерческие ППО гербициды имеют схожие структурные скелеты.

Они в основном разделены на дифениловые эфиры, фенилпиразолы, оксадиазолы, тиadiaзолы, триазиноны, пиримидиндионы и N-фенилфталимиды. Среди них дифениловые эфиры считаются относительно старым типом гербицидов, в то время как пиримидиндионы являются относительно новым видом гербицидов, открытым в начале 21-го век.

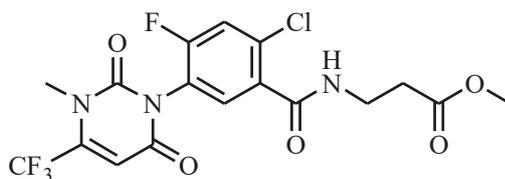
Например, сафлуфенацил, бутафенацил и тиафенацил (рисунок 1.5) относятся к ингибиторам пиримидиндионового типа и имеют разные по строению гидрофобные «головки», которые легче не только впитываются листвой, но и переносятся целиком по растению.



Saflufenacil (BASF, 2009)



Butafenacil (Syngenta, 2001)



Tiafenacil (FarmHannong, 2018)

Рисунок 1.5 – Структуры соединений таких, как сафлуфенацил, бутафенацил, тиафенацил

Бутафенацил был коммерциализирован Syngenta в 2001 году и в основном использовалась как неселективный гербицид для пред- и послевсходовых сорняков с расходом 75-150 г/га [11].

Сафлуфенацил был коммерциализирован BASF в 2009 году. Он считается самым успешным гербицидом за последние 20 лет. Сафлуфенацил может эффективно контролировать почти все важные биотипы широколиственных, пред- или послевсходовое внесение в дозе 18-125 г/га [11].

Тиафенацил был коммерциализирован компанией FarmHannong Co., Ltd, в 2018 г., как неселективный гербицид, который в основном использовался для послевсходовой борьбы с широколиственными и травяными сорняками и предпосевной подготовки, расход составляет 25-250 г/га [11].

Флумиоксазин (N-фенилфталимиды), тидиазимин (тиадиазолы) и трифлудимоксазин (триазиноны) (рисунок 1.6) относятся к разным группам гербицидов, однако все они содержат бензоксазиноновый скелет в качестве основного фрагмента, а бензоксазинон в свою очередь связан с гетероциклическими фрагментами через C – N связи.

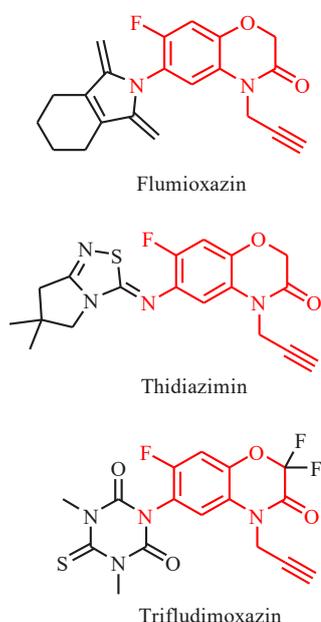


Рисунок 1.6 – Структуры таких соединений, как флумиоксазин, тидиазимин и трифлудимоксазин

Флумиоксазин – один из наиболее широко используемых ППО-ингибиторов, проявляющие активное гербицидное действие широкого спектра, в том числе против глифосат-резистентных сорняков рода *Amaranthus*.

Тидиазимин – эффективный контактный гербицид для борьбы с двудольными сорняками озимых зерновых культур.

Трифлудимоксазин – первый триазинон-содержащий ППО-гербицид с инновационным механизмом действия. Гербицид должен был коммерциализироваться компанией BASF в 2020 году [12]. Это первый ППО гербицид, содержащий новый триазиноновый фрагмент. Данное соединение показывает быстрое прожигающее действие на листьях сорняков в течение суток. Уникальность трифлудимоксазина заключается в том, что он эффективно подавляет рост сорняков разного рода, устойчивых к ППО-ингибиторам, такие как *Amaranthus* и *Ambrosia*.

Гербициды, ингибирующие ППО, являются одними из наиболее широко используемых гербицидов на полях по всему миру ввиду их эффективности. Однако долгое их воздействие может привести к развитию устойчивых к гербицидам биотипов.

Существует и другой вид гербицидов, вызывающий белковую дисфункцию. Например, ацетанилидные гербициды имеют общие электрофильные хлорацетамидные каркасы, которые могут присоединяться к цистеинам внутри белков. Цистеины играют важную роль в функции белков, в том числе ферментный катализ, посттрансляционная регуляция, окислительно-восстановительный баланс, белковое взаимодействие, а также они являются металлсвязывающими белками. Способность этого типа гербицидов реагировать со специфическими цистеинами в пределах определенного белка может влиять на функцию белка и вызывать последующие патологии [4].

Также стоит упомянуть механизм действия 2,4-Д кислоты. Основа селективности синтетических ауксинов связана со способностью

однодольных растений метаболизировать эти гербициды до неактивных полярных конъюгатов. Но есть свидетельства того, что такой усиленный метаболизм не может полностью объяснять высокий уровень устойчивости, наблюдаемый у большинства видов трав.

Основные пути метаболизма 2,4-Д кислоты в нескольких коммерчески важных зерновых и бобовых видах были идентифицированы в 1970-х годах как прямая конъюгация глюкозы или аминокислот (преимущественно аспартат и глутамат) к карбоксильной группе молекулы 2,4-Д кислоты через сложноэфирные амидные связи; и гидроксילирование фенольного кольца с последующим конъюгацией сахара (обычно неидентифицируемого) через эфирную связь [3].

В данном разделе описаны только некоторые возможные мишени для ингибиторов. Некоторые механизмы гербицидной активности остаются неизученными. Приведенные описания принципов действия известных или коммерческих соединений позволяют создать некоторое представление о метаболическом пути гербицидов в растениях.

2 Объект и методы исследования

Объектом исследования является влияние различных соединений, полученных методом химического синтеза на рост однодольных и двудольных растений, а также корреляция гербицидных свойств веществ и их химической структуры.

Исследование гербицидной активности синтезированных соединений проводили в лаборатории органической химии на базе ТПУ НОЦ Н.М. Кижнера по методике первичного скрининга [13].

Используемое оборудование: холодильник ВЕКО СS, весы аналитические НТR-120СЕ, весы лабораторные электронные WPS/C/2, автоматические дозаторы на 2-20 мкл, 5-50 мкл, 20-200 мкл, 100-1000 мкл.

Характеристика исследуемых веществ: для изучения угнетения роста однодольных и двудольных растений в лабораторных условиях были использованы 69 веществ различной структуры. Перечень исследованных веществ представлен в таблице А.1 в разделе экспериментальной части. Вещества были синтезированы в лаборатории органической химии на базе ТПУ НОЦ Н.М. Кижнера студентами под руководством М.Л. Беянина.

5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

5.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Работа по изучению гербицидной активности соединений различной структуры направлена на выявление наиболее перспективных соединений-ингибиторов или активаторов. Данные соединения в дальнейшем могут быть использованы как компоненты гербицидов или удобрений.

На сегодняшний день гербициды широко используются для борьбы с сорняками, что крайне важно для человека, продовольствия и окружающей среды в том числе. При этом длительное их использование приводит к тому, что некоторые сорняки становятся невосприимчивы к такому воздействию. Поэтому так важно создать новые селективные гербициды, обладающие высокой эффективностью и охватом широкого спектра сорняков. Кроме того, такие вещества должны быть безопасными для целевой культуры, окружающей среды и, конечно, человека.

Основными потребителями результатом данных исследований могут быть компании, основной деятельностью которых является производство агрохимических продуктов. Согласно статистическим данным лидирующими компаниями на 2019 г. являются Syngenta AG (Швейцария), Bayer Crop Science (Германия), Dow AgroSciences (США), ADAMA Agricultural Solutions (Израиль), Nufarm (Австралия), Sumitomo Chemical (Япония) и Nutrichem Company Limited (Китай). Все перечисленные производители существуют на рынке не первое десятилетие, а годовой доход каждого колеблется в пределах \$3-10 млрд. В России же к таким компаниям относится ГК «Содружество», ГК «Агро-Белогорье», ГК «Агропромкомплектация», ГАП «Ресурс», по итогам 2018 г. выручка которых составила 50-150 млрд. руб.

Такие компании крайне заинтересованы в новых рецептурах агрохимических продуктов, поэтому каждый производитель имеет свои исследовательские центры и лаборатории, на базе которых и создаются такие разработки. Отсюда следует, что такие корпорации также могут играть роль главных конкурентов.

Наиболее наглядное сегментирование рынка представлено в таблице 5.1.

Таблица 5.1 - Карта сегментирования рынка по производству агрохимикатов

Страна-производитель	Размеры агрохимических предприятий		
	Крупные	Средние	Малые
Россия			
Страны ближнего зарубежья			
Страны дальнего зарубежья			

– Российские производители
 – Производители стран СНГ
 – Зарубежные производители

По результатам сегментирования удалось выявить основные сегменты рассматриваемого рынка, а также их занятость. Тогда наиболее свободными, а значит перспективными, являются средние и малые предприятия. Именно они будут являться основными потребителями результатов данной исследовательской работы.

5.1.2 Анализ конкурентных технических решений

Анализ конкурентных технических решений с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения позволяет провести оценку сравнительной эффективности научной разработки и определить направления для ее будущего повышения.

Целесообразно провести данный анализ с помощью оценочной карты – таблица 5.2. Для этого было проведено сравнение предложенного и конкурентных товаров. Сравнение проводилось с помощью экспертной оценки, результаты которой занесены в таблицу.

Особенностью конкурентных разработок является малый спектр действия, патогенное действие на окружающую среду, а также на человека, и их устарелость, из-за чего снижена эффективность ингибирования роста сорняков.

Таблица 5.2 – Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспособность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1 Селективность гербицидов	0,172	4	5	4	0,688	0,86	0,688
2 Эффективность гербицидов	0,18	4	4	5	0,72	0,72	0,9
3 Экологичность гербицидов	0,075	5	3	3	0,375	0,225	0,225
4 Новизна гербицидов	0,078	5	4	3	0,39	0,312	0,234
5 Возможность получения гербицидов на производстве	0,221	4	3	4	0,884	0,663	0,884
Экономические критерии оценки эффективности							
1 Стоимость внедрения	0,191	3	3	4	0,573	0,573	0,764
2 Конкурентоспособность продукта	0,052	5	4	5	0,26	0,208	0,26
3 Финансирование научной разработки	0,031	4	5	3	0,124	0,155	0,093
Итого	1	34	31	32	4,014	3,716	4,048

ф – научная разработка, рассматриваемая в данной работе

к1 – ингибиторы на основе изоксафлютола (1998 г.)

к2 – ингибиторы на основе 2,4-дихлорфеноксисукусной кислоты (1941 г.)

Главными преимуществами данной научной разработки являются новизна, экологичность и широкий спектр действия.

Анализ конкурентных технических решений определялся по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i, \quad (5.1)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента,

B_i – вес показателя (в долях единицы),

B_i – балл i -го показателя.

Основываясь на знаниях о конкурентных гербицидах, хотелось бы отметить: уязвимость конкурентов обусловлена малой селективностью, эффективностью, а также привыканием многих растений к данным соединениям. Также старые типы гербицидов оказывают очень пагубное влияние на окружающую среду.

Именно поэтому исследование новых соединений на гербицидные свойства является ресурсоэффективным по многим критериям. Ко всему прочему в мире за последние 20 лет очень активно ведутся поиски и разработки новых гербицидных соединений, что еще раз подчеркивает актуальность этого исследования.

5.1.3 SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта, выполняется в несколько этапов.

В ходе SWOT-анализа были рассмотрены сильные и слабые стороны научно-исследовательской работы и их взаимодействия с возможностями и угрозами проекта. Выводы, сделанные на основании представленной в таблице 5.3 информации, говорят о том, что сочетание сильных сторон и возможностей предоставляет благоприятную среду для разработки и продвижения продукта научно-исследовательской работы, однако развитая конкуренция и угроза незаинтересованности производителей могут пошатнуть состояние продукта на рынке. Но в сочетании с сильными сторонами появляется возможность минимизировать угрозы путем снижения себестоимости продукта за счет доступности методики, сырья и исходных веществ. Также следует отметить необходимость усовершенствования методики и развития сотрудничества с научно-исследовательскими центрами за пределами ТПУ и агрохимическими предприятиями.

Таблица 5.3 – Матрица SWOT

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Практическое отсутствие конкуренции на отечественном рынке. С2. Высокая скорость скрининга большого количества веществ. С3. Высокая селективность веществ. С4. Наличие бюджетного финансирования. С5. Заявленная экономичность методики</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца Сл2. Непредсказуемость схожести результатов in vitro и in vivo. Сл3. Отсутствие прототипа научной разработки</p>
<p>Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ. В2. Сотрудничество с научно-исследовательскими центрами за пределами ТПУ. В3. Внедрение наиболее эффективных веществ в агрохимическое производство. В4. Появление дополнительного спроса на новый продукт.</p>	<p>Результаты исследования могут привести к разработке инновационных селективных агрохимикатов с минимальным отрицательным воздействием на окружающую среду.</p>	<p>При тестировании достаточно широкого ряда химических соединений и их производных, может быть прослежена закономерность в изменении гербицидной активности.</p>
<p>Угрозы: У1. Ограничения на экспорт технологии. У2. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции. У3. Отсутствие спроса на новые технологии производства. У4. Развитая конкуренция технологии производства.</p>	<p>Доступность сырья и исходных веществ может позволить снизить себестоимость конечного продукта, что заинтересует производителей. Результаты эксперимента будут обладать высоким спросом, вследствие чего может увеличиться финансирование в данный проект.</p>	<p>Сотрудничество с другими предприятиями или научными центрами, которые заинтересованы в данной проблеме, позволяет решить проблему недостаточного материально – технического оснащения, необходимого для дальнейших исследований. Проблематика данного исследования прогрессирует во времени — это увеличивает спрос к продукту. Необходимо совершенствование методики с учетом конкурентных преимуществ.</p>

5.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

На начальных стадиях проведения научных исследований рекомендуется использовать морфологический подход. Такой подход основан на систематическом исследовании всех теоретически возможных вариантов, вытекающих из закономерностей строения (морфологии) объекта исследования.

В рамках этого этапа составляется морфологическая матрица, которая приведена в таблице 5.4.

Таблица 5.4 – Морфологическая матрица для гербицидов

	1	2	3
А. Агрегатное состояние	жидкое	твердое	газообразное
Б. Селективность	сплошной	избирательный	-
В. Способ действия	контактный	системный	комбинированный
Г. Ряд, к которому принадлежит соединение	арилоксиуксусные кислоты	триазины	замещенные мочевины или сульфонилмочевины
Д. Продолжительность жизни сорняков, на которые действует гербицид	однолетние	многолетние	-
Е. Классы сорняков, на которые действует гербицид	однодольные	двудольные	-

Выбор наиболее желательных функционально конкретных решений невозможен. Так как в исследовательской работе рассматривается конкретный список соединений, а целью работы является изучение свойств этих соединений. В данном случае можно только загадать желательный набор функций, но в действительности он будет отличаться, и повлиять на это невозможно.

Любая комбинация морфологических свойств является функциональным решением, так как в данном случае фактор разнообразия – ключевой.

5.3 Планирование научно-исследовательских работ

5.3.1 Структура работ в рамках научного исследования

Рабочую группу (таблица 5.5) представляет руководитель, который координирует деятельность исполнителя, и сам исполнитель проекта. Перечень этапов, работ и распределение по данным видам деятельности приведены в таблице 5.6.

Таблица 5.5 – Состав рабочей группы проекта

ФИО, основное место работы, должность	Роль в проекте	Основные обязанности
Белянин Максим Львович, к.х.н., доцент НОЦ Н. М. Кижнера, ИШНПТ ТПУ	руководитель проекта	координация деятельности исполнителя проекта
Шараева Александра Андреевна, студент группы 4Д71 ТПУ	исполнитель проекта, инженер	выполнение проекта

Таблица 5.6 – Перечень этапов, работ и распределение участников

Основные этапы	№ раб.	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	руководитель
Выбор направления исследований	2	Выбор направления исследований	руководитель, инженер
	3	Подбор и изучение материалов по теме	инженер
	4	Проведение патентных исследований	
	5	Календарное планирование работ по теме	руководитель, инженер
Теоретические и экспериментальные исследования	6	Проведение теоретических расчетов и обоснований	инженер
	7	Проведение экспериментов	
	8	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	руководитель, инженер
Обобщение и оценка результатов	9	Оценка эффективности полученных результатов	
Оформление отчета по НИР	10	Составление пояснительной записки	инженер

5.3.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты в большинстве случаев образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости используется следующая формула:

$$t_{ожі} = \frac{3t_{\min i} + 2t_{\max i}}{5}, \quad (5.2)$$

где $t_{ожі}$ – 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.

Определение продолжительности работ в рабочих днях производится по формуле:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожі}}{Ч_i}, \quad (5.3)$$

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

$t_{ожі}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.

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

5.3.3 Разработка графика проведения научного исследования

При выполнении дипломных работ студенты в основном становятся участниками сравнительно небольших по объему научных тем. Поэтому наиболее удобным и наглядным является построение ленточного графика проведения научных работ в форме диаграммы Ганта, которая представляет собой горизонтальный ленточный график, где работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ.

Для удобства построения графика длительности каждого этапа следует перевести из рабочих дней в календарные, для этого воспользуемся формулой:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (5.4)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях;

T_{pi} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях;

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (5.5)$$

где $T_{\text{кал}}$ – количество календарных дней в году;

$T_{\text{вых}}$ – количество выходных дней в году;

$T_{\text{пр}}$ – количество праздничных дней в году.

В 2019 году 365 календарных дней, с учетом 6-дневной рабочей недели, из них 52 выходных и 14 праздничных дней. Тогда коэффициент календарности равен:

$$k_{\text{кал}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22, \quad (5.6)$$

Все рассчитанные значения сведены в таблице 5.7.

Таблица 5.7 – Временные показатели проведения научного исследования

Название работы (этапы)	Трудоемкость работ, чел-дни			Исполнители*	Длительность работ в рабочих днях T_{pi}	Длительность работ в календарных днях T_{ki}
	t_{mini}	t_{maxi}	$t_{ожи}$			
Составление и утверждение технического задания	0,125	0,25	0,175	Р	0,175	0,2
Подбор и изучение материалов по теме	10	20	14	И	14	18
Проведение патентных исследований	7	14	9,8		9,8	12
Выбор направления исследований	0,0625	0,125	0,0875	Р, И	0,04375	0,05
Календарное планирование работ по теме	0,0625	0,125	0,0875		0,04375	0,05
Проведение теоретических расчетов	7	14	9,8	И	9,8	12
Проведение экспериментов	20	25	22		22	26,84
Сопоставление результатов с теоретическими исследованиями	0,5	2	1,1	Р, И	0,55	1
Оценка эффективности полученных результатов	0,5	2	1,1		0,55	1
Составление пояснительной записки	14	28	19,6	И	19,6	24

*Р – руководитель; И – инженер.

На основе полученных данных был построен календарный план-график в виде диаграммы Ганта (таблица 5.8).

Таблица 5.8 – Календарный план-график проведения НИР

№ работ	Вид работ	Исполнители	$T_{ки}$, кал. дн.	Продолжительность выполнения работ																
				фев.			март				апрель				май				июн.	
				1	2	3	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2
1	Составление ТЗ	Р	3,29			▨														
2	Подбор и изучение материалов	И	1,47			■	■													
3	Проведение патентных исследований	И	1,32				■	■												
4	Выбор направления исследований	Р, И	1,89																	
5	Календарное планирование работы	Р, И	3,54																	
6	Проведение теоретических расчетов	И	1,95																	
7	Проведение экспериментов	И	1,34																	
8	Сопоставление результатов с теоретическими исследованиями	Р, И	2,56																	
9	Оценка эффективности результатов	Р, И	1,71																	
10	Оформление отчета по НИР	И	0,85																	

▨ – руководитель ■ – инженер

5.4 Бюджет научно-технического исследования

При планировании бюджета научно-технического исследования (НТИ) должно быть обеспечено полное и достоверное отражение всех видов планируемых расходов, связанных с его выполнением. Расчет бюджета НТИ включает такие основные статьи затрат, как материальные затраты, затраты на специальное оборудование для научных работ, затраты на электроэнергию, основная и дополнительная заработная плата исполнителей проекта, отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления), контрагентные и накладные расходы.

5.4.1 Расчет материальных затрат НИИ

Расчет материальных затрат приведен в таблице 5.9 осуществляется по следующей формуле:

$$Z_m = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расxi}, \quad (5.7)$$

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

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

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

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы (15%).

Таблица 5.9 – Материальные затраты

Наименование	Единица измерения	Количество	Цена за ед., руб.	Затраты на материалы, (Z_m), руб.
Семена пшеницы и гороха	500 г	1 уп.	50,00	50,00
Наконечники для дозаторов (2-200 мкл)	1000 шт.	1 уп.	452,00	452,00
Наконечники для дозаторов (50-1000 мкл)	1000 шт.	1 уп.	605,00	605,00
Виала 10 мл	100 шт.	1 уп.	1099,00	1 099,00
Диметилсульфоксид (ДМСО)	1 л	1 шт.	1182,50	1 182,50
2,4-дихлорфенксиуксусная кислота (2,4-Д кислота)	5 г	2 шт.	2342,82	4 685,64
Этанол	1 л	1 шт.	1200,00	1 200,00
Бензол	1 л	1 шт.	344,52	344,52
Уксусная кислота	1 л	1 шт.	320,00	320,00
Канцелярский нож	1 шт.	1 шт.	154,27	154,27
Транспортные расходы				1 514,07
			Итого:	11 607

5.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для экспериментальных работ

В данную статью включаются все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, контрольно-измерительной аппаратуры, стендов, устройств и механизмов), необходимого для проведения работ по теме представлено в таблице 5.10.

Таблица 5.10 – Затраты на спецоборудование для научных работ

Наименование оборудования	Кол-во единиц оборудования	Цена единицы оборудования, руб.	Общая стоимость оборудования, руб.
1 Дозатор	2	6 956	13 912
2 Транспортно-монтажные расходы			2 087
		Итого:	15 999

Стоимость оборудования, используемого при выполнении конкретного научного проекта и имеющегося в данной научно-технической организации, учитывается в виде амортизационных отчислений.

Сумма амортизационных отчислений определяются по формуле:

$$E_{ам} = \frac{\sum K_{об} \cdot H_{ам} \cdot T_{об}}{365 \cdot 100}, \quad (5.8)$$

где $K_{об}$ – стоимость единицы прибора или оборудования, руб.;

$H_{ам}$ – норма амортизации прибора или оборудования, %;

$T_{об}$ – время использования оборудования, дни.

Затраты на спецоборудование с учетом амортизационных отчислений приведены в таблице 5.11.

Таблица 5.11 – Расчет амортизационных отчислений на спецоборудование

Наименование оборудования	Общая стоимость, руб.	Время использования, дни	Норма амортизации, %	Сумма амортизационных отчислений, руб.
1 Термостат	16 000	50	12	263
2 Спектрофотометр	342 850	50	18	8 454
3 Холодильник	487 350	20	11	2 938
4 Электроплитка	44 145	70	8	677
5 Весы аналитические	84 000	100	15	3 452
6 Весы лабораторные электронные	44 950	100	12	1 478
7 Персональный компьютер	70 000	120	18	4 143
			Итого:	21 405

5.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НИИ, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату. Расходы по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок в НИ ТПУ.

Заработная плата рассчитывается по формуле:

$$C_{зн} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (5.9)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата;

$Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата (12-20 % от $Z_{осн}$).

Основная заработная плата рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_{раб}, \quad (5.10)$$

где $Z_{дн}$ – среднедневная заработная плата одного работника, руб.;

$T_{раб}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (таблица 5.7);

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_д}, \quad (5.11)$$

где Z_m – 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;

$F_д$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (таблица 5.12).

Таблица 5.12 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
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	7	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	244	275

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{mc} \cdot (1 + k_{np} + k_o) \cdot k_p, \quad (5.12)$$

где Z_{mc} – зарплатная плата по тарифной ставке, руб.;

k_{np} – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от Z_{mc});

k_o – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5 (в НИИ и на промышленных предприятиях за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: 15-20% от Z_{mc});

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

Расчет основной заработной платы приведен в таблице 5.13.

Таблица 5.13 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	Разряд	Z_{mc} , руб.	k_p	Z_m , руб.	$Z_{он}$, руб.	$T_{раб}$, раб. дни	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	доцент	33 664	1,3	63 457	2 600,7	0,77	1 999,3
Инженер	студент	25 300	1,3	47 691	1 942,3	75,8	147 214,2
Итого:							149 213,5

5.4.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы учитывают величину предусмотренных Трудовым кодексом РФ доплат за отклонение от нормальных условий труда, а также выплат, связанных с обеспечением гарантий и компенсаций.

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$Z_{дон} = k_{дон} \cdot Z_{осн}, \quad (5.13)$$

где $k_{дон}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (примем равным 0,12).

5.4.5 Отчисления во внебюджетные фонды

В данной статье расходов отражены 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:

$$Z_{внеб} = k_{внеб} \cdot (Z_{осн} + Z_{доп}), \quad (5.14)$$

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

На 2021 г. в соответствии с Федеральным законом от 24.07.2009 N 212-ФЗ (ред. от 19.12.2016, с изм. от 31.10.2019) установлен размер страховых взносов равный 30%. С 1 января 2019 г. плательщики, указанные в подпункте 5 (в данном случае организация, основным видом экономической деятельности которой является образование), не вправе применять пониженные тарифы страховых взносов на основании пункта 2 подпункта 3 статьи 427 НК РФ.

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 5.14.

Таблица 5.14 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	1 999,3	239,9
Инженер (студент-дипломник)	147 214,2	17 665,7
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,3	
Итого:		50 135,73

5.4.6 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:

$$Z_{\text{накл}} = (Z_{\text{м}} + Z_{\text{оборуд}} + Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}} + Z_{\text{внеб}}) \cdot k_{\text{нр}}, \quad (5.15)$$

где $k_{\text{нр}}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы (16 %).

$$Z_{\text{накл}} = (11606,87 + 37404 + 149213,5 + 17905,6 + 50135,73) \cdot 0,16 = 42602,512 \text{руб.}$$

5.4.7 Формирование бюджета научно-исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы 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 таблице 5.15.

Таблица 5.15 – Расчет бюджета затрат НИР

Наименование статьи	Сумма, руб.	Примечание
1 Материальные затраты	11 606, 87	Пункт 5.4.1
2 Затраты на специальное оборудование	37 404	Пункт 5.4.2
3 Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	149 213,5	Пункт 5.4.3
4 Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	17 905,6	Пункт 5.4.4
5 Отчисления во внебюджетные фонды	50 135,73	Пункт 5.4.5
6 Накладные расходы	42 602,512	Пункт 5.4.6
Итого бюджет затрат НИР:	308 868,212	

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

Определение эффективности происходит на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{финр}^{исп.i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{max}}, \quad (5.16)$$

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

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

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

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности проводится в форме таблицы (таблица 5.16).

Альтернативным вариантом исполнения проекта является использование в качестве испытуемого объекта семена *Helianthus L.* (подсолнечника).

Таблица 5.16 - Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Критерий	Весовой коэффициент	Тестирование гербицидных свойств на пшенице и горохе	Тестирование гербицидных свойств на подсолнечнике
1 Простота проращивания семян	0,5	5	4
2 Стоимость семян	0,4	4	1
3 Энергосбережение	0,1	4	3
Итого:	1		

Расчет интегрального показателя ресурсоэффективности:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (5.17)$$

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.

Таким образом:

$$I_m^p = 0,5 \cdot 5 + 0,4 \cdot 4 + 0,1 \cdot 4 = 4,5 \text{ – для разработки,}$$

$$I_m^a = 0,5 \cdot 4 + 0,4 \cdot 1 + 0,1 \cdot 3 = 2,7 \text{ – для аналога.}$$

$(I_{финр}^p)$ и $(I_{финр}^a)$ аналога определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формулам:

$$I_{финр}^p = \frac{I_m^p}{I_{\phi}^p}, \quad I_{финр}^a = \frac{I_m^a}{I_{\phi}^a}, \quad (5.18)$$

то есть
$$I_{финр}^p = \frac{4,5}{0,1} = 45, \quad I_{финр}^a = \frac{2,7}{0,84} = 3,21.$$

Сравнение интегрального показателя эффективности текущего проекта и аналогов позволит определить сравнительную эффективность проекта (таблица 5.17).

Сравнительная эффективность проекта:

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{I_{финр}^p}{I_{финр}^a}, \quad (5.19)$$

$$\mathcal{E}_{cp} = \frac{45}{3,21} = 14,02.$$

Таблица 5.17 – Сравнительная эффективность разработки

Показатели	Разработка	Аналог
1 Интегральный финансовый показатель разработки	0,1	0,84
2 Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,5	2,7
3 Интегральный показатель эффективности	45	3,21
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	14,02	

Сравнение значений интегральных показателей эффективности позволяет понять, что предлагаемая в проекте разработка является более эффективным вариантом решения поставленной технической задачи с позиции финансовой и ресурсной эффективности.

Выполненный анализ экономической эффективности разработки, показал, что исследование рентабельно; показаны значительные преимущества предлагаемой разработки по таким показателям, как низкая себестоимость и перспективность. В результате проведения разработки раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» было выяснено, что данное исследование оправдывает физические и материальные затраты.

Заключение

1. Были протестированы соединения 1-69 на семенах пшеницы, и среди них выявлен ряд соединений, обладающих гербицидной активностью.
2. Провели повторные опыты с некоторыми соединениями, которые выбрали случайным образом. Описали зависимость активности от дозировки.
3. Протестировали соединения 50, 51, 53, 64 на семенах гороха и выявили, что только 53 вызвало угнетение роста.
4. Обработали полученные результаты, провели статистический анализ, рассчитав стандартное отклонение и абсолютную погрешность.
5. Для проявивших угнетающую или стимулирующую активность провели анализ «структура-активность», отразив его в обсуждении результатов.
6. Рассчитан бюджет затрат НИР, который составил 308 868,2 рублей.
7. Принятые в бакалаврской работе технические и организационные решения, планируемые природоохранные мероприятия достаточны для соблюдения экологической безопасности. При соблюдении правил работы в лаборатории исследовательская работа не окажет негативного воздействия на окружающую среду.

В заключении хотелось бы сказать, что в настоящее время ведутся активные поиски эффективных и безопасных соединений для борьбы с сорняками. Поэтому данная работа может поспособствовать решению проблемы потери урожаев и развитию агрохимической индустрии.

Список используемой литературы

1. Zhang X. An eco- and user-friendly herbicide / X. Zhang, Q. Huang, Z.-Z. Zhao, X. Xu, S. Li, H. Yin, R. Wang // Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2019. – 67(28), 7783-7792. – DOI: 10.1021/acs.jafc.9b00764
2. Wu X. Rapid biodegradation of the herbicide 2,4-dichlorophenoxyacetic acid by *Cupriavidus gilardii* T-1 / X. Wu, W. Wang, J. Liu, D. Pan, X. Tu, P. Lv, Y. Wang, H. Cao, Y. Wang, R. Hua // Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2017. – 65(18), 3711-3720. – DOI: 10.1021/acs.jafc.7b00544
3. Goggin D. E. Identity and activity of 2,4-D metabolites in wild radish (*Raphanus raphanistrum*) / D. E. Goggin, G. L. Nealon, G. Cawthray, A. Scaffidi, M. Howard, S. Powles, G. R. Flematti // Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2018. – 66(51), 13378-13385. – DOI: 10.1021/acs.jafc.8b05300
4. Agathokleous E. Systemic Herbicide 2,4-Dichlorophenoxyacetic Acid Is Another Hormetin: What Does It Mean for Agriculture and the Environment? / E. Agathokleous, Z. Feng, E. J. Calabrese // Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2019. – DOI: 10.1021/acs.jafc.9b04757
5. Counihan J. L. Chemoproteomic Profiling of Acetanilide Herbicides Reveals Their Role in Inhibiting Fatty Acid Oxidation / J. L. Counihan, M. Duckering, E. Dalvie, W. Ku, L. A. Bateman, K. J. Fisher, D. K. Nomura // ACS Chemical Biology, 2017. – 12(3), 635–642. – DOI:10.1021/acscchembio.6b01001
6. Ndikuryayo F. 4-Hydroxyphenylpyruvate Dioxygenase Inhibitors: From Chemical Biology to Agrochemicals / F. Ndikuryayo, B. Moosavi, W.-C. Yang, G.-F. Yang // Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2017. – 65(39), 8523–8537. – DOI: 10.1021/acs.jafc.7b03851
7. Захарычев В. В. Химия гербицидов: учебное пособие для вузов / В. В. Захарычев. – Санкт-Петербург : Лань, 2021. – 592 с.: ил. – Текст: непосредственный. – ISBN 978-5-8114-6894-2
8. Грандберг И. И. Органическая химия: Учебник. / Грандберг И. И, Нам Н. Л. – 9-е изд., стер. – СПб. : Издательство «Лань», 2019. – 608 с. – (Учебники для вузов. Специальная литература). – ISBN 978-5-8114-3901-0

9. Nain-Perez A. Tailoring Natural Abenquines To Inhibit the Photosynthetic Electron Transport through Interaction with the D1 Protein in Photosystem II / A. Nain-Perez, L. C. A. Barbosa, C. R. A. Maltha, S. Giberti, G. Forlani // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2017. – 65(51), 11304–11311. – DOI: 10.1021/acs.jafc.7b04624

10. Li K.-J. Design, Synthesis, and Herbicidal Activity of Pyrimidine–Biphenyl Hybrids as Novel Acetohydroxyacid Synthase Inhibitors / K.-J. Li, R.-Y. Qu, Y.-C. Liu, J.-F. Yang, P. Devendar, Q. Chen, G.-F. Yang // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2018. – 66(15), 3773–3782. – DOI: 10.1021/acs.jafc.8b00665

11. Wang, D.-W., Zhang, R., Yu, S., Liang, L., Ismail, I., Li, Y.-H., ... Xi, Z. Discovery of Novel N-Isoxazolinyphenyltriazinones as Promising Protoporphyrinogen IX Oxidase Inhibitors / D.-W. Wang, R. Zhang, S. Yu, L. Liang, I. Ismail, Y.-H. Li, Z. Xi // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2019. – DOI: 10.1021/acs.jafc.9b04844

12. Wang D.-W. Design, Herbicidal Activity, and QSAR Analysis of Cycloalka[d]quinazoline-2,4-dione–Benzoxazinones as Protoporphyrinogen IX Oxidase Inhibitors / D.-W. Wang, R.-B. Zhang, I. Ismail, Z. Xue, L. Liang, S. Yu, Z. Xi // *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2019. – DOI: 10.1021/acs.jafc.9b02996

13. Хуснитдинов Р. Н. Исследование гербицидной активности новых хлорзамещенных 2-гидроксифенильных производных пропандиола / Р. Н. Хуснитдинов, Р. Р. Зарипов, К. Р. Хуснитдинов, А.М. Колбин, А.Г. Мустафин, И.Б Абдрахманов // *Вестник Башкирского университета*. – 2017. – Т. 22. – № 2. – С. 379-382.

14. Ефимова А.И. Общий физический практикум физического факультета МГУ. Погрешности эксперимента: Учебно-методическое пособие. / А.И. Ефимова, А.В. Зотеев, А.А. Склянкин – М.: МГУ, Физический факультет, 2012. – 39 с., илл.

15. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019).
16. Федеральный закон "Об обязательном социальном страховании от несчастных случаев на производстве и профессиональных заболеваний" от 24.07.1998 N 125-ФЗ.
17. ГОСТ 12.2.032-78 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования. - М.: ИПК Издательство стандартов, 2001 г.
18. ГОСТ 12.2.033-78 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования. - М.: ИПК Издательство стандартов, 2001 г.
19. СанПиН 1.2.3685-21 Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания, 2021 г.
20. ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. – М.: Стандартинформ, 2016 г.
21. СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95* (с Изменением N 1) – М.: Минстрой России, 2016.
22. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений, утв. Постановлением ГКСЭН России 01.10.1996 г. - М.: Информационно-издательский центр Минздрава России, 1997 г.. - стр. 39 с.
23. ГОСТ 12.1.003-2014 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Шум. Общие требования безопасности (Переиздание) – М.: Стандартинформ, 2019 год.
24. ГОСТ 12.1.019-2017 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты (с Поправкой) – М.: Стандартинформ, 2019 год

25. ГОСТ 12.1.004-91 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Пожарная безопасность. Общие требования (с Изменением N 1). - М.: Стандартиформ, 2006 г.

26. ГОСТ 12.1.007-76 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности (с Изменениями N 1, 2). - М.: Стандартиформ, 2007 г.

27. Кукин П.П. Безопасность технологических процессов и производств. Охрана труда. – М.: Высшая школа, 2002. – 114 с.

28. ГОСТ 12.4.011-89 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Средства защиты работающих. Общие требования и классификация. - М.: ИПК Издательство стандартов, 2001 г.

29. Действие электрического тока на организм человека // Delta – grup [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://delta-grup.ru/bibliot/16/42.htm>.

30. СП 12.13130.2009 Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности (с Изменением N 1). - М.: ФГУ ВНИИПО МЧС России, 2009 г.

31. ГОСТ 12.4.009-83 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Пожарная техника для защиты объектов. Основные виды. Размещение и обслуживание (с Изменением N 1). - М.: ИПК Издательство стандартов, 2001 г.

32. Инструкция о мерах пожарной безопасности. Приложение №2 к приказу ректора № 52/од от «21» июня 2013 г.