

## ЭНЕРГОЕМКОСТЬ АДАМАНТАНСОДЕРЖАЩИХ УГЛЕВОДОРОДОВ В КОНДЕНСИРОВАННЫХ ФАЗАХ

© 2022 г. Г. Я. Кабо<sup>1</sup>, Ж. А. Казарина<sup>1</sup>, Е. Н. Степурко<sup>1,\*</sup>, А. В. Блохин<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Белорусский государственный университет, химический факультет, г. Минск, 220006 Беларусь

\*E-mail: stepurkoelena@gmail.com

Поступила в редакцию 26 октября 2021 г.

После доработки 20 января 2022 г.

Принята к публикации 23 марта 2022 г.

Проведена оценка энергоемкостей адамантансодержащих жидких углеводородов по разработанной аддитивной методике; рассмотрено влияние структурных факторов на энергоемкость веществ. Полученные величины энергоемкостей сопоставлены с соответствующими величинами для эффективных реактивных углеводородных горючих.

**Ключевые слова:** адамантансодержащие углеводороды, энергоемкость, аддитивные схемы, энтальпии сгорания

**DOI:** 10.31857/S0028242122030042, **EDN:** IDZFLLM

Нефтяные фракции и некоторые синтетические углеводороды являются эффективными горючими для реактивных двигателей, прежде всего, благодаря высокой энергоемкости, а также комплексу других физико-технических характеристик [1]. Считается [2, 3], что наибольшей энергоемкостью вследствие высокой энергии напряжений в циклах должны обладать углеводороды, содержащие в структурах молекул малые циклы, такие как синтин (1-метил-1,2-дициклопропилциклопропан), боктан (бициклобутан) и т.п.

В монографии Е.И. Багрия [4] процитированы работы, на основании которых возникло утверждение, что применение адамантана и его производных в качестве горючего реактивных двигателей не оправдано из-за низкой энергии напряжения циклов в адамантановых фрагментах молекул. В последнее время были разработаны методики синтеза алкиладамантанов и их смесей с плотностью  $> 0.9 \text{ г/см}^3$ , которые, по мнению авторов [5, 6], могут использоваться в качестве компонентов высокоплотных реактивных топлив.

Нами было показано [7], что для углеводородов в конденсированных состояниях размеры циклов в

молекулах не оказывают существенного влияния на массовую энтальпию сгорания, поскольку образование каждого цикла сопровождается потерей двух атомов водорода.

В настоящей работе представлены результаты исследования влияния структурных факторов на энергоемкость существенно различных производных адамантана: алкил-, винил-, циклопропил-, фенилзамещенных и т.п. Известны различные методы синтеза перечисленных типов веществ [4, 8] и постоянно ведутся работы по их совершенствованию [9]. Однако калориметрические измерения  $\Delta_c H(T)$  выполнены лишь для адамантана и некоторых метиладамантанов [10–16]. В связи с этим нами использован простой алгоритм оценки  $\Delta_c H(298 \text{ К}, C_n H_m)$  [7] перечисленных выше замещенных адамантана.

### Анализ энтальпий сгорания углеводородов $C_n H_m$ различной структуры

Величины энтальпий сгорания адамантана и его алкилпроизводных систематизированы нами в табл. 1.

Экспериментальные значения высших энтальпий сгорания (с образованием жидкой воды)

**Таблица 1.** Термодинамические свойства алкиладамантанов и некоторых углеводородных горючих в конденсированных состояниях

Вещество, $M$ , г/моль	$T_{\text{пл}}, \text{K}$	$\Delta_{\text{пл}}H(T_{\text{пл}})$ , кДж/моль	$d$ , г/см <sup>3</sup>	$-\Delta_c H^{\text{B}}(298.15 \text{ K})$ , кДж/моль	$-\Delta_c H^{\text{H}}$ , кДж/моль	$-\Delta_c H^{\text{H}}$ , МДж/кг	$-\Delta_c H^{\text{H}}$ , МДж/дм <sup>3</sup>
Адамантан, $C_{10}H_{16}$ , кр., 136.23	541.2 [21] 543.2 [22]	10.9 [21] 13.8 [22]	1.09 [10]	6029.2 [13]	5677.2	41.67	45.42
				6030.2 [12]	5678.2	41.68	45.43
				6032.3 [12]	5680.3	41.69	45.45
				6033.1 [14]	5681.1	41.70	45.45
				6033.4 [12]	5681.4	41.70	45.46
				6024.5 [15]	5672.5	41.64	45.39
1-Метиладамантан, $C_{11}H_{18}$ , кр., 150.26	392 [20]	3.71 [20]	1.06 [11]	6663.8 [13]	6267.8	41.71	44.22
				6658.4 [11]	6262.4	41.68	44.18
2-Метиладамантан, $C_{11}H_{18}$ , кр., 150.26	414.0 [20]		1.05 [11]	6684.3 [13]	6288.4	41.85	43.94
2,2-Диметиладамантан, $C_{12}H_{20}$ , кр., 164.29	416.2 [11]		1.01 [11]	6676.4 [11]	6280.4	41.79	43.89
				7324.1 [11]	6884.1	41.90	42.32
1,3-Диметиладамантан, $C_{12}H_{20}$ , ж., 164.29	245.0 [20] 244.0 [23] 247.8 [24]	0.92 [20] 0.94 [23] 1.54 [24]	1.10 [11]	7293.9 [11]	6854.0	41.72	45.89
				7317.7 [15]	6877.7	42.86	46.05
1-Этиладамантан, $C_{12}H_{20}$ , ж., 164.29	225.6 [24]	11.28 [24]	0.935 [16]	7334.7 [16]	6894.7	41.97	39.24
1,3,5-Триметиладамантан, $C_{13}H_{22}$ , ж., 178.31	253.6 [20]	1.73 [20]	1.08 [11]	7927.4 [11]	7443.4	41.74	45.08
				7952.6 [16]	7468.6	41.88	45.24
1,3,5,7-Тетраметиладмантан, $C_{14}H_{24}$ , кр., 192.34	337.2 [20]	9.82 [20]	1.12 [11]	8560.5 [11]	8032.5	41.76	46.77
				8577.0 [13]	8049.0	41.85	46.87
1,1'-Диадамантан, $C_{20}H_{30}$ , кр., 270.45	561 [17]	70 [17]	1.14 [20]	11801.3 [17]	11141.3	41.19	46.93
Синтин, $C_{10}H_{16}$ , ж., 136.23			0.851 [1]	6353.7 [18]	6006.41	44.1 [1]	37.50 [1]
Антрацен, $C_{14}H_{10}$ , кр., 178.23			1.25 [1]	7061 [19]	7126.35	39.98 [1]	49.98 [1]
ДАМСТ (Ди-2-метилстирол), $C_{18}H_{20}$ , кр., 236.35			1.078 [1]		9500.02	40.19 [1]	43.33 [1]
T-6, $C_{13.51}H_{25.39}$ , ж., 187.51			0.841 [1]		8127.30	43.15 [1]	36.29 [1]

$\Delta_c H^{\text{B}}(298.15 \text{ K})$  углеводородов определены в результате калориметрических измерений в [11–19]. Величины низших энтальпий сгорания  $\Delta_c H^{\text{H}}(298.15 \text{ K})$  соединений были вычислены нами по формуле:

$$\Delta_c H^{\text{H}}(298.15 \text{ K}, C_n H_m) = \Delta_c H^{\text{B}}(298.15 \text{ K}, C_n H_m) + \frac{m}{2} \Delta_{\text{вар}} H^{\circ}(298.15 \text{ K}, H_2O), \quad (1)$$

где  $\Delta_{\text{вар}} H^{\circ}(298.15 \text{ K}, H_2O)$  – энтальпия испарения воды при 298.15 K, равная 44.0 кДж/моль [19].

Массовые (МДж/кг) и объемные (МДж/дм<sup>3</sup>) величины энтальпий сгорания получены с использованием молекулярных масс ( $M$ ) и плотностей ( $d$ ) соединений [1, 10, 11, 16, 20], также представленных в табл. 1.

Из девяти соединений, приведенных в табл. 1, три производных адамантана (1,3-диметиладамантан, 1-этиладамантан, 1,3,5-триметиладамантан) при 298.15 K находятся в жидком состоянии. Однако поскольку энтальпии плавления производных адамантанов невелики [17, 20–24] (меньше 1% от

энтальпий сгорания), то при анализе энергоемкости конденсированных алкиладамантанов различием в их фазовых состояниях (кристалл или жидкость) можно пренебречь.

К существенному уменьшению энтальпий плавления этих соединений и различий плотности кристаллов и жидкостей приводит образование адамантаном и некоторыми его алкилпроизводными пластических кристаллов при температурах меньше 298.15 К [25, 26]. Температурные интервалы существования адамантана и его производных в состоянии пластического кристалла систематизированы нами на рис. 1.

Из табл. 1, видно, что массовая энергоемкость алкиладамантановых углеводородов в среднем составляет 40–42 МДж/кг. Большинство алкилпроизводных адамантанов в конденсированных фазах имеют плотность  $> (0.9–1)$  кг/дм<sup>3</sup> и поэтому обладают высокой объемной энергоемкостью (~39–46 МДж/дм<sup>3</sup>). По массовой или объемной энергоемкости алкиладамантановые углеводороды сопоставимы и даже превосходят высокоэффективные углеводородные горючие, такие как синтин, антрацен, ДАМСТ, Т-6. Среди алкиладамантанов более высокими значениями энергоемкости обладают твердые 1,3,5,7-тетраметиладамантан и 1,1'-диадамантан, а также жидкий 1,3,5-триметиладамантан.

### Прогнозирование энергоемкости углеводородов – производных адамантана

Пока еще не существует общепринятого алгоритма поиска веществ с высокой энергоемкостью. В работе [7] нами предложена аддитивная схема для расчета молярной энтальпии сгорания горючих углеводородов, согласно которой теплоты сгорания (высшие или низшие) соединений различной структуры (в том числе с бензольными фрагментами и конденсированными циклами) могут быть оценены по формуле:

$$\Delta_c H^{H,B}(C_n H_m) = n \Delta_c H^{H,B}(C) + m \Delta_c H^{H,B}(H) + \sum n_{\text{циклов}} E_i^{H,B} + \sum n_{\text{бенз}} E_{\text{бенз}}^{H,B}, \quad (2)$$

где  $\Delta_c H^{H,B}(C)$  и  $\Delta_c H^{H,B}(H)$  – вклады атомов С и Н в энтальпию сгорания углеводородов  $C_n H_m$ ,  $E_i$  – вклад энергии напряжения циклов с  $i = 2$  (двойная связь), 3, 4, 5, 6;  $E_{\text{бенз}}$  – энергия напряжения бен-

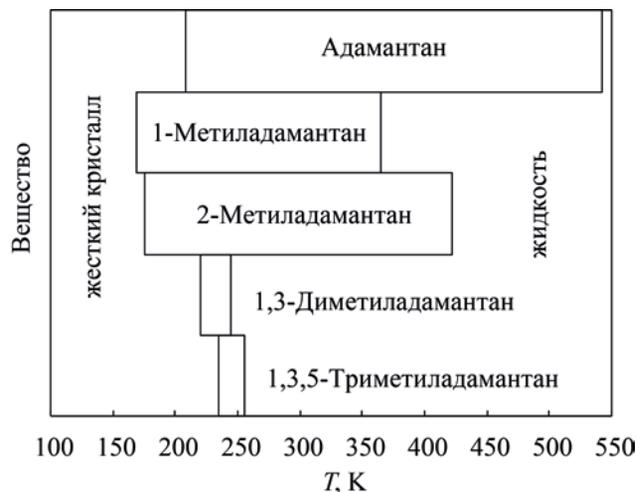


Рис. 1. Температурные интервалы существования адамантана и его производных в состояниях пластических кристаллов.

зольных (фенильных) фрагментов в молекулах;  $n_{\text{бенз}}$  – число бензольных (фенильных) фрагментов в молекулах.

Для полициклических соединений  $C_n H_m$ , не содержащих фенильных фрагментов, число циклов оценивается по формуле:

$$n_{\text{циклов}} = \frac{2n + 2 - m}{2}. \quad (3)$$

Численные значения постоянных уравнения (2), необходимые для определения энтальпий сгорания веществ, были получены в результате расчета на основе известных экспериментальных величин молярных высших энтальпий сгорания для 95 соединений различной структуры (в том числе с бензольными фрагментами и конденсированными циклами). Низшие теплоты сгорания этих соединений получены по уравнению (1).

Значения аддитивных параметров (табл. 2) позволяют оценивать высшие и низшие молярные энтальпии сгорания углеводородов различной структуры с погрешностью (среднее отклонение рассчитанных и экспериментальных величин молярных энтальпий сгорания) ~0.4% [7].

Данные табл. 2 использованы нами в данной работе для вычисления энтальпий сгорания ряда производных адамантана и некоторых потенциальных углеводородных горючих, для которых имеют-

**Таблица 2.** Аддитивные постоянные для расчета высших и низших энтальпий сгорания (кДж/моль) алкиладамантанов

	$-\Delta_c H^{\text{H}}(\text{C})$	$-\Delta_c H^{\text{H}}(\text{H})$	$E_2$	$E_3$	$E_4$	$E_5$	$E_6$	$E_{\text{бенз}}$
$\Delta_c H^{\text{B}}$	432.57	111.69	-50.67	-79.87	-76.87	1.63	31.5	35.37
$\Delta_c H^{\text{H}}$	432.57	89.69	-50.67	-79.87	-76.87	1.63	31.5	35.37

**Таблица 3.** Результаты расчета высших энтальпий сгорания производных адамантанов и некоторых углеводородных горючих при 298.15 К

Вещество, $M$ , г/моль	Расчетная формула	$-\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}_n\text{H}_m)$ , кДж/моль		$\Delta$ , кДж/моль	$\Delta$ , %
		эксперимент	расчет		
Адамантан, $\text{C}_{10}\text{H}_{16}$ , кр., 136.23	$10\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}) + 16\Delta_c H^{\text{B}}(\text{H}) + 3E_6$	6029.2 [13]	6018.2	11.0	0.18
		6032.3 [12]		12.0	0.20
		6032.3 [12]		14.1	0.23
		6033.1 [14]		14.9	0.25
		6033.4 [12]		15.2	0.25
		6024.5 [15]		6.3	0.10
1-Метиладамантан, $\text{C}_{11}\text{H}_{18}$ , кр., 150.26	$11\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}) + 18\Delta_c H^{\text{B}}(\text{H}) + 3E_6$	6663.8 [13]	6674.2	10.4	0.15
		6658.4 [11]		15.8	0.24
2-Метиладамантан, $\text{C}_{11}\text{H}_{18}$ , кр., 150.26	$11\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}) + 18\Delta_c H^{\text{B}}(\text{H}) + 3E_6$	6684.3 [13]	6674.2	10.1	0.15
		6676.4 [11]		2.2	0.03
2,2-Диметиладамантан, $\text{C}_{12}\text{H}_{20}$ , кр., 164.29	$12\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}) + 20\Delta_c H^{\text{B}}(\text{H}) + 3E_6$	7324.1 [11]	7330.1	6.0	0.08
		7293.9 [11]		36.2	0.50
1,3-Диметиладамантан, $\text{C}_{12}\text{H}_{20}$ , ж., 164.29	$12\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}) + 20\Delta_c H^{\text{B}}(\text{H}) + 3E_6$	7317.7 [15]	7330.1	12.4	0.17
		7334.7 [16]		4.6	0.06
1-Этиладамантан, $\text{C}_{12}\text{H}_{20}$ , ж., 164.29	$13\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}) + 22\Delta_c H^{\text{B}}(\text{H}) + 3E_6$	7927.4 [11]	7986.1	58.7	0.74
		7952.6 [16]		33.5	0.42
		8560.5 [11]		81.5	0.95
1,3,5,7-Тетраметиладамантан, $\text{C}_{14}\text{H}_{24}$ , кр., 192.34	$14\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}) + 24\Delta_c H^{\text{B}}(\text{H}) + 3E_6$	8577.0 [13]	8642.0	81.5	0.95
		11801.3 [17]		11.8	0.10
1,1'-Диадамантан, $\text{C}_{20}\text{H}_{30}$ , кр., 270.45	$20\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}) + 30\Delta_c H^{\text{B}}(\text{H}) + 6E_6$	11801.3 [17]	11813.1	11.8	0.10
Синтин, $\text{C}_{10}\text{H}_{16}$ , ж., 136.23	$10\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}) + 16\Delta_c H^{\text{B}}(\text{H}) + 3E_3$	6353.7 [18]	6352.3	1.4	0.02
Антрацен, $\text{C}_{14}\text{H}_{10}$ , кр., 178.23	$14\Delta_c H^{\text{B}}(\text{C}) + 10\Delta_c H^{\text{B}}(\text{H}) + 3E_6$	7061.0 [19]	7066.8	5.8	0.08
Среднее:				18.2	0.25

ся экспериментальные величины свойств, с целью верификации аддитивной методики и применимости ее для соединений – производных адамантана. Результаты расчета представлены в табл. 3.

Среднее расхождение рассчитанных и экспериментальных величин энтальпий сгорания составило ~0.25%, что следует считать удовлетво-

рительным результатом для простой процедуры вычисления и свидетельствует о применимости уравнения (2) для прогнозирования энтальпий сгорания углеводородов.

С целью исследования зависимости энтальпий сгорания производных адамантана от состава заместителей по разработанной аддитивной схеме

**Таблица 4.** Прогнозирование низших энтальпий сгорания замещенных адамантана  $C_nH_m$  в конденсированном состоянии (расчет)

Вещество, $M$ , г/моль	$-\Delta_c H^H(C_nH_m)$ , кДж/моль	$-\Delta_c H^H(C_nH_m)$ , МДж/кг	$V_m$ , см <sup>3</sup> /моль	$d$ , г/см <sup>3</sup>	$-\Delta_c H^H(C_nH_m)$ , МДж/дм <sup>3</sup>
<i>n</i> -Пропиладамантан, $C_{13}H_{22}$ , 178.31	7507.09	42.07	181.2	0.984	41.40
1,3-Дипропиладамантан, $C_{16}H_{28}$ , 220.39	9337.94	42.37	229.8	0.959	40.63
<i>n</i> -Бутиладамантан, $C_{14}H_{24}$ , 192.34	8114.04	42.19	197.4	0.974	41.1
Виниладамантан, $C_{12}H_{18}$ , 162.27	6761.43	41.67	156.9	1.034	43.09
1,3-Дивиниладамантан, $C_{14}H_{20}$ , 188.31	7856.62	41.72	181.2	1.039	43.35
Аллиладамантан, $C_{13}H_{20}$ , 176.30	7373.38	41.82	173.1	1.018	42.6
1-Циклопропиладамантан, $C_{13}H_{20}$ , 176.30	7402.58	41.99	171.3	1.029	43.22
1,3-Дициклопропиладамантан, $C_{16}H_{24}$ , 216.36	8994.92	41.57	209.9	1.031	42.84
Циклогексиладамантан, $C_{16}H_{26}$ , 218.39	9127.06	41.79	209.1	1.044	43.66
1-Фениладамантан, $C_{16}H_{20}$ , 212.33	8585.05	40.43	190.4	1.115	45.08
1,3-Дифениладамантан, $C_{22}H_{24}$ , 288.43	11503.86	39.88	248.2	1.162	46.34
1,3,5-Трифениладамантан, $C_{28}H_{28}$ , 364.52	14422.67	39.57	306.1	1.190	47.12
1,3,5-Триадамантилбензол, $C_{36}H_{48}$ , 480.77	19594.14	40.76	390.0	1.232	50.24
1,1'-Диадамантан, $C_{20}H_{30}$ , 270.45	11153.1	41.24	232.4	1.164	47.99
Диадамантилметан, $C_{21}H_{32}$ , 284.48	11765.05	41.36	248.6	1.144	47.33

получены прогнозные значения низших молярных энтальпий сгорания ряда алкиладамантанов, диалкил- и триалкиладамантанов, циклопропиладамантанов, фениладамантанов (табл. 4), о синтезе многих из которых сообщалось в [4, 8, 9], однако для которых до сих пор отсутствуют экспериментальные величины этих свойств.

Объемные энтальпии сгорания производных адамантана вычислены по соотношению:

$$\begin{aligned} \Delta_c H^H(C_nH_m), \text{ МДж/дм}^3 &= \\ &= \frac{\Delta_c H^H(C_nH_m), \text{ МДж/моль}}{V_m(C_nH_m), \text{ дм}^3/\text{моль}} \end{aligned} \quad (4)$$

Для расчета молярных объемов углеводородов  $V_m(C_nH_m)$ , см<sup>3</sup>/моль использовалось уравнение [7]:

$$V_m(C_nH_m) = nV_m(C) + mV_m(H) + \sum n_i V_i + n_{\text{бенз}} \cdot V_{\text{бенз}}, \quad (5)$$

где  $V_m(C)$  и  $V_m(H)$  – молярные объемы атомов С и Н,  $V_i$  – молярный объем циклов разных размеров ( $i = 2-6$ ),  $n_i$  – число циклов,  $V_{\text{бенз}}$ ,  $n_{\text{бенз}}$  – соответствующие величины для бензольных фрагментов.

С учетом полученных в [7] величин численных значений постоянных, для определения молярных

объемов углеводородов при 293 К со средней погрешностью ~0.9% можно воспользоваться уравнением:

$$\begin{aligned} V_m(C_nH_m) = n(-16.62) + m6.41 + n_2 24.74 + n_3 22.89 + \\ + n_4 20.00 + n_5 15.17 + n_6 12.08 + n_{\text{бенз}} 91.90. \end{aligned} \quad (6)$$

Физическая интерпретация численных значений постоянных уравнения 6, особенно  $V_m(C)$ , затруднительна, тем не менее все постоянные  $V_i$  имеют положительные значения, в отличие от методики Ярового [27], разработанной ранее для расчета молярных объемов алканов (для ряда фрагментов  $V_m(C_i-C_j)$  в [27] были получены отрицательные величины).

Рассчитанные массовые и объемные низшие энтальпии сгорания производных адамантана, приведенные в табл. 4, позволяют сделать несколько практических выводов для оценки перспектив их использования в качестве горючих реактивных двигателей.

Для наглядности сопоставление массовых и объемных низших энтальпий сгорания горючих приведено на рис. 2.

Из результатов, приведенных в табл. 1, 4 и рис. 2 следует, что массовые энтальпии сгорания

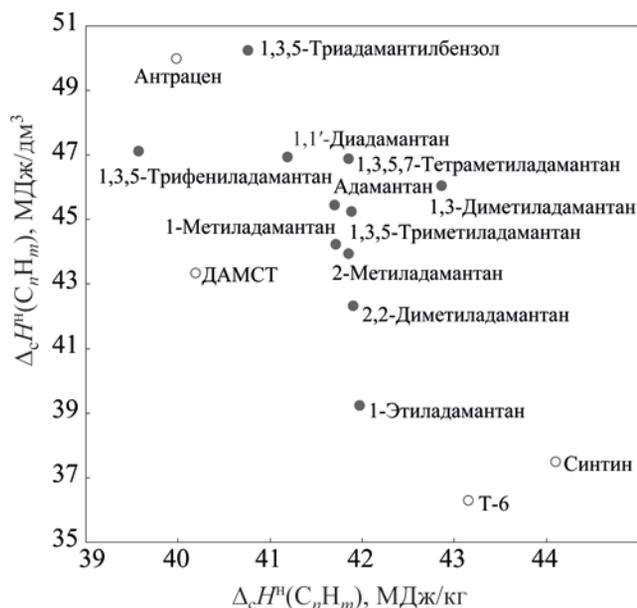


Рис. 2. Взаимосвязь энтальпий сгорания углеводородных горючих: ● – адамантан и его производные; ○ – углеводородные горючие.

адамантановых углеводородов относительно мало зависят от структур молекул и в среднем составляют ~41.5 МДж/кг. Это выше массовой энергоёмкости таких эффективных горючих, как антрацен (39.98 МДж/кг) и ДАМСТ (ди-2-метилстирол) (40.19 МДж/кг) [1].

Адамантановые углеводороды в конденсированных фазах, как правило, имеют плотность  $d_{20} \geq (0.9-1.0)$  кг/дм<sup>3</sup>, поэтому их объёмная энергоёмкость достаточно велика и по нашим оценкам (табл. 1, 4) лежит в пределах 39–50 МДж/дм<sup>3</sup>, что превышает объёмную энергоёмкость таких горючих как синтин (37.7 МДж/дм<sup>3</sup>) и Т-6 (36.3 МДж/дм<sup>3</sup>) [1].

Таким образом, по важнейшим физико-техническим характеристикам – массовой и объёмной энергии сгорания – углеводородные замещенные адамантана сопоставимы или превосходят соответствующие параметры известных эффективных углеводородных горючих.

Углеводородные горючие не обладают одновременно высокими значениями массовой и объёмной энергоёмкости (рис. 2). Объяснение этого факта

не представляется нам простым. Вероятно, тактико-технические характеристики систем, использующих горючие, должны определять, какой из параметров ( $\Delta_c H(T)$  МДж/кг или  $\Delta_c H(T)$  МДж/дм<sup>3</sup>) является более значимым.

Возможность практического использования в качестве реактивных горючих производных адамантана должна определяться также с учетом других физико-технических свойств – температур и энтальпий фазовых переходов, давлений насыщенного пара, теплоемкостей, температур воспламенения и т.д. [1]. Несомненно важна и экономическая эффективность их промышленного синтеза [3].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Адамантановые углеводороды обладают достаточно высокими значениями массовой и объёмной энергоёмкостей, что позволяет считать их потенциально возможными горючими реактивных двигателей. Наиболее перспективными для детального исследования в качестве реактивных горючих можно считать 1,3,5-триадамантилбензол, 1,1'-диадамтан, 1,3,5-трифениладамантан и 1,3,5-триадамантилбензол.

## БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнялась в рамках задания 2.1.1 ГПНИ «Химические процессы, реагенты и технологии, биорегуляторы и биооргхимия» (2021–2025 гг.)

## КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

## ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Кабо Геннадий Яковлевич, д.х.н., проф.

Казарина Жанна Александровна, студентка

Степурко Елена Николаевна, к.х.н., ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6341-5957>

Блохин Андрей Викторович, д.х.н., проф., ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4778-5872>

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бакулин В.Н., Дубовкин Н.Ф., Котова В.Н., Сорочкин В.А., Францкевич В.П., Яновский Л.С. Энергоемкие горючие для авиационных и ракетных двигателей. М.: Физматлит, 2009. 400 с.
2. Азов В., Воронцов Д. Последний бой углеводородов? // Новости космонавтики. 2008. Т. 18. № 2 (30). С. 44–46.
3. Григорьев А.А. Синтетические углеводородные ракетные горючие (пути снижения стоимости синтина) // Катализ и нефтехимия. 2005. № 13. С. 44–52.
4. Багрий Е.И. Адамантаны: получение, свойства, применение. М.: Наука, 1989. 264 с.
5. Xie J., Shi Ch., Zhao Y., Pan L., Zhang X., Zou Ji-Jun. Synthesis and comprehensive fuel properties of mono-substituted alkyl adamantanes for advanced aerospace propulsion // Fuel Processing Technology. 2021. V. 218. P. 106842. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2021.106842>
6. Harrison K.W., Rosenkoetter K.E., Harvey B.G. High density alkyl diamondoid fuels synthesized by catalytic cracking of alkanes in the presence of adamantane // Energy Fuels. 2018. V. 32. P. 7786–7791. <https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.8b00792>
7. Кабо Г.Я., Кабо Л.А., Карпушенкова Л.С., Блохин А.В. Энергоемкость углеводородов в жидком и твердом состояниях // Тонкие химические технологии. 2021. Т. 16. № 4. С. 273–286. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2021-16-4-273-286>
8. Севастьянова В.В., Краюшкин М.М., Юрченко А.Г. Успехи химии адамантана // Успехи химии. 1970. Т. 39. № 10. С. 1721–1749. <https://doi.org/10.1070/RC1970v039n10ABEH002045>
9. Баранов Н.И., Сафир Р.Е., Багрий Е.И., Боженко К.В., Чередниченко А.Г. Каталитическое алкилирование адамантана пропиленом: квантово-химические расчеты и данные эксперимента // Нефтехимия. 2020. Т. 60. № 5. С. 644–653. <https://doi.org/10.31857/S0028242120050044> [Baranov N.I., Safir R.E., Bagrii E.I., Bozhenko K.V., Cherednichenko A.G. Catalytic alkylation of adamantane with propylene: quantum-chemical calculations and experimental data // Petrol. Chemistry. 2020. V. 60. P. 1033–1042. <https://doi.org/10.1134/S0965544120090042>].
10. Butler R.S., Carson A.S., Laye P.G., Steele W.V. The enthalpy of formation of adamantane // J. Chem. Thermodyn. 1971. V. 3. № 2. P. 277–270
11. Steele W.V., Watt I. The standard enthalpies of formation of adamantanoid compounds. 4. Methyladamantanes // J. Chem. Thermodyn. 1977. V. 9. № 9. P. 843–849.
12. Bazyleva A.B., Blokhin A.V., Kabo G.J., Charapennikau M.B., Emel'yanenko V.N., Verevkin S.P., Diky V. Thermodynamic Properties of Adamantane Revisited // J. Phys. Chem. B. 2011. V. 115. № 33. P. 10064–10072. <https://doi.org/10.1021/jp204792b>
13. Clark T., Knox T.M., McKervey A., Mackle H., Rooney J.J. Thermochemistry of bridged-ring substances. Enthalpies of formation of some diamondoid hydrocarbons and of perhydroquinacene. Comparisons with data from empirical force field calculations // J. Am. Chem. Soc. 1979. V. 101. P. 2404–2410. <https://doi.org/10.1002/chin.197932107>
14. Boyd R.H., Sanwal S.N., Shary-Tehrany S., McNally D. Thermochemistry, thermodynamic functions, and molecular structures of some cyclic hydrocarbons // J. Phys. Chem. 1971. V. 74. № 9. P. 1264–1271.
15. Westrum E.F., Mansson M., Rapport N. Enthalpies of formation of globular molecules. I. Adamantane and hexamethylenetetramine // J. Am. Chem. Soc. 1970. V. 92. № 25. P. 7296–7299.
16. Melkhanova S.V., Pimenova S.M., Kolesov V.P., Pimerzin A.A., Sarkisova V.S. The standard molar enthalpies of formation of some alkyladamantanes // J. Am. Chem. Soc. 2000. V. 32. P. 1311–1317. <https://doi.org/10.1006/jcht.2000.0691>
17. Karpushenkava L.S., Kabo G.J., Bazyleva A.B., Blokhin A.V., Kabo A.G., Zaitsau D.H., Pimerzin A.A., Sarkisova V.S. Thermodynamic properties of 1,1'-biadamantane // Thermochemica Acta. 2007. V. 459. № 1–2. P. 104–110. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2007.03.018>
18. Pimenova S.M., Kozina M.P., Kolesov V.P. The enthalpies of combustion and formation of *cis*- and *trans*-1-methyl-1,2-dicyclopropylcyclopropane // Thermochemica Acta. 1993. V. 221. P. 139–141. [https://doi.org/10.1016/0040-6031\(93\)80531-e](https://doi.org/10.1016/0040-6031(93)80531-e)
19. Chemistry Webbook/ [webbook.nist.gov/chemistry](http://webbook.nist.gov/chemistry)
20. Clark T., Knox T.M., Mackle H., McKervey A. Order-disorder transitions in substituted adamantanes // J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1. 1977. V. 73. P. 1224–1231. <https://doi.org/10.1039/F19777301224>
21. Domalski E.S., Hearing E.D. Heat capacities and entropies of organic compounds in the condensed phase. Vol. III // J. Phys. Chem. Ref. Data. 1996. V. 25. № 1. P. 1. <https://doi.org/10.1063/1.555985>
22. Kabo G.J., Blokhin A.V., Charapennikau M.B., Kabo A.G., Sevruk V.M. Thermodynamic properties of adamantane and the energy states of molecules in plastic crystals for some cage hydrocarbons // Thermochemica Acta. 2000. V. 345. № 2. P. 125–133. [https://doi.org/10.1016/S0040-6031\(99\)00393-7](https://doi.org/10.1016/S0040-6031(99)00393-7)

23. *Arntz H., Schneider G.* Calorimetric investigations of plastic crystals at low temperatures and high pressures with differential scanning calorimetry // *Faraday Discuss. Chem. Soc.* 1980. V. 69. P. 139–145. <https://doi.org/10.1039/DC9806900139>
24. *Varushchenko R.M., Druzhinina A.I., Senyavin V.M., Sarkisova V.S.* The low-temperature heat capacities, phase transitions and thermodynamic properties of 1,3-dimethyladamantane and 1-ethyladamantane // *J. of Chem. Thermodynamics.* 2005. V. 37. № 2. P. 141–151. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2004.06.009>
25. *Блохин А.В.* Энергетические состояния молекул в пластических кристаллах органических веществ // Химические проблемы создания новых материалов и технологий: сб. ст. Под ред. О.А. Ивашкевича. Минск. 2003. № 2. С. 200–229.
26. *Kabo G.J., Blokhin A.V., Paulechka E., Roganov G.N., Frenkel M., Yursha I.A., Diky V., Zaitsau Dz., Bazyleva A., Simirsky V.V., Karpushenkava L.S., Sevruck V.M.* Thermodynamic properties of organic substances: Experiment, modeling, and technological applications // *J. Chem. Thermodyn.* 2019. V. 131. P. 225–246. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2018.10.025>
27. *Яровой С.С.* Методы расчета физико-химических свойств углеводородов. М.: Химия, 1978. 256 с.