

Thermochemische Untersuchungen am Hexahydroborazin

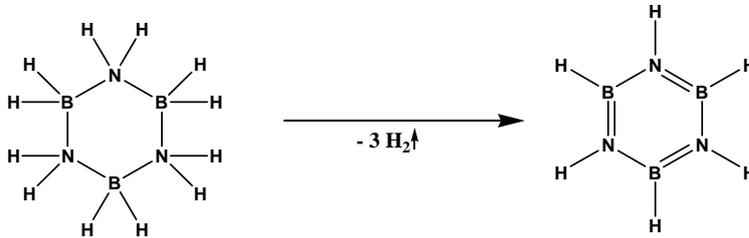
R. Schellenberg, G. Wolf, J. Kriehme

TU Bergakademie Freiberg
Institut für Physikalische Chemie
Leipziger Straße 29
D-09599 Freiberg,

Rene.Schellenberg@chemie.tu-freiberg.de

Hexahydroborazin, $B_3N_3H_{12}$, ist eine cyclische Bor-Stickstoff-Wasserstoff-Verbindung, welche sich bei Temperaturen oberhalb von 400 K unter Wasserstoffabgabe zersetzt. Aufgrund ihres Wasserstoffgehalts von 14 Masseprozent besitzt diese Verbindung Potential für eine Anwendung in wasserstoffgenerierenden Systemen. Aus praktischen Gründen wird jedoch nicht die vollständige Wasserstoffabgabe angestrebt, sondern die Zersetzung wird nur bis zu der Stufe $[BNH_2]_x$ durchgeführt. Hierbei zeigt sich, dass in Abhängigkeit von den Reaktionsbedingungen auch polymere Dehydrierungsprodukte entstehen können, welche im System aufgrund ihrer chemischen Inertheit unerwünscht sind.

Die Zersetzungsreaktion von „ $[BNH_4]_3$ “ zu „ $[BNH_2]_x$ “ wurde mit unterschiedlichen kalorimetrischen und spektroskopischen Methoden untersucht und charakterisiert. Dabei wurde sowohl die Zersetzung der reinen, festen Substanz, als auch die Zersetzung in Lösung mit Glymen als Lösungsmittel verfolgt. Im Vordergrund stand hierbei besonders die während der Zersetzung auftretenden thermischen Effekte und der Aspekt der Borazinbildung ($B_3N_3H_6$) im Sinne der Reaktionsgleichung:



Es zeigt sich, dass die Zersetzung entgegen den Erwartungen nicht als reine intramolekulare Wasserstoffabspaltung abläuft, sondern ein wesentlich komplizierterer Reaktionsmechanismus vorliegt. So zeigen DSC Messungen sowohl in Lösung, als auch bei der Zersetzung des Feststoffes eine Folge von exothermen Signalen und mittels Massenspektrometrie und ^{11}B NMR konnten Intermediate nachgewiesen werden, die aus einer Spaltung des BN-Ringes resultieren.