

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
Получение бензилов реакцией окисления ацетофенонов

УДК 547.572.3

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д71	Гришина Софья Вячеславовна		06.06.2021 г.

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент НОЦ Н.М. Кижнера	Штрыкова В. В.	к.х.н., доцент		08.06.2021 г.

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.		20.05.2021 г.

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент ООД ШБИП	Черемискина М. С.	-		13.05.2021 г.

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ООП 19.03.01 Биотехнология	Лесина Ю.А.	к.х.н.		10.06.2021 г.

**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 (НОЦ) Научно-образовательный центр Н.М. Кижнера

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

 25.01.2021 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	Гришиной Софье Вячеславовне

Тема работы:

Получение бензилов реакцией окисления ацетофенонов	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	03.02.2021 г. № 34-53/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:

	<u>06.06.2021г.</u>
--	---------------------

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:


<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объектом исследования является методика получения бензилов реакцией окисления ацетофенонов.</p>
---	--

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов <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"> • Литературный обзор • Объект и методы исследования • Экспериментальная часть • Результаты проведенного исследования • Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение • Социальная ответственность • Заключение
<p>Перечень графического материала <i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	<p>нет</p>


<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы <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 ОТД ШБИП</p>

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	<p>25.01.2021г.</p>
--	---------------------

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент НОЦ Н.М. Кижнера	Штрыкова Виктория Викторовна	К. Х. Н.		25.01.2021г.

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д71	Гришина Софья Вячеславовна		25.01.2021г.

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

Студенту:

Группа	ФИО
4Д71	Гришиной Софье Вячеславовне

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 400 000 руб., в т.ч. затраты по оплате труда – не более 222 000 руб
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Значение показателя интегральной ресурсоэффективности – не менее 4,6 баллов
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Отчисления во внебюджетные фонды 27,1%

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:


1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	Расчет конкурентоспособности; SWOT – анализ
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	Структура работ. Разработка графика проведения исследования. Расчет бюджетной стоимости НИР.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Интегральный финансовый показатель разработки; Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки; Интегральный показатель эффективности; Сравнительная эффективность вариантов исполнения.

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):


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

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	02.02.2021 г.
---	---------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Спицына Любовь Юрьевна	К.Э.Н.		02.02.21

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д71	Гришина Софья Вячеславовна		02.02.2021 г.

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
4Д71	Гришина Софья Вячеславовна

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

Тема ВКР:

Получение бензилов реакцией окисления ацетофенонов

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 является методика получения бензилов реакцией окисления ацетофенонов. Рабочая зона – лаборатория НОЦ Кижнера ТПУ, аудитория 312; Для проведения научно-исследовательской работы используются: магнитное перемешивающее устройство с подогревом, вакуумный насос, весы аналитические, хромато-масс спектрометр; Область применения полученных веществ – химическая и фармацевтическая промышленность.</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. 	<p>1. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018)</p> <p>2. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.</p> <p>3. ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования.</p>
<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 рабочей зоны; - превышение уровня шума; - повышенное значение напряжения в электрической цепи; - проникновение раздражающих, токсичных, канцерогенных и

	сенсibiliзирующих веществ в организм человека через органы дыхания, желудочно-кишечный тракт, кожные покровы и слизистые оболочки;
3. Экологическая безопасность:	<p>Область воздействия на атмосферу: возможность попадания летучих токсичных веществ: пары серной кислоты, бензола.</p> <p>Область воздействия на гидросферу: химическое загрязнение водотоков в результате удаления неорганических и органических отходов в канализационную сеть.</p> <p>Область воздействия на литосферу: загрязнение почвы бытовыми отходами (пластик, бумага).</p>
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<p>Возможные ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения: пожары, обрушения зданий, аварии на тепловых сетях (системах горячего водоснабжения) в холодное время года, стихийные бедствия, террористический акт.</p> <p>К наиболее вероятным чрезвычайным ситуациям на рабочем месте относится возгорание реактивов в результате несоблюдении норм безопасности.</p>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	04.02.2021г.
--	--------------

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Черемискина Мария Сергеевна	-		04.02.2021г.

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
4Д71	Гришина Софья Вячеславовна		04.02.2021г.

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 76 с., 2 рис., 9 схем, 23 табл., 48 источников, 1 прил.

Ключевые слова: оксид селена (IV), ацетофенон, бензил, серная кислота, реакция окисления.

Объектом исследования являются бензилы.

Цель работы – апробация новой окислительной системы на основе SeO_2 и концентрированной серной кислоты при получении бензилов реакцией окисления ацетофенонов.

В процессе исследования проводилась реакция окисления ацетофенонов до соответствующих бензилов системой « $\text{SeO}_2/\text{H}_2\text{SO}_4$ ».

В результате исследования получены замещенные бензилы, которые идентифицированы по их температуре плавления и ГХ-МС.

Степень внедрения: лабораторная разработка

Область применения: химическая и фармацевтическая промышленность

Значимость работы: апробирована новая окислительная система $\text{SeO}_2/\text{H}_2\text{SO}_4$ для окисления ацетофенонов в реакции получения бензилов.

Разработан метод выделения бензилов из реакционной смеси.

В будущем планируется использование бензилов, полученных реакцией окисления в системе « $\text{SeO}_2/\text{H}_2\text{SO}_4$ », в синтезе биологически активных веществ.

Список использованных сокращений

ДМСО – диметилсульфоксид

ДФСО – дифенилсульфоксид

ТСХ – тонкослойная хроматография

ГХ-МС – газовая хроматография–масс-спектрометрия

Оглавление

Введение	13
1. Литературный обзор.....	14
1.1 Получение бензилов из толанов	15
1.2 Получение бензилов из стильбенов	16
1.3 Получение бензилов из ацетофенонов.....	18
1.4 Практическое значение бензилов	20
2. Объект и методы исследования	23
3. Экспериментальная часть	25
4. Результаты проведенного исследования.....	27
5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение ..	31
5.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	31
5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования.....	31
5.1.2 Анализ конкурентных технических решений.....	32
5.1.3 SWOT-анализ.....	33
5.2 Планирование научно-исследовательских работ	35
5.2.1 Структура работ в рамках научного исследования	35
5.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ.....	37
5.2.3 Разработка графика проведения научного исследования	37
5.2.4 Бюджет научного исследования	41
5.3 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования ..	47
5.3.1 Интегральный показатель финансовой эффективности исследования	47
5.3.2 Интегральный показатель ресурсоэффективности исследования	48
5.3.3 Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки	49
6. Социальная ответственность	51
6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	52
6.1.1 Специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства	52

6.1.2. Проектирование рабочей зоны	53
6.2 Производственная безопасность	53
6.2.1 Отклонение показателей микроклимата	54
6.2.2 Превышение уровня шума.....	55
6.2.3 Недостаточная освещенность рабочей зоны.....	56
6.2.4 Воздействие электрического тока	57
6.2.5 Отравление вредными веществами	57
6.3 Экологическая безопасность	60
6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	61
6.4.1 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть в лаборатории при проведении исследований	61
6.4.2 Анализ вероятных ЧС, которые может инициировать объект исследований.....	62
6.4.3 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.....	62
Выводы	64
Список использованных источников	65
Приложение А	71

Введение

Получение ароматических α -дикетонов, или бензилов, представляет научный интерес, поскольку они, как известно, являются универсальными промежуточными соединениями для построения более сложных биологически активных молекул таких, как хиноксалинов, имидазолов, диоксимов, дитиолонов и ряда других соединений.

Существует множество способов получения бензилов, которые в основном связаны с реакциями окисления. Субстратами в данных реакциях являются толаны, стильбены, ацетофеноны.

Окислителями могут служить сам кислород, перекись водорода (H₂O₂), перманганат калия, неорганические кислоты и другие. Реакция окисления проходит в присутствии металлических (Ru, Mn, Au, Ag,..) и неметаллических (в основном SeO₂) катализаторов.

Однако в окислительной системе «SeO₂/кислота» до сих пор не использовалась концентрированная серная кислота.

Исходя из этого, целью данной научно-исследовательской работы является апробация новой окислительной системы на основе SeO₂ и концентрированной серной кислоты при получении бензилов реакцией окисления ацетофенонов.

1. Литературный обзор

Известно множество способов получения бензилов (1) с использованием различных субстратов: толанов (2), стильбенов (3), ацетофенонов (4) (рис. 1), которые подвергаются окислению в различных условиях.

Большинство из представленных субстратов отличаются высокой стоимостью в связи с дорогими катализаторами, используемыми при их синтезе. Исключением является ацетофенон, который представляет интерес как реактив с низкой стоимостью.

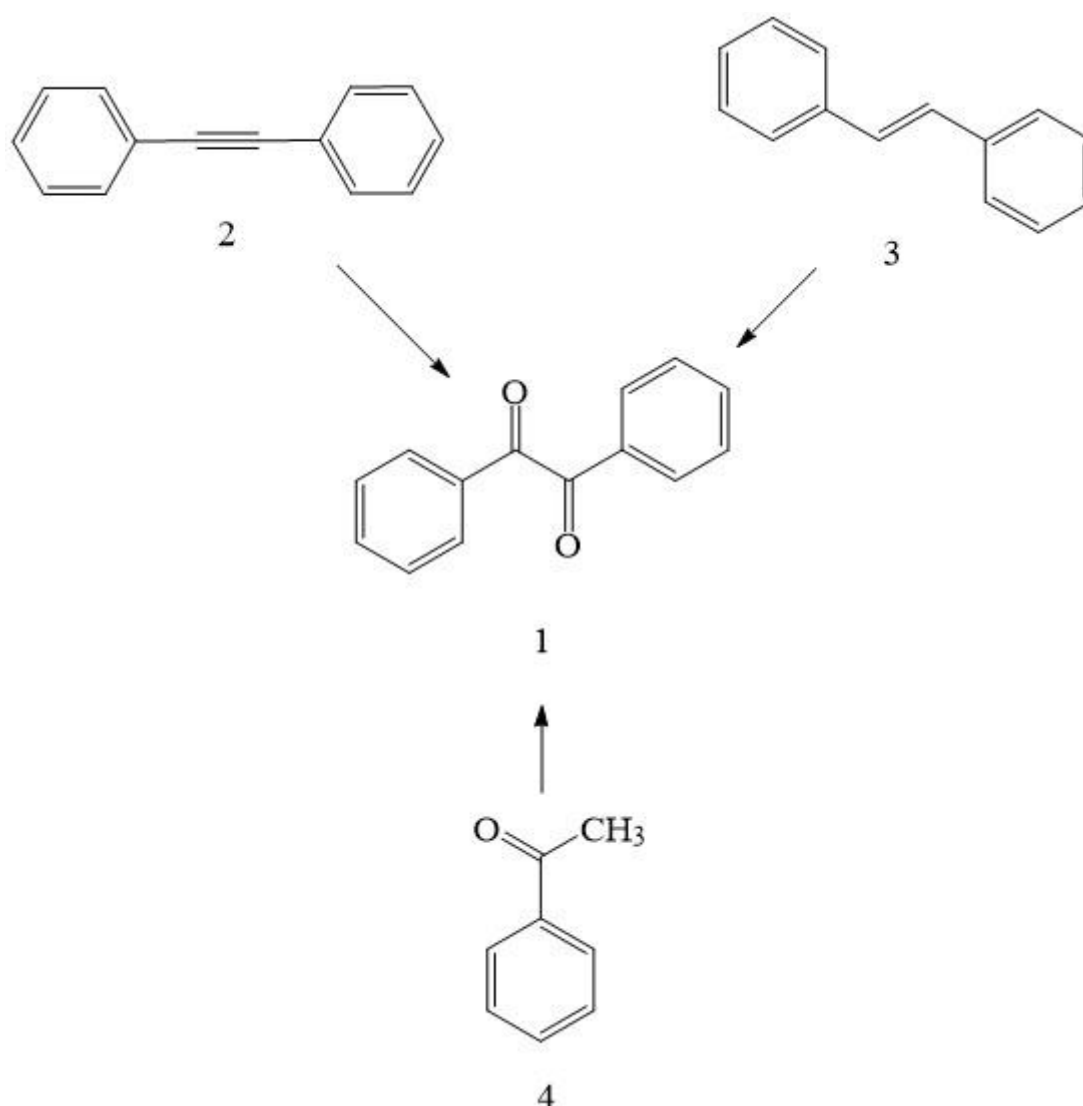


Рисунок 1 – Получение бензилов реакцией окисления различных органических субстратов

1.1 Получение бензилов из толанов

Одним из эффективных способов получения производных бензила является окисление замещенных алкинов, или толанов (схема 1.1). Для этого разработаны различные каталитические системы, которые в основном содержат металлы.

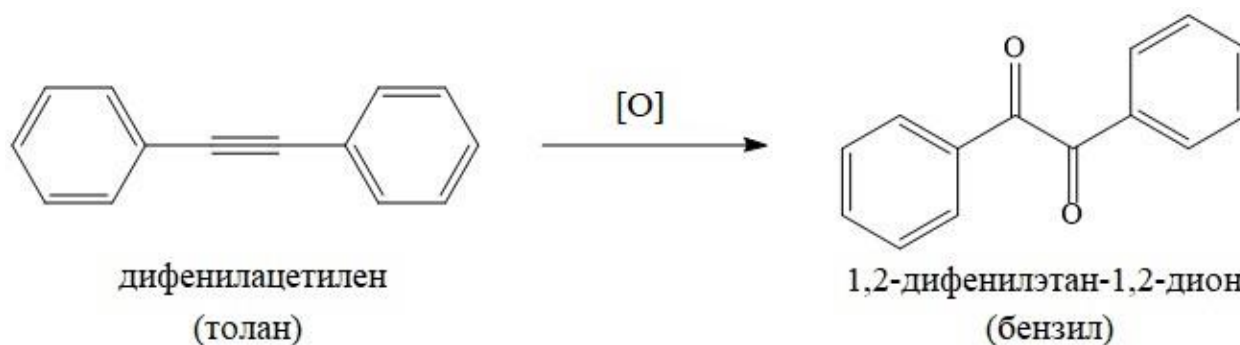


Схема 1.1 – Окисление толана до бензила

Так, например, в случае использования солей PdBr_2 и CuBr_2 окислителем служит молекулярный кислород, реакция проводится при низких температурах в течение суток. Максимальный выход получается при использовании диоксана и воды в качестве растворителей. Выход целевых бензилов практически количественный [1].

Также известен способ с применением в качестве катализатора палладия на углероде. Окислителем также служит молекулярный кислород, ДМСО используется в качестве окислителя и растворителя. Реакция проводится при температурах выше $100\text{ }^\circ\text{C}$ в течение суток. Выходы в зависимости от субстрата составляют от 41 до 98% [2].

Реакция с системой катализаторов, содержащей золото и серебро, проводится в дихлорэтаноле при температурах ниже $100\text{ }^\circ\text{C}$, ДМСО служит в качестве окислителя. Время реакции составляет от 3 до 12 часов, а выходы – от 74 до 98% в зависимости от субстратов [3].

Другой эффективный способ окисления толанов заключается в использовании системы, состоящей из димера дихлорида (цимен) рутения и йода, в качестве катализаторов, и *трет*-бутилгидропероксида в качестве окислителя. Реакция проводится в диоксане при температурах ниже 100 °С в течение 12 часов. Выход целевых продуктов практически количественный [4].

Однако существуют некоторые недостатки, препятствующие использованию толанов. В первую очередь это связано с высокой стоимостью самих толанов и используемых катализаторов, низкой хемоселективностью, высокой токсичностью каталитических систем и низкой функциональной устойчивостью.

1.2 Получение бензилов из стильбенов

Другим наиболее простым и эффективным способом получения бензила и его производных является окисление стильбенов.

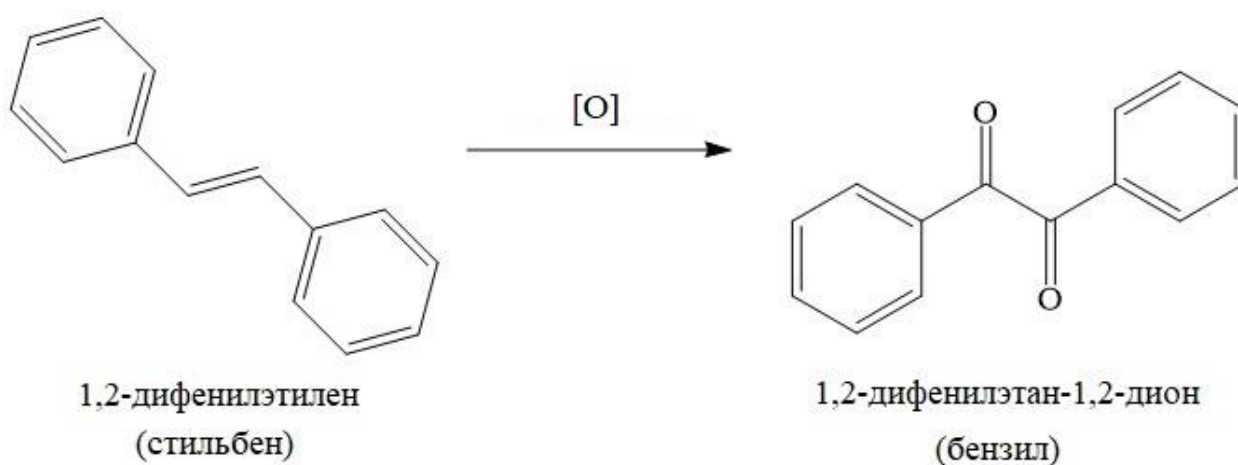


Схема 1.2 – Окисление стильбена до бензила

Как и в случае с толанами, распространены реакции окисления стильбенов, катализируемые металлами.

Так, например, реакция с биядерным комплексом рутения (II) в качестве катализатора проводится при комнатной температуре в присутствии йодида натрия и *трет*-бутилгидропероксида, растворителем служит ацетонитрил. Выход реакций составляет 62-92% [5].

Также известно еще об одном способе, в котором применяется комплекс с рутением в качестве катализатора. Тетрабутиламмония йодид выполняет роль сокатализатора, *трет*-бутилгидропероксид – окислителя. Растворителем служит смесь толуола, ацетонитрила и воды. Время реакции составляет час при комнатной температуре. Выходы целевых продуктов – от 49 до 90% [6].

Другой металлический катализатор нитрат аммония-церия (IV) используется для окисления стильбенов в метаноле при комнатной температуре. Выход по реакции невысокий, до 55% [7].

С бифункциональным железным нанокompозитным катализатором реакция проводится в водном ацетонитриле при температурах ниже 100 °С в течение 12 часов, *трет*-бутилгидропероксид и тетрабутиламмония йодид служат в качестве окислителей. Выход бензолов составляет от 53 до 85% в зависимости от субстратов. Достоинство этого способа заключается в том, что катализатор можно легко восстановить для повторного использования без потери каталитических характеристик [8].

Известны также системы, не содержащие металлы. Так, например, системы $\text{HBr-H}_2\text{O}_2\text{-DMCO}$ и HBr-DMCO используются для окисления толанов и стильбенов до бензолов. Реакция проводится при температуре 115 °С. Результаты показывают, что время синтеза зависит от заместителей в бензольном кольце и составляет от 2 до 30 часов. Выходы целевых продуктов также разнятся, от 56 до 95% [9].

Окисление стильбенов возможно и в мягких условиях. Например, бензолы можно получить окислением стильбенов в системе $\text{I}_2\text{-H}_2\text{O}$ без кислот и металлических катализаторов. Реакция проводится при повышенных температурах в течение суток. Выходы целевых продуктов высокие [10].

Другой эффективный способ подразумевает использование оксида графита в качестве окислителя. Гетерогенная природа окислителя способствует удобному выделению и очистке желаемых продуктов. Реакция проводится при температуре 100 °С в хлороформе в течение суток. В

большинстве случаев побочные продукты не наблюдаются, а целевые продукты выделяются с выходами от 12 до 68%. Преимущество реакции – гетерогенность системы, мягкие условия и отсутствие необходимости использования дополнительных окислителей или металлических сокатализаторов [11].

Несмотря на то что в области окисления стилибенов был достигнут большой прогресс, существуют следующие затруднения: известные методы обычно обладают плохой хемоселективностью, для них требуется использование дорогих и токсичных металлов, токсичных растворителей, в некоторых случаях трудно разделить продукт и катализатор. Также стоит отметить, что стоимость стилибенов сравнительно выше стоимости толанов. Следовательно, желательна разработка более дешевого высокоэффективного хемоселективного и чистого метода без использования металлов для получения производных бензила.

1.3 Получение бензилов из ацетофенонов

Другой способ получения бензилов подразумевает окисление ацетофенонов. Преимущество этого способа заключается в сравнительной дешевизне ацетофенонов относительно стоимости толанов и стилибенов.

В реакциях окисления ацетофенонов используются также металлические и неметаллические катализаторы.

Так, например, бензилы можно получить одностадийной каскадной реакцией окисления широкого спектра ацетофенонов и альдегидов с помощью системы, состоящей из бифункционального железного наноккомпозитного катализатора и пероксида водорода в качестве зеленого окислителя в мягких условиях (схема 1.3). Выходы продуктов составляют от 61 до 90%. Преимущество этого способа заключается в гетерогенности катализатора, возможности использовать его повторно с незначительными потерями каталитических свойств, а также в отсутствии необходимости использовать сильные окислители [12].

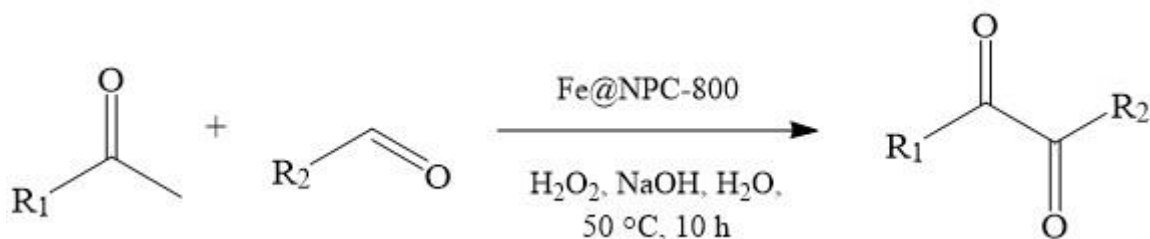


Схема 1.3 – Одностадийный каскадный синтез α -дикетонов из ацетофенонов и альдегидов с применением железного нанокompозитного катализатора

Согласно литературным данным, металлические катализаторы в реакциях окисления ацетофенонов применяются нечасто. Основным катализатором в реакциях синтеза бензилов из ацетофенонов является оксид селена (IV) или его кислоты, так как метиленовая группа в α -положении к карбонильной группе легко им окисляется (схема 1.4) [13].

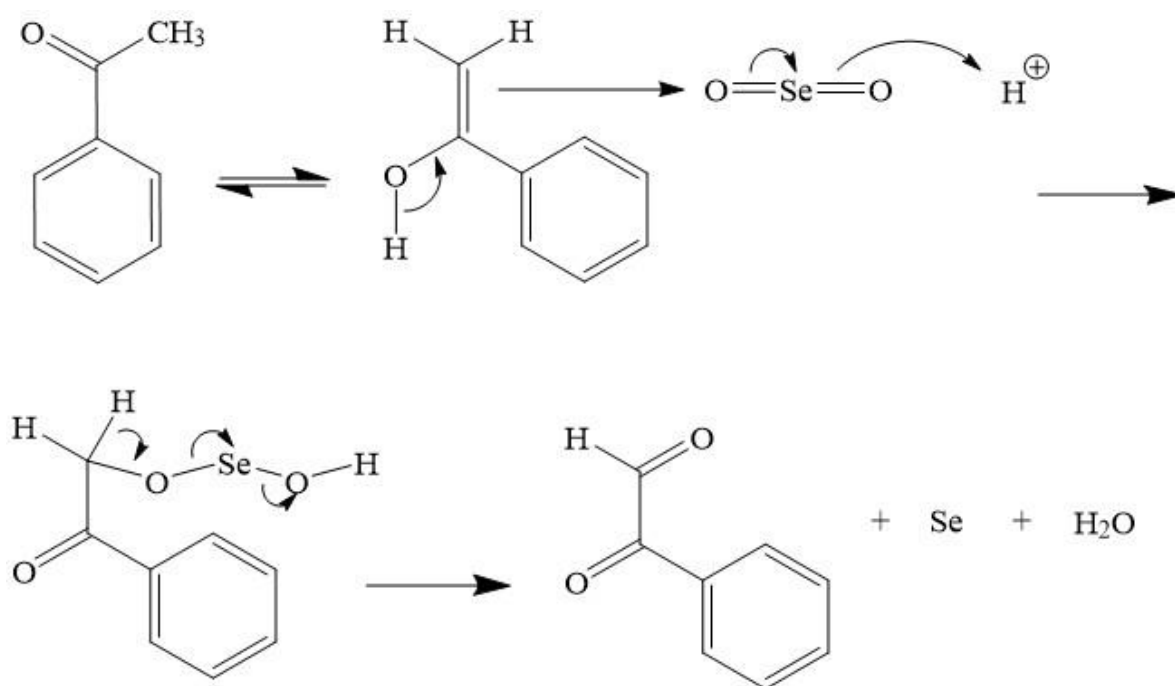


Схема 1.4 – Механизм окисления ацетофенонов оксидом селена (IV) в реакции Райли

Так, например, в одностадийном синтезе несимметричных бензилов используются диоксид селена и моногидрата *n*-толуолсульфоновой кислоты

в качестве катализатора и окислителя соответственно. Выход целевых бензилов составляет 38–75%. Использование других кислот вместо моногидрата *n*-толуолсульфоновой кислоты, например, уксусной или кислоты Льюиса, такой как AlCl₃, в различных условиях либо не приводит к образованию целевых продуктов, либо приводит к образованию труднообрабатываемых продуктов [14].

Несимметричные бензилы можно получить одностадийной реакцией из замещенных ацетофенонов и неактивированных или слабо активированных аренов (бензол, толуол, ксилол, нафталин, анизол, антрацен) с использованием селенистой кислоты и моногидрата *n*-толуолсульфоновой кислоты в качестве катализаторов при невысоких температурах (схема 1.5). Выход реакции составляет 60-75% [15].

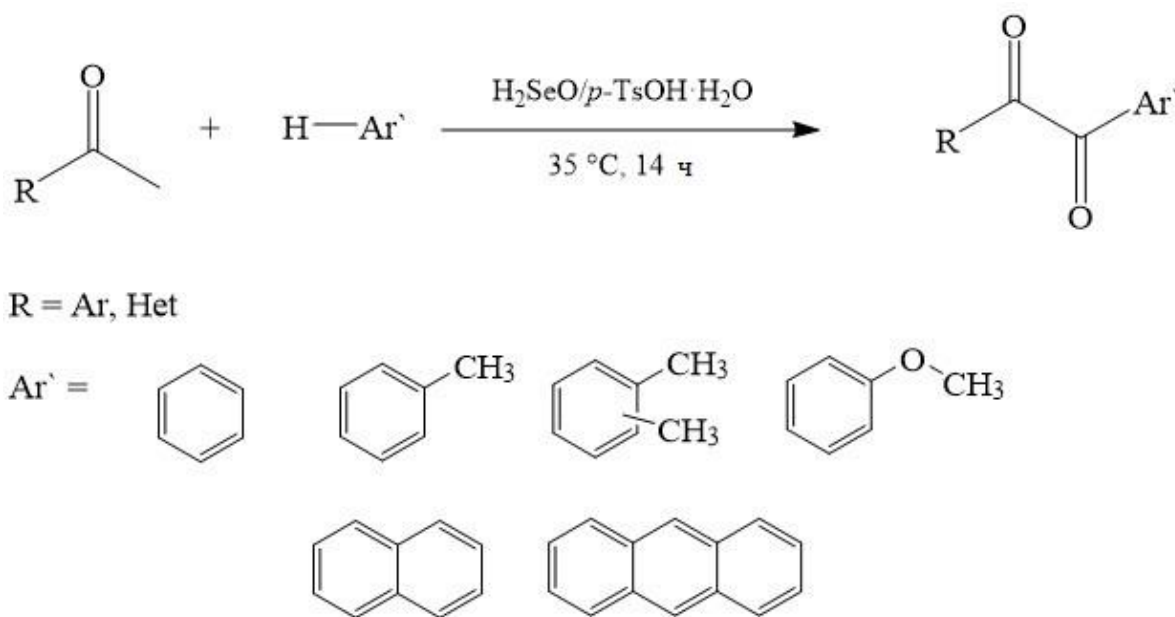


Схема 1.5 – Получение несимметричных бензилов из замещенных ацетофенонов и аренов

1.4 Практическое значение бензилов

Бензилы, как органические субстраты, интересны тем, что могут быть использованы при получении более сложных молекул, обладающих биологической активностью. Так, например, известно, что бензилы используются в синтезе хиноксалинов (схема 1.6) [16]. Хиноксалины в свою

очередь играют важную роль в качестве основного каркаса для создания ряда антибиотиков, противоопухолевых и противовирусных препаратов [17, 18]. Помимо этого, хиноксалины нашли широкое применение в других областях науки и техники в качестве красителей [19], эффективных электролюминесцентных материалов [20], органических полупроводников [21].

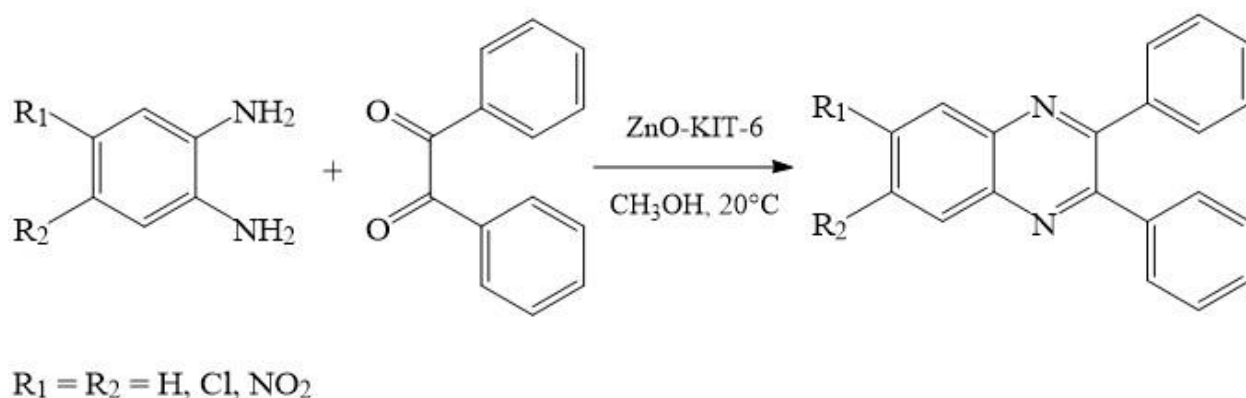


Схема 1.6 – Получение некоторых хиноксалинов

Бензилы используются также при получении имидазолов (схема 1.7) [22]. Имидазол и его производные – важные гетероциклические соединения, обладающие разнообразными биологическими и фармакологическими свойствами [23, 24]. Замещенные имидазолы могут использоваться в качестве биоцидов, в частности гербицидов, фунгицидов и регуляторов роста [25], сильнодействующего антагониста рецептора ангиотензина II (для лечения сердечно-сосудистых заболеваний) [26], антагониста рецептора глюкагона (для лечения и профилактики диабета 2 типа) [27], и ингибиторов интерлейкина 1 (для лечения криопирин-ассоциированных периодических синдромов) и 5-липоксигеназы (антилейкотриеновые препараты для лечения астмы и ринита) [28].

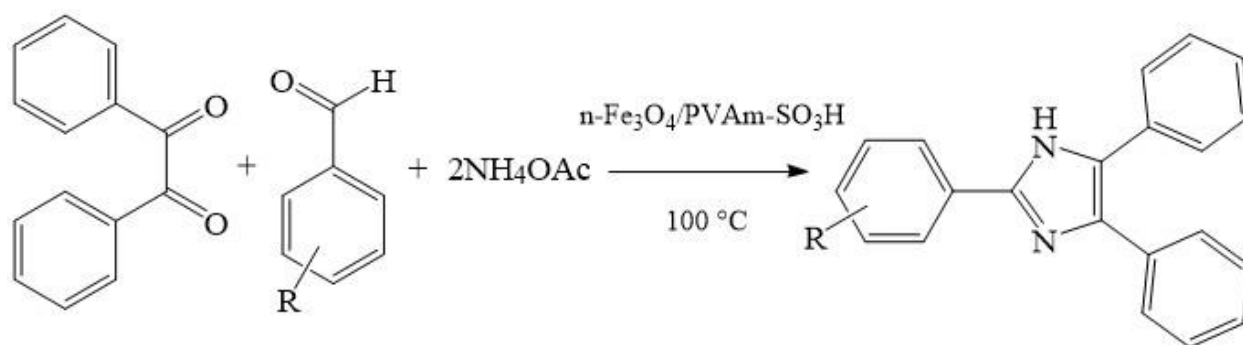


Схема 1.7 – Получение некоторых имидазолов

Кроме того, бензилы применяются в синтезе диоксимов, дитиолонов, гидантоинов и ряде других соединений. Исходя из этого, эффективные способы получения ароматических α -дикетонов представляют большой интерес.

2. Объект и методы исследования

Мониторинг и проверку чистоты получаемых продуктов проводили с использованием метода ТСХ. Для работ использовались пластинки Silufol UV-254. В качестве элюирующих агентов применялась система гексан: этилацетат в соотношении 9,8:0,2. Проявление пятен осуществляли в УФ-свете с длиной волны 254 нм.

Фильтрация осадка проводили при помощи вакуумного насоса ВН-461М.

Хромато-масс-спектры регистрировали на газовом хроматографе Agilent 7890А с масс-селективным детектором Agilent 5975С (70 эВ), газ-носитель – гелий.

Для работы использовались бензол, концентрированная серная кислота, изопропиловый спирт, этилацетат марки «хч» без предварительной очистки. Ацетофенон чистоты 99%, 2-хлорацетофенон чистоты 98%, 4-хлорацетофенон чистоты 98%, 2-бромацетофенон чистоты 99%, 3-бромацетофенон чистоты 98%, 4-бромацетофенон чистоты 98% использовались без предварительной очистки. Оксид селена (IV) чистоты 99,4% был предварительно возогнан для удаления влаги, позже хранился в эксикаторе.

Краткая характеристика используемых в работе веществ приведена в таблице 2.1.

Таблица 2.1 – Характеристика используемых веществ

Формула	Содержание, %	Внешний вид	Молярная масса, г/моль	Плотность, г/мл	T _{пл} , °С	T _{кип} , °С
1	2	3	4	5	6	7
C ₆ H ₆	>99	Бесцветная жидкость	78,11	0,879	–	80,1
H ₂ SO ₄	>99	Бесцветная маслянистая жидкость	98,08	1,836	–	337

Продолжение таблицы 2.1.

1	2	3	4	5	6	7
$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$	>99	Бесцветная прозрачная жидкость	60,09	0,785	–	82,5
$\text{C}_6\text{H}_5\text{COCH}_3$	99	Бесцветная маслянистая жидкость	120,4	1,028	–	202
$2\text{-ClC}_6\text{H}_4\text{COCH}_3$	98	Бесцветная маслянистая жидкость	154,59	1,189	–	228
$4\text{-ClC}_6\text{H}_4\text{COCH}_3$	98	Бесцветная маслянистая жидкость	154,59	1,192	–	230
$2\text{-BrC}_6\text{H}_4\text{COCH}_3$	99	Бесцветная маслянистая жидкость	199,04	1,476	–	116
$3\text{-BrC}_6\text{H}_4\text{COCH}_3$	98	Бесцветная маслянистая жидкость	199,04	1,498	–	80
$4\text{-BrC}_6\text{H}_4\text{COCH}_3$	98	Белые кристаллы	199,04	1,640	50	–
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OCOCH}_3$	>99	Бесцветная жидкость	88,11	0,902	–	77,1
SeO_2	99,4	Белые кристаллы	110,96	3,954	Возго- няется при 320	–

5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Введение

Целью данного раздела является оценка перспективности научно-исследовательской работы. Для этого используют определение коммерческой ценности разработки. Коммерческая ценность определяется не только научно-технической новизной и практической значимостью, но рыночным спросом, конечной стоимостью товара, затратами на материально-техническую базу, сроками проведения научно-исследовательской работы и ее реализацией на рынке.

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

5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Данная научно-исследовательская работа посвящена исследованию способа получения бензилов реакцией окисления ацетофенонов. Полученные бензилы могут быть использованы далее в органическом синтезе для получения более сложных молекул.

Потенциальными потребителями разработанной методики являются научно-исследовательские лаборатории и предприятия химической промышленности. Научно-исследовательские лаборатории заинтересованы в дешевой и легкой в проведении реакции для получения реактивов в небольшом количестве, используемых в собственных исследованиях. Предприятия химической промышленности также заинтересованы в дешевой и доступной реакции для производства реактивов с целью последующей их реализацией. В таблице 5.1 представлено сегментирование рынка для разработанной методики получения бензилов.

Таблица 5.1 – Сегментирование рынка для разработанной методики получения бензолов

Критерии сегментирования		Отрасль	
		Научно-исследовательские лаборатории	Предприятия химической промышленности
Способ использования методики	Крупное производство	–	Для последующей реализации
	Мелкое производство	Для собственных исследований	–

Согласно результатам сегментирования, целевой аудиторией разрабатываемой методики являются *крупные* предприятия химической промышленности и *небольшие* научно-исследовательские лаборатории.

5.1.2 Анализ конкурентных технических решений

Анализ конкурентных разработок необходимо проводить систематически, так как рынок находится в постоянном движении. Это позволяет корректировать научное исследование и не терять актуальность.

В ходе анализа (таблица 5.2) конкурирующих технических решений рассмотрены две конкурирующие методики синтеза бензолов:

- Конкурирующее решение 1 – синтез бензолов путем окисления диарилацетиленов (толанов) с палладиевым катализатором [2];
- Конкурирующее решение 2 – синтез бензолов путем окисления диарилэтиленов (стильбенов) с использованием оксида графита [11].

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}
1	2	3	4	5	6	7	8
Технические критерии оценки ресурсоэффективности							
1. Выход целевого продукта	0,20	4	5	4	0,8	1	0,8
2. Удобство выделения целевого продукта	0,20	5	4	5	1	0,8	1

Продолжение таблицы 5.2.

3. Чистота целевого продукта	0,15	3	4	5	0,45	0,6	0,75
4. Экологичность	0,10	3	3	4	0,3	0,3	0,4
5. Время реакции	0,10	4	2	2	0,4	0,2	0,2
Экономические критерии оценки эффективности							
1. Стоимость продукта	0,20	4	1	1	0,8	0,2	0,2
2. Конкурентоспособность разработки	0,10	4	3	4	0,4	0,3	0,4
Итого	1				4,15	3,4	3,75

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

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

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

V_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

Проведенный анализ конкурентных технических решений показал, что разрабатываемая нами методика является наиболее актуальной и перспективной, чем разработки конкурентов. Она требует меньше времени для проведения реакции, а также стоимость используемых реагентов достаточно низкая.

5.1.3 SWOT-анализ

SWOT-анализ – распространенный метод, применяемый для анализа сильных и слабых сторон разрабатываемой методики, а также возможностей и угроз со стороны внешней окружающей среды. Результаты представлены в таблице 5.3.

Таблица 5.3 – Матрица SWOT

	<p>Сильные стороны НИР: С1. Быстрое протекание реакции С2. Удобство выделения целевого продукта С3. Низкая стоимость реагентов С4. Широкое применение продукта С5. Хороший выход продуктов</p>	<p>Слабые стороны НИР: Сл1. Снижение выхода из-за образования побочных соединений Сл2. Долгое выделение продукта из реакционной массы и последующая очистка Сл3. Необходимость подготовки сырья (предварительная возгонка оксида селена (IV))</p>
<p>Возможности: В1. Высокий спрос на продукт В2. Повышение спроса на производство химических реактивов в России В3. Использование инновационной инфраструктуры НИ ТПУ</p>	<p>Доступность методики и повышенный спрос на производство химических реактивов в России дают возможность попробовать масштабировать реакцию.</p>	<p>Использование инновационной инфраструктуры НИ ТПУ позволит устранить недостатки разработки.</p>
<p>Угрозы: У1. Отсутствие спроса на разрабатываемую методику У2. Развитая конкуренция технологий У3. Снижение цены конкурентных технологий</p>	<p>Привлечение потребителей, занимающихся исследованиями, в которых задействован целевой продукт.</p>	<p>Совершенствование технологии с учетом конкурентных преимуществ.</p>

Таблица 5.4 – Интерактивная матрица проекта.

Сильные стороны проекта						
		С1	С2	С3	С4	С5
Возможности проекта	В1	+	+	+	+	+
	В2	+	+	+	+	+
	В3	–	–	–	+	+

Таблица 5.5 – Интерактивная матрица проекта

Слабые стороны проекта				
		Сл1	Сл2	Сл3
Возможности проекта	В1	–	–	–
	В2	–	+	–
	В3	+	+	–

Таблица 5.6 – Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта						
Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	У1	+	+	+	+	+
	У2	+	+	+	–	+
	У3	+	+	–	–	+

Таблица 5.7 – Интерактивная матрица проекта

Слабые стороны проекта				
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3
	У1	–	+	–
	У2	+	+	+
	У3	+	+	–

Таким образом, при правильном планировании дальнейшей работы можно минимизировать риск возникновения нежелательных ситуаций и создать благоприятную атмосферу для разработки и продвижения продукта научно-исследовательской работы. Важным условием успешного продвижения разработки является ее постоянное совершенствование.

5.2 Планирование научно-исследовательских работ

5.2.1 Структура работ в рамках научного исследования

Для выполнения научного исследования была сформирована научная группа, в которую входят научный руководитель и инженер (табл. 5.8).

Таблица 5.8 – Рабочая группа проекта

№ п/п	ФИО, место работы, должность	Роль в проекте	Функции
1	Штрыкова Виктория Викторовна, к.х.н., доцент НИ ТПУ ИШНПТ НОЦ Н.М. Кижнера	Руководитель проекта	Координация деятельности исполнителя; проверка и анализ результатов проекта
2	Гришина Софья Вячеславовна, НИ ТПУ ИШНПТ НОЦ Н.М. Кижнера инженер	Исполнитель проекта	Выполнение проекта

Составлен перечень этапов и работ, проведено распределение обязанностей участников проекта. Перечень представлен в таблице 5.9.

Таблица 5.9 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

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 «Получение бензилов»	Руководитель, Инженер
	4	Календарное планирование работ	Руководитель, инженер
Теоретические и экспериментальные исследования	5	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Инженер
	6	Проведение экспериментов	Инженер
	7	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	Руководитель, инженер
Обобщение и оценка результатов	8	Оценка эффективности полученных результатов	Руководитель, инженер
	9	Определение целесообразности проведения ВКР	Руководитель, инженер
Проведение ВКР			
Разработка технической документации и проектирование	10	Поиск информации необходимой для выполнения раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	Инженер
	11	Оформление раздела «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»	Инженер
	12	Поиск информации необходимой для выполнения раздела «Социальная ответственность»	Инженер

Продолжение таблицы 5.9.

	13	Оформление раздела «Социальная ответственность»	Инженер
Оформление отчета по НИР	14	Составление пояснительной записки	Инженер

5.2.2 Определение трудоемкости выполнения работ

Для оценки трудовых затрат, которые в большинстве случаев формируют основную часть стоимости разработки, была определена трудоемкость участников проекта.

Ожидаемое (среднее) значение трудоемкости $t_{ожі}$ рассчитывается по формуле:

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

где t_{mini}/t_{maxi} – минимальное/максимальное возможное время выполнения заданной i -ой работы исполнителем, чел.-дн.;

На основании расчетов ожидаемой трудоемкости работ, необходимо определить продолжительность каждой работы в рабочих днях T_{pi} :

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

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

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

$ч_i$ – количество исполнителей, одновременно выполняющих поставленную задачу, чел.

Результаты расчетов трудоемкости и продолжительности всех видов работ приведены в таблице 5.10.

5.2.3 Разработка графика проведения научного исследования

Наиболее удобным и наглядным способом разработки графика проведения научного исследования является построение диаграммы Ганта.

Для его построения длительность каждого этапа работы из рабочих дней была переведена в календарные дни.

Формула перевода:

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

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.

Коэффициент календарности для пятидневной рабочей недели:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}} = \frac{365}{365 - 104 - 14} = 1,48. \quad (5.6)$$

Полученные значения в календарных днях округляются до целого числа, а затем сводятся в таблицу 5.10.

Таблица 5.10 – Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоемкость работ						Длительность работ в рабочих днях, T_{pi}		Длительность работ в календарных днях, T_{ki}	
	t_{min} , чел-дни		t_{max} , чел-дни		$t_{\text{ож}}$, чел-дни					
	Руководитель	Инженер	Руководитель	Инженер	Руководитель	Инженер	Руководитель	Инженер	Руководитель	Инженер
Составление и утверждение технического задания	0,5	–	1	–	0,7	–	0,7	–	1	–
Выбор направления исследований	0,5	0,5	1	1	0,7	0,7	0,35	0,35	1	1

Продолжение таблицы 5.10.

Подбор и изучение материалов по теме	2	4	3	5	2,4	4,4	1,2	2,2	2	3
Календарное планирование работ по теме	0,5	0,5	1	1	0,7	0,7	0,35	0,35	1	
Проведение теоретических расчетов и обоснований	–	4	–	6	–	4,8	–	4,8	–	7
Проведение экспериментов	–	30	–	40	–	34	–	34	–	50
Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями	1	2	2	3	1,4	2,4	0,7	1,2	1	2
Оценка эффективности полученных результатов	1	2	2	3	1,4	2,4	0,7	1,2	1	2
Определение целесообразности проведения ВКР	0,5	2	1	3	1,4	2,4	0,35	1,2	1	2
Поиск информации необходимой для выполнения раздела «Финансовый менеджмент»	–	1	–	2	–	1,4	–	1,4	–	2
Оформление раздела «Финансовый менеджмент»	–	3	–	4	–	3,4	–	3,4	–	5
Поиск информации необходимой для выполнения раздела «Социальная ответственность»	–	1	–	2	–	1,4	–	1,4	–	2
Оформление раздела «Социальная ответственность»	–	3	–	4	–	3,4	–	3,4	–	5
Составление пояснительной записки	–	12	–	15	–	13,2	–	13,2	–	20

На основе произведенных расчетов, представленных в таблице 5.10, строится диаграмма Ганта, представленная на рисунке 5.1.

Вид работ	Исполнители	Т _к , кал, дн.	Продолжительность выполнения работ												
			февраль			март			апрель			май			
			1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	
Составление ТЗ	Руководитель	1	■												
Выбор направления исследований	Руководитель, инженер	1 1	■												
Изучение материалов	Руководитель, инженер	2 3	■	▨											
Календарное планирование	Руководитель	1	■												
Проведение теор. расчетов	Инженер	7		▨											
Проведение экспериментов	Инженер	50			▨	▨	▨	▨	▨	▨					
Сопоставление результатов	Руководитель, инженер	1 2									■	▨			
Оценка эффективности	Руководитель, инженер	1 2									■	▨			
Определение целесообразности проведения ВКР	Руководитель, инженер	1 2									■	▨			
Поиск информации для раздела ФМ	Инженер	2										▨			
Оформление раздела ФМ	Инженер	5										▨			
Поиск информации для раздела СО	Инженер	2											▨		
Оформление раздела СО	Инженер	5											▨		
Составление ПЗ	Инженер	20												▨	▨

Руководитель – ■, инженер – ▨.

Рисунок 5.1 – Календарный план-график проведение НИР

5.2.4 Бюджет научного исследования

В данном разделе приведено полное и достоверное отражение всех видов расходов, связанных с выполнением научно-исследовательского проекта.

5.2.4.1 Расчет материальных затрат ВКР

Для выполнения экспериментальной части требовались материальные затраты на приобретение реагентов необходимых для проведения синтеза. Большинство необходимых реактивов было предоставлено Научно-образовательным центром Н.М.Кижнера. Некоторая часть реактивов, отсутствующих при центре, была заказана через группу компаний «Sigma-Aldrich».

Формула для расчёта материальных затрат:

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

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.);

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

Таблица 5.11 – Материальные затраты

Наименование	Количество	Расходуемое количество	Цена за единицу, руб.	Итого затраты, руб.
Бензол (хч) 99,8%	1 л	1 л	359,00	359,00
Оксид селена (IV), 98%	100 г	10,08 г	8572,01	925,78
Серная кислота, хч	1 л	9 мл	223,00	2,01
Ацетофенон, 99%	100 мл	1,55 мл	2779,79	43,09
2`-хлорацетофенон, 97%	25 г	1,16 г	5071,09	235,30
4`-хлорацетофенон, 97%	100 г	1,16 г	4617,48	53,56
2`-бромацетофенон, 99%	5 г	1,5 г	3640,48	1092,14
3`-бромацетофенон, 99%	25 г	1,5 г	6303,97	378,24

Продолжение таблицы 5.11.

4`-бромацетофенон, 98%	25 г	1,5 г	2454,13	147,25
Всего за материалы, руб.				3 236,37
Транспортно-заготовительные расходы, руб.				485,46
Итого по статье, руб.				3 721,83

5.2.4.2 Расчет затрат на оборудование для научно-экспериментальных работ

В данную статью включены все затраты, связанные с приобретением специального оборудования, необходимого для проведения экспериментальной части работы. Определение стоимости спецоборудования производится по действующим прейскурантам. Стоимость оборудования, имеющегося в научно-технической организации, учитывается в калькуляции в виде амортизационных отчислений.

Таблица 5.12 – Затраты на оборудование

№	Наименование оборудования	Кол-во, шт.	Срок полезного использования, лет	Цены единицы оборудования, руб.
1	Весы аналитические НТР-120CE Shinko	1	5	75 400
2	Прибор для определения температуры плавления MP50 (Mettler Toledo)	1	10	400 000
3	Хромато-масс-спектрометр Agilent 5975C	1	15	5 100 000
4	Мешалка магнитная MSH-20D-Set	1	5	39 827
5	Насос ВН-461М	1	7	50 800

Расчет амортизации проводится следующим образом:

Норма амортизации:

$$H_{AM} = \frac{1}{n}, \quad (5.8)$$

где n – срок полезного использования в количестве лет.

Амортизация:

$$E_{AM} = \frac{K_{об} \cdot H_{AM} \cdot T_{об}}{365}, \quad (5.9)$$

где I – итоговая сумма, тыс. руб.; t – время использования, мес.

Рассчитаем амортизацию для аналитических весов с учётом, что срок полезного использования 5 лет:

$$H_{AM} = \frac{1}{n} = \frac{1}{5} = 0,2 \quad (5.10)$$

Общую сумму амортизационных отчислений для весов находим следующим образом:

$$E_{AM} = \frac{75\,400 \cdot 0,2 \cdot 50}{365} = 2\,065,75 \text{ руб.} \quad (5.11)$$

Для прибора определения температуры плавления:

$$E_{AM} = \frac{400\,000 \cdot 0,1 \cdot 50}{365} = 5\,479,45 \text{ руб.} \quad (5.12)$$

Для хромато-масс-спектрометра:

$$E_{AM} = \frac{5\,100\,000 \cdot 0,067 \cdot 50}{365} = 46\,808,22 \text{ руб.} \quad (5.13)$$

Для магнитной мешалки:

$$E_{AM} = \frac{39\,827 \cdot 0,2 \cdot 50}{365} = 1\,091,15 \text{ руб.} \quad (5.14)$$

Для насоса:

$$E_{AM} = \frac{50\,800 \cdot 0,143 \cdot 50}{365} = 995,12 \text{ руб.} \quad (5.15)$$

Суммарные затраты амортизационных отчислений:

$$A = 2\,065,75 + 5\,479,45 + 46\,808,22 + 1\,091,15 + 995,12 = 56\,439,69. \quad (5.16)$$

5.2.4.3 Основная заработная плата исполнителей

В данную статью включается основная заработная плата научных и инженерно-технических работников, непосредственно участвующих в выполнении работ по данной теме. Расходы по заработной плате определяется исходя из трудоемкости выполняемых работ и действующей системы окладов и тарифных ставок в НИ ТПУ.

Основная заработная плата ($Z_{осн}$) одного работника:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_p, \quad (5.17)$$

где T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн. (рис. 5.1);

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

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}, \quad (5.18)$$

где Z_m – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 28 раб. дней – $M=11,2$ месяца, 5-дневная неделя;

F_d – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн. (табл. 5.13).

Таблица 5.13 – Баланс рабочего времени исполнителей

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	104	104
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	28	28
- невыходы по болезни	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	219	219

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_m = Z_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}}, \quad (5.19)$$

где $Z_{\text{тс}}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3;

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5;

$k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Таблица 5.14 – Расчет основной заработной платы

Исполнители	З _{тс} , руб.	k _р	k _{пр}	k _д	З _м , руб	З _{дн} , руб.	T _р , раб. дн.	З _{осн} , руб.
Руководитель	26 300	1,3	0,3	0,2	51 285	2 622,80	8	20 982,40
Инженер	17 000	1,3	0,3	0,2	33 150	1 695,34	101	171 229,34
Итого								192 211,74

5.2.4.4 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

Дополнительная заработная плата определяется по формуле:

Для руководителя:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} = 0,15 \cdot 20\,982,40 = 3\,147,36, \quad (5.20)$$

Для инженера:

$$Z_{\text{доп}} = k_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}} = 0,15 \cdot 171\,229,34 = 25\,694,90, \quad (5.21)$$

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

5.2.4.5 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из формулы:

$$Z_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}), \quad (5.22)$$

где $k_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.). Для учреждений, осуществляющих научную и образовательную деятельность размер страховых взносов равен 27,1%.

Отчисления во внебюджетные фонды для руководителя составят:

$$Z_{\text{внеб}} = 0,271 \cdot (20\,982,40 + 3\,147,36) = 6\,539,17 \text{ руб.}; \quad (5.23)$$

Для инженера:

$$Z_{\text{внеб}} = 0,271 \cdot (171\,229,34 + 25\,694,90) = 53\,366,50 \text{ руб.} \quad (5.24)$$

5.2.4.6 Накладные расходы

Накладные расходы учитывают прочие затраты, 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:

$$\begin{aligned} Z_{\text{накл}} &= (\text{сумма статей } 1 \div 5) \cdot k_{\text{нр}} = \\ &= (3\,721,83 + 56\,439,69 + 192\,211,74 + 3\,147,3 + 28\,842,26 + 6\,539,17 + \\ &\quad 53\,366,50) \cdot 0,16 = 54\,579,38 \text{ руб.} \end{aligned} \quad (5.25)$$

5.2.4.7 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

На основании полученных данных по отдельным статьям затрат составлен бюджет ВКР «Получение бензилов реакцией окисления ацетофенонов» по форме, приведенной в таблице 5.15. В таблице также представлено определение бюджета затрат двух конкурентных методик: аналог 1 – получения бензила окислением толана, аналог 2 – получения бензила окислением стильбена.

Таблица 5.15 – Расчет бюджета затрат НИИ

№	Наименование статьи	Сумма, руб			Примечание
		Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2	
1	Материальные затраты НИИР	3 721,83	17 279,58	13 986,74	Пункт 6.2.4.1
2	Затраты на специальное оборудование	56 439,69	56 439,69	56 439,69	Пункт 6.2.4.2
3	Основная заработная плата	192 211,74	192 211,74	192 211,74	Пункт 6.2.4.3
4	Затраты на дополнительную заработную плату	28 842,26	28 842,26	28 842,26	Пункт 6.2.4.4

Продолжение таблицы 5.15.

5	Отчисления во внебюджетные фонды	59 905,67	59 905,67	59 905,67	Пункт 6.2.4.5
6	Накладные расходы	54 579,39	56 748,63	56 221,66	Пункт 6.2.4.6
Бюджет затрат НИР		395 700,58	411 427,57	407 607,02	Сумма ст. 1-6

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

В данном разделе определяется эффективность ВКР на основе расчета интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух средневзвешенных величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

5.3.1 Интегральный показатель финансовой эффективности исследования

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{ri}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (5.26)$$

где Φ_{ri} – стоимость i -го варианта исполнения (табл. 5.15);

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

В качестве аналогов данной работы рассмотрены способы получения бензила окислением толана (аналог 1) и стильбена (аналог 2).

$$I_{\text{финр}}^{\text{текущ}} = \frac{\Phi_{\text{текущ}}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{395\,700,58}{411\,427,57} = 0,962 \quad (5.27)$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{аналог 1}} = \frac{\Phi_{\text{аналог 1}}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{411\,427,57}{411\,427,57} = 1 \quad (5.28)$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{аналог 2}} = \frac{\Phi_{\text{аналог 2}}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{407\,700,58}{411\,427,57} = 0,991 \quad (5.29)$$

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

5.3.2 Интегральный показатель ресурсоэффективности

исследования

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов выполнения НИР (I_{pi}) определен путем сравнительной оценки их характеристик, распределенных с учетом весового коэффициента каждого параметра (таблица 5.16). В качестве аналогов также рассмотрены альтернативные способы получения бензила окислением толана (аналог 1) и стильбена (аналог 2).

Таблица 5.16 – Сравнительная оценка характеристик вариантов НИР

Объект исследования / Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1. Безопасность при использовании установки	0,20	4	4	4
2. Удобство в эксплуатации	0,20	5	4	4
3. Материалоемкость	0,15	5	5	4
4. Выход продукта	0,25	4	5	4
5. Надежность реакции	0,20	5	5	5
ИТОГО:	1	4,55	4,60	4,20

$$I_{тек} = 4 \cdot 0,2 + 5 \cdot 0,2 + 5 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,25 + 5 \cdot 0,2 = 4,55$$

$$I_{аналог\ 1} = 4 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,2 + 5 \cdot 0,15 + 5 \cdot 0,25 + 5 \cdot 0,2 = 4,60$$

$$I_{аналог\ 2} = 4 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,2 + 4 \cdot 0,15 + 4 \cdot 0,25 + 5 \cdot 0,2 = 4,20$$

5.3.3 Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки вычисляется на основании интегрального показателя финансовой эффективности и ресурсоэффективности исследования по формуле:

$$I_{\text{исп.}i} = \frac{I_{pi}}{I_{\text{фин.}p}^{\text{исп.}i}} \quad (5.30)$$

Тогда интегральный показатель эффективности для текущей разработки составит:

$$I_{\text{текущ.}} = \frac{4,55}{0,962} = 4,73 \quad (5.31)$$

$$I_{\text{аналог 1}} = \frac{4,60}{1} = 4,60 \quad (5.32)$$

$$I_{\text{аналог 2}} = \frac{4,20}{0,991} = 4,24 \quad (5.33)$$

Далее интегральные показатели эффективности каждого варианта НИР сравнивались с интегральными показателями другого варианта с целью определения сравнительной эффективности проекта (таблица 5.17).

Сравнение интегрального показателя эффективности вариантов исполнения разработки позволит определить сравнительную эффективность проекта. Сравнительная эффективность рассчитывается следующим образом:

$$\mathcal{E}_{\text{ср}} = \frac{I_{\text{исп.1}}}{I_{\text{исп.2}}}; \quad (5.34)$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср.1}} = \frac{4,73}{4,24} = 1,115; \quad (5.35)$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср.2}} = \frac{4,60}{4,24} = 1,085. \quad (5.36)$$

$$\mathcal{E}_{\text{ср.3}} = \frac{4,24}{4,24} = 1. \quad (5.36)$$

Таблица 5.17 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Текущий проект	Аналог 1	Аналог 2
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,966	1	0,992
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,55	4,60	4,20

Продолжение таблицы 5.17.

3	Интегральный показатель эффективности	4,71	4,60	4,23
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1,115	1,085	1

Сравнение среднего интегрального показателя сопоставляемых вариантов позволило сделать вывод о том, что наиболее финансово- и ресурсоэффективным является текущий проект.

Выводы по разделу

В ходе разработки данного раздела ВКР были сделаны следующие выводы:

- Данная научно-исследовательская разработка является конкурентоспособной. Главными преимуществами исследованного технического решения являются высокая скорость реакции и сравнительная дешевизна используемых реагентов.

- При планировании работ был разработан план-график выполнения этапов исследования для руководителя и инженера, позволяющий оценить и спланировать рабочее время исполнителей. Были определены: общее количество календарных дней для выполнения работы – 103 дней, общее количество календарных дней работы инженера – 101 и общее количество календарных дней работы руководителя – 8.

- Составлен бюджет проектирования, позволяющий оценить затраты на выполнение НИР, которые составляют 449 220,37 руб.

- Оценка финансовой эффективности показала, что текущий проект по получению бензилов окислением ацетофенонов является наиболее финансово- и ресурсоэффективным является по сравнению с аналогами.