

# Was ist Wolframdisulfid?

CTIA GROUP LTD

CTIA GROUP LTD

Weltweit führend in der intelligenten Fertigung für die Wolfram-, Molybdän- und  
Seltenerdmetallindustrie

## COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Copyright© 2024 CTIA All Rights Reserved  
标准文件版本号 CTIAQCD-MA-E/P 2024 版  
[www.ctia.com.cn](http://www.ctia.com.cn)

电话/TEL: 0086 592 512 9696  
CTIAQCD-MA-E/P 2018-2024V  
[sales@chinatungsten.com](mailto:sales@chinatungsten.com)

## EINFÜHRUNG IN DIE CTIA GROUP

CTIA GROUP LTD, eine hundertprozentige Tochtergesellschaft mit unabhängiger Rechtspersönlichkeit, die von CHINATUNGSTEN ONLINE gegründet wurde, widmet sich der Förderung des intelligenten, integrierten und flexiblen Designs und der Herstellung von Wolfram- und Molybdänmaterialien im Zeitalter des industriellen Internets. CHINATUNGSTEN ONLINE, gegründet 1997 mit [www.chinatungsten.com](http://www.chinatungsten.com) als Ausgangspunkt – Chinas erste erstklassige Website für Wolframprodukte – ist das bahnbrechende E-Commerce-Unternehmen des Landes, das sich auf die Wolfram-, Molybdän- und Seltenerdmetallindustrie konzentriert. Mit fast drei Jahrzehnten umfassender Erfahrung in den Bereichen Wolfram und Molybdän erbt die CTIA GROUP die außergewöhnlichen Design- und Fertigungskapazitäten, die hervorragenden Dienstleistungen und den weltweiten Ruf ihrer Muttergesellschaft und wird zu einem umfassenden Anbieter von Anwendungslösungen in den Bereichen Wolframchemikalien, Wolframmetalle, Hartmetalle, Legierungen mit hoher Dichte, Molybdän und Molybdänlegierungen.

In den letzten 30 Jahren hat CHINATUNGSTEN ONLINE mehr als 200 mehrsprachige professionelle Websites für Wolfram und Molybdän eingerichtet, die mehr als 20 Sprachen abdecken und über eine Million Seiten mit Nachrichten, Preisen und Marktanalysen in Bezug auf Wolfram, Molybdän und Seltene Erden enthalten. Seit 2013 hat der offizielle WeChat-Account "CHINATUNGSTEN ONLINE" über 40.000 Informationen veröffentlicht, fast 100.000 Follower bedient und täglich Hunderttausenden von Branchenexperten weltweit kostenlose Informationen zur Verfügung gestellt. Mit kumulativen Besuchen auf seinem Website-Cluster und seinem offiziellen Konto, die Milliarden von Malen erreichen, hat es sich zu einer anerkannten globalen und maßgeblichen Informationsdrehscheibe für die Wolfram-, Molybdän- und Seltenerdmetallindustrie entwickelt, die 24/7 mehrsprachige Nachrichten, Produktleistungen, Marktpreise und Markttrenddienste bietet.

Aufbauend auf der Technologie und Erfahrung von CHINATUNGSTEN ONLINE konzentriert sich die CTIA GROUP darauf, die personalisierten Bedürfnisse der Kunden zu erfüllen. Unter Verwendung der KI-Technologie entwirft und produziert das Unternehmen gemeinsam mit Kunden Wolfram- und Molybdänprodukte mit spezifischen chemischen Zusammensetzungen und physikalischen Eigenschaften (wie Partikelgröße, Dichte, Härte, Festigkeit, Abmessungen und Toleranzen). Das Unternehmen bietet integrierte Dienstleistungen rund um den Prozess, die von der Werkzeugöffnung über die Probeproduktion bis hin zur Endbearbeitung, Verpackung und Logistik reichen. In den letzten 30 Jahren hat CHINATUNGSTEN ONLINE mehr als 130.000 Kunden weltweit F&E-, Design- und Produktionsdienstleistungen für über 500.000 Arten von Wolfram- und Molybdänprodukten erbracht und damit den Grundstein für eine maßgeschneiderte, flexible und intelligente Fertigung gelegt. Auf dieser Grundlage vertieft die CTIA GROUP die intelligente Fertigung und integrierte Innovation von Wolfram- und Molybdänmaterialien im Zeitalter des industriellen Internets.

Dr. Hanns und sein Team bei der CTIA GROUP haben auf der Grundlage ihrer mehr als 30-jährigen Branchenerfahrung auch Wissens-, Technologie-, Wolframpreis- und Markttrendanalysen in Bezug auf Wolfram, Molybdän und Seltene Erden verfasst und veröffentlicht und diese frei mit der Wolframindustrie geteilt. Dr. Han verfügt seit den 1990er Jahren über mehr als 30 Jahre Erfahrung im E-Commerce und internationalen Handel mit Wolfram- und Molybdänprodukten sowie in der Entwicklung und Herstellung von Hartmetallen und hochdichten Legierungen und ist ein anerkannter Experte für Wolfram- und Molybdänprodukte im In- und Ausland. Das Team der CTIA GROUP hält sich an das Prinzip, der Branche professionelle und qualitativ hochwertige Informationen zur Verfügung zu stellen, und verfasst kontinuierlich technische Forschungsarbeiten, Artikel und Branchenberichte, die auf der Produktionspraxis und den Bedürfnissen der Marktkunden basieren und in der Branche weithin gelobt werden. Diese Erfolge sind eine solide Unterstützung für die technologische Innovation, die Produktförderung und den Branchenaustausch der CTIA GROUP und machen sie zu einem führenden Unternehmen bei der Herstellung und Information von Wolfram- und Molybdänprodukten.



### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Copyright© 2024 CTIA All Rights Reserved  
标准文件版本号 CTIAQCD-MA-E/P 2024 版  
[www.ctia.com.cn](http://www.ctia.com.cn)

电话/TEL: 0086 592 512 9696  
CTIAQCD-MA-E/P 2018-2024V  
[sales@chinatungsten.com](mailto:sales@chinatungsten.com)

## INHALT

### Kapitel 1: Definition von Wolframdisulfid

#### 1.1 Grundlegende Definition von Wolframdisulfid

##### 1.1.1 Chemische Zusammensetzung und Summenformel

###### 1.1.1.1 Chemische Bindungseigenschaften von Wolfram und Schwefel

###### 1.1.1.2 Molare Masse

##### 1.1.2 Formen in der Natur

###### 1.1.2.1 Mineralogische Eigenschaften von Wolframit

###### 1.1.2.2 Geologische Verbreitung

##### 1.1.3 Herkunft des Namens und historischer Hintergrund

###### 1.1.3.1 Erste Erkennung und Benennung

###### 1.1.3.2 Beginn industrieller Anwendungen

#### 1.2 Kristallstruktur von Wolframdisulfid

##### 1.2.1 Hexagonaler Schichtaufbau

###### 1.2.1.1 Sandwich-Struktur

###### 1.2.1.2 Gitter-Parameter

###### 1.2.1.3 Unterschiede zwischen Einschicht- und Mehrschichtaufbauten

##### 1.2.2 Atomare Anordnung und Bindungseigenschaften

###### 1.2.2.1 Kovalente Bindungen innerhalb der Schicht

###### 1.2.2.2 Zwischenschicht van der Waals-Kräfte

###### 1.2.2.3 Analyse der Bindungslänge und des Bindungswinkels

##### 1.2.3 Polymorphismus von Wolframdisulfid

###### 1.2.3.1 1T Phase

###### 1.2.3.2 2H-Phase

###### 1.2.3.3 3R-Phase

###### 1.2.3.4 1T'-Phase

##### 1.2.4 Nanoskalige strukturelle Eigenschaften von Wolframdisulfid

###### 1.2.4.1 Oberflächeneffekte und Kantenaktivität

###### 1.2.4.2 Quanteneinschlusseffekte in Single-Layer-WS<sub>2</sub>

###### 1.2.4.3 Anisotropie und Eigenschaften der Interlayer-Exfoliation

### Kapitel 2: Eigenschaften von Wolframdisulfid

#### 2.1 Physikalische Eigenschaften von Wolframdisulfid

##### 2.1.1 Aussehen und Farbe

###### 2.1.1.1 Grauer metallischer Glanz in Pulverform

###### 2.1.1.2 Transparenzschwankungen in Dünnschichtform

##### 2.1.2 Dichte und spezifisches Gewicht

###### 2.1.2.1 Schüttdichte

###### 2.1.2.2 Dichteveränderungen in Nanostrukturen

##### 2.1.3 Thermische Stabilität

###### 2.1.3.1 Schmelzpunkt

###### 2.1.3.2 Zersetzungstemperatur

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

- 2.1.3.3 Thermischer Ausdehnungskoeffizient
- 2.1.4 Reibungskoeffizient und Schmierleistung
  - 2.1.4.1 Niedriger Reibungskoeffizient
  - 2.1.4.2 Reibungsstabilität unter Temperatur und Druck
  - 2.1.4.3 Einfluss der Gleitgeschwindigkeit auf die Reibung
- 2.1.5 Härte und mechanische Festigkeit
  - 2.1.5.1 Mohs-Härte
  - 2.1.5.2 Druckfestigkeit
  - 2.1.5.3 Scherfestigkeit und Verschleißfestigkeit
- 2.2 Chemische Eigenschaften von Wolframdisulfid
  - 2.2.1 Löslichkeit
    - 2.2.1.1 Unlöslich in Wasser, Alkohol und verdünnten Säuren
    - 2.2.1.2 Löslich in Königswasser und geschmolzenem Alkali
    - 2.2.1.3 Analyse der Löslichkeitsprüfung
  - 2.2.2 Oxidations-Reduktions-Verhalten
    - 2.2.2.1 Reaktionsmechanismus der Hochtemperaturoxidation zu  $WO_3$
    - 2.2.2.2 Stabilität unter reduzierenden Bedingungen
    - 2.2.2.3 Oxidationsbeginn, Temperatur und Umwelteinwirkung
  - 2.2.3 Korrosionsbeständigkeit und chemische Inertheit
    - 2.2.3.1 Verhalten in saurer Umgebung
    - 2.2.3.2 Stabilität in alkalischer Umgebung
    - 2.2.3.3 Anwendungen in der chemischen Korrosionsbeständigkeit
  - 2.2.4 Chemische Reaktionen bei hohen Temperaturen
    - 2.2.4.1 Reaktionskinetik mit Sauerstoff
    - 2.2.4.2 Wechselwirkungen mit Sulfiden
    - 2.2.4.3 Analyse von Hochtemperatur-Zersetzungsprodukten
- 2.3 Elektrische und optische Eigenschaften von Wolframdisulfid
  - 2.3.1 Leitfähigkeit und Halbleitereigenschaften
    - 2.3.1.1 Indirekte Bandlücke von Schüttgut
    - 2.3.1.2 Direkte Bandlücke einer einzelnen Schicht
    - 2.3.1.3 Trägermobilität und Dopingeffekte
  - 2.3.2 Eigenschaften der Bandlücke
    - 2.3.2.1 Übergang zwischen Single-Layer- und Multi-Layer-Bandlücken
    - 2.3.2.2 Temperatureffekte auf die Bandlücke
    - 2.3.2.3 Anwendungspotenzial von Bandgap Engineering
  - 2.3.3 Optische Absorptions- und Reflexionseigenschaften
    - 2.3.3.1 Absorptionsraten im sichtbaren und infraroten Licht
    - 2.3.3.2 Reflexionsvermögen und Brechungsindex
    - 2.3.3.3 Eigenschaften der Photolumineszenz

## Kapitel 3: Klassifizierung von Wolframdisulfid

### 3.1 Klassifizierung nach Morphologie

#### 3.1.1 Wolframdisulfid in Pulverform

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

- 3.1.1.1 Mikrometergroßes Pulver
- 3.1.1.2 Ultrafeines Pulver
- 3.1.2 Wolframdisulfid-Nanoblätter
  - 3.1.2.1 Einschichtige Nanoblätter
  - 3.1.2.2 Mehrschichtige Nanoblätter
- 3.1.3 Wolframdisulfid-Beschichtungen
  - 3.1.3.1 Trockenfilm-Schmierbeschichtungen
  - 3.1.3.2 Verbundstoff-Beschichtungen
- 3.1.4 Wolframdisulfid in großen Mengen
  - 3.1.4.1 Natürlicher Wolframit
  - 3.1.4.2 Synthetische Kristalle
- 3.1.5 Wolframdisulfid-Nanodrähte
  - 3.1.5.1 Eindimensionale Struktureigenschaften
  - 3.1.5.2 Synthesemethoden
- 3.1.6 Wolframdisulfid-Quantenpunkte
  - 3.1.6.1 Nulldimensionale strukturelle Eigenschaften
  - 3.1.6.2 Optische und elektrische Vorteile
- 3.2 Klassifizierung nach Kristallstruktur
  - 3.2.1 1T-Phase
    - 3.2.1.1 Strukturelle Eigenschaften
    - 3.2.1.2 Stabilität und Übergangsbedingungen
  - 3.2.2 2H-Phase
    - 3.2.2.1 Strukturelle Eigenschaften
    - 3.2.2.2 Anteil in industriellen Anwendungen
  - 3.2.3 3R-Phase
    - 3.2.3.1 Strukturelle Eigenschaften
    - 3.2.3.2 Seltenheit und Forschungswert
  - 3.2.4 1T'-Phase
    - 3.2.4.1 Verzerrte strukturelle Eigenschaften
    - 3.2.4.2 Topologische Eigenschaften
- 3.3 Klassifizierung nach Reinheit und Anwendung
  - 3.3.1 Wolframdisulfid in Industriequalität
    - 3.3.1.1 Reinheitsbereich
    - 3.3.1.2 Allgemeine Anwendungen
  - 3.3.2 Hochreines Wolframdisulfid
    - 3.3.1.1 Reinheit
    - 3.3.1.2 Anwendungen in der Elektronik und Katalyse
  - 3.3.3 Wolframdisulfid für Verbundwerkstoffe
    - 3.3.3.1 Schmierstoffe von Verbundwerkstoffen
    - 3.3.3.2 Verstärkungsmaterialien
  - 3.3.4 Wolframdisulfid in Laborforschungsqualität
    - 3.3.4.1 Hochreine Nanoskala
    - 3.3.4.2 Kundenspezifische Anforderungen

COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 3.4 Klassifizierung nach Partikelgröße

#### 3.4.1 Wolframdisulfid in Mikrometergröße

##### 3.4.1.1 Größenbereich

##### 3.4.1.2 Anwendungsszenarien

#### 3.4.2 Nanoskaliges Wolframdisulfid

##### 3.4.2.1 Größenbereich

##### 3.4.2.2 Vorteile von Nanoeffekten

#### 3.4.3 Ultrafeines Wolframdisulfid

##### 3.4.3.1 Größe

##### 3.4.3.2 Spezialisierte Anwendungen

#### 3.4.4 Submikron Wolframdisulfid

##### 3.4.4.1 Größenbereich

##### 3.4.4.2 Übergangsmerkmale

#### 3.4.5 Subnanoskaliges Wolframdisulfid

##### 3.4.5.1 Größenbereich

##### 3.4.5.2 Quanteneffekte

## Kapitel 4: Herstellungsverfahren von Wolframdisulfid

### 4.1 Traditionelle Produktionsmethoden

#### 4.1.1 Methode der Kalzinierungszerlegung

##### 4.1.1.1 Auswahl der Rohstoffe

##### 4.1.1.2 Sulfidierungsreaktion

##### 4.1.1.3 Hochtemperatur-Kalzination

##### 4.1.1.4 Behandlung von Nebenprodukten

##### 4.1.1.5 Vorteile

##### 4.1.1.6 Nachteile

##### 4.1.1.7 Anwendungsszenarien

#### 4.1.2 Wolframtrisulfid-Sublimationsverfahren

##### 4.1.2.1 Vorbereitung von $WS_3$

##### 4.1.2.2 Sublimationsbedingungen

##### 4.1.2.3 Entfernung von überschüssigem Schwefel

##### 4.1.2.4 Vorteile

##### 4.1.2.5 Nachteile

##### 4.1.2.6 Anwendungsszenarien

### 4.2 Moderne Synthesemethoden

#### 4.2.1 Verfahren der chemischen Gasphasenabscheidung

##### 4.2.1.1 Auswahl von Vorläufern

##### 4.2.1.2 Bedingungen für die Hinterlegung

##### 4.2.1.3 Kontrolle der Schichtdicke

##### 4.2.1.4 Vorteile

##### 4.2.1.5 Nachteile

##### 4.2.1.6 Anwendungsszenarien

#### 4.2.2 Hydrothermales/Solvothermes Verfahren

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

- 4.2.2.1 Rohstoffe
- 4.2.2.2 Reaktionsbedingungen
- 4.2.2.3 Kontrolle der Morphologie
- 4.2.2.4 Vorteile
- 4.2.2.5 Nachteile
- 4.2.2.6 Anwendungsszenarien
- 4.2.3 Mechanisches Exfoliationsverfahren
  - 4.2.3.1 Peeling-Rohstoffe
  - 4.2.3.2 Ablauf
  - 4.2.3.3 Ausbeute und Reinheit
  - 4.2.3.4 Vorteile
  - 4.2.3.5 Nachteile
  - 4.2.3.6 Anwendungsszenarien
- 4.3 Optimierung der Wolframdisulfid-Produktionstechnologie
  - 4.3.1 Techniken zur Reinheitsverbesserung
    - 4.3.1.1 Entfernung von Verunreinigungen
    - 4.3.1.2 Nachbehandlungsverfahren
  - 4.3.2 Kontrolle der Partikelgröße
    - 4.3.2.1 Mahlen und Sieben
    - 4.3.2.2 Nanonisierungstechniken
  - 4.3.3 Umweltmaßnahmen
    - 4.3.3.1 Begrenzung der Sulfidemissionen
    - 4.3.3.2 Abwasserbehandlung
- 4.4 Produktionskosten und -effizienz
  - 4.4.1 Analyse der Rohstoffkosten
    - 4.4.1.1 Preise für Wolframquellen
    - 4.4.1.2 Kosten für die Schwefelquelle
  - 4.4.2 Energieverbrauch und Anforderungen an die Ausrüstung
    - 4.4.2.1 Hochtemperatur-Geräte
    - 4.4.2.2 Optimierung des Energieverbrauchs
  - 4.4.3 Ökonomie der Großproduktion
    - 4.4.3.1 Vorteile der Serienproduktion
    - 4.4.3.2 Strategien zur Kostensenkung

## **Kapitel 5: Anwendungen von Wolframdisulfid**

- 5.1 Anwendungen in der Schmierung
  - 5.1.1 Festschmierstoffe
    - 5.1.1.1 Umgebungen mit hohen Temperaturen
      - 5.1.1.1.1 Industrielle Hochtemperaturgeräte
      - 5.1.1.1.2 Komponenten des Motors
    - 5.1.1.2 Vakuum-Umgebungen
      - 5.1.1.2.1 Gleitende Bauteile von Raumfahrzeugen
      - 5.1.1.2.2 Vakuumpumpen

### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

- 5.1.1.3 Hochdruckbedingungen
  - 5.1.1.3.1 Schwere Maschinen
  - 5.1.1.3.2 Hydraulische Systeme
- 5.1.2 Beschichtungsanwendungen
  - 5.1.2.1 Mechanische Komponenten
    - 5.1.2.1.1 Lager
    - 5.1.2.1.2 Zahnräder
  - 5.1.2.2 Werkzeuge und Matrizen
    - 5.1.2.2.1 Stanzformen
    - 5.1.2.2.2 Schneidwerkzeuge
  - 5.1.2.3 Sprühverfahren
    - 5.1.2.3.1 Trockenfilm-Sprühen
    - 5.1.2.3.2 Plasmaspritzen
- 5.1.3 Verbundwerkstoffe
  - 5.1.3.1 Fettgemischte Schmierstoffe
    - 5.1.3.1.1 Kfz-Fett
    - 5.1.3.1.2 Industriefett
  - 5.1.3.2 Selbstschmierende Polymere
    - 5.1.3.2.1 Technische Kunststoffe
    - 5.1.3.2.2 Dichtungen
- 5.2 Anwendungen in der Katalyse
  - 5.2.1 Petrochemische Katalysatoren
    - 5.2.1.1 Hydroentschwefelung
      - 5.2.1.1.1 Entschwefelung von Diesel
      - 5.2.1.1.2 Reinigung von Benzin
    - 5.2.1.2 Hydrodenitrogenisierung
      - 5.2.1.2.1 Verarbeitung von Heizöl
      - 5.2.1.2.2 Starkes Cracken von Öl
    - 5.2.1.3 Reformierende Reaktionen
      - 5.2.1.3.1 Herstellung von Aromen
      - 5.2.1.3.2 Verbesserung der Oktanzahl
  - 5.2.2 Photokatalyse und Elektrokatalyse
    - 5.2.2.1 Abbau organischer Schadstoffe
      - 5.2.2.1.1 Abwasserbehandlung
      - 5.2.2.1.2 Luftreinigung
    - 5.2.2.2 Reaktion der Wasserstoffentwicklung
      - 5.2.2.2.1 Wasserelektrolyse für Wasserstoff
      - 5.2.2.2.2 Herstellung von Wasserstoffkraftstoffen
    - 5.2.2.3 Reaktion der Sauerstoffentwicklung
      - 5.2.2.3.1 Wasserelektrolyse für Sauerstoff
      - 5.2.2.3.2 Katalyse der Wasseroxidation
  - 5.2.3 Nicht unterstützte Katalysatoreigenschaften
    - 5.2.3.1 Hohe aktive Oberfläche

COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

- 5.2.3.1.1 Nanoskalige aktive Zentren
- 5.2.3.1.2 Erhöhter katalytischer Wirkungsgrad
- 5.2.3.2 Design mit langer Lebensdauer
  - 5.2.3.2.1 Stabilität bei hohen Temperaturen
  - 5.2.3.2.2 Vergiftungsresistenz
- 5.3 Anwendungen in der Elektronik
  - 5.3.1 Halbleiterbauelemente
    - 5.3.1.1 Feldeffekt-Transistoren
      - 5.3.1.1.1 Hochleistungs-Chips
      - 5.3.1.1.2 Geräte mit geringem Stromverbrauch
    - 5.3.1.2 Photodetektoren
      - 5.3.1.2.1 Infrarot-Sensoren
      - 5.3.1.2.2 Detektion von sichtbarem Licht
    - 5.3.1.3 Flexible Elektronik
      - 5.3.1.3.1 Tragbare Geräte
      - 5.3.1.3.2 Flexible Displays
  - 5.4 Anwendungen im Energiebereich
    - 5.4.1 Energiespeicher-Materialien
      - 5.4.1.1 Lithium-Ionen-Batterie-Anoden
        - 5.4.1.1.1 Batterien mit hoher Kapazität
        - 5.4.1.1.2 Schnellladetechnik
      - 5.4.1.2 Natrium-Ionen-Batterien
        - 5.4.1.2.1 Kostengünstige Energiespeicherung
        - 5.4.1.2.2 Großtechnische Anwendungen
      - 5.4.1.3 Superkondensatoren
        - 5.4.1.3.1 Hohe Leistungsdichte
        - 5.4.1.3.2 Schnelles Laden und Entladen
    - 5.4.2 Energieumwandlung
      - 5.4.2.1 Sensibilisatoren für Solarzellen
        - 5.4.2.1.1 Farbstoffsensibilisierte Solarzellen
        - 5.4.2.1.2 Verbesserter Wirkungsgrad der photoelektrischen Umwandlung
      - 5.4.2.2 Brennstoffzellen-Elektroden
        - 5.4.2.2.1 Wasserstoff-Brennstoffzellen
        - 5.4.2.2.2 Reaktion zur Sauerstoffreduktion
      - 5.4.2.3 Thermoelektrische Werkstoffe
        - 5.4.2.3.1 Erzeugung von Abwärme
        - 5.4.2.3.2 Thermoelektrische Stromerzeugung
  - 5.5 Anwendungen in anderen Bereichen
    - 5.5.1 Luft- und Raumfahrt
      - 5.5.1.1 NASA-zertifizierte Schmierstoffe
        - 5.5.1.1.1 Kritische Bestandteile von Raumfahrzeugen
        - 5.5.1.1.2 Ausrüstung der Raumstation
      - 5.5.1.2 Militärische verschleißfeste Bauteile

**COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT**

- 5.5.1.2.1 Bewaffnung
- 5.5.1.2.2 Gepanzerte Fahrzeuge
- 5.5.1.3 Satelliten-Mechanismen
  - 5.5.1.3.1 Antriebe für Solarmodule
  - 5.5.1.3.2 Positionierung der Antenne
- 5.5.2 Nanotechnologie
  - 5.5.2.1 Chemische Sensoren
    - 5.5.2.1.1 Gaswarngeräte
    - 5.5.2.1.2 Umweltüberwachung
  - 5.5.2.2 Bioimaging-Sonden
    - 5.5.2.2.1 Fluoreszierende Markierung
    - 5.5.2.2.2 Zelluläre Bildgebung
  - 5.5.2.3 Träger von Arzneimitteln
    - 5.5.2.3.1 Gezielte Verabreichung von Arzneimitteln
    - 5.5.2.3.2 Design der Nanomedizin
- 5.5.3 Supraleitung und topologische Materialforschung
  - 5.5.3.1 Supraleitende Sprungtemperatur
    - 5.5.3.1.1 Prüfung der Supraleitung bei niedrigen Temperaturen
    - 5.5.3.1.2 Hochtemperatur-Supraleitungspotential
  - 5.5.3.2 Topologisches Isolatorpotential
    - 5.5.3.2.1 Quantencomputing
    - 5.5.3.2.2 Spintronik

## Kapitel 6: Anwendungsaussichten von Wolframdisulfid

- 6.1 Überblick über die globale Marktnachfrage
  - 6.1.1 Marktanteil der Schmierung
    - 6.1.1.1 Bedarf an industrieller Schmierung
    - 6.1.1.2 Wachstum der Automobilindustrie
  - 6.1.2 Wachstum des Elektroniksektors
    - 6.1.2.1 Halbleitermarkt
    - 6.1.2.2 Aufstrebende elektronische Produkte
- 6.2 Ausblick auf neu entstehende Anwendungsfelder
  - 6.2.1 Grüne Energie
    - 6.2.1.1 Anlagen für erneuerbare Energien
    - 6.2.1.2 Ziele der Klimaneutralität
  - 6.2.2 Intelligente Materialien
    - 6.2.2.1 Adaptive Materialien
    - 6.2.2.2 Intelligente Fertigung

## Kapitel 7: Umweltauswirkungen der Herstellung und Anwendung von Wolframdisulfid

- 7.1 Umweltauswirkungen von Produktionsprozessen
  - 7.1.1 Abgasemissionen

### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

- 7.1.2 Verschmutzung durch Abwasser
- 7.1.3 Feste Abfälle
- 7.1.4 Energieverbrauch und CO<sub>2</sub>-Fußabdruck
- 7.1.5 Mögliche ökologische und gesundheitliche Risiken
- 7.2 Umweltauswirkungen von Anwendungsprozessen
  - 7.2.1 Abfallemissionen
  - 7.2.2 Ausbreitung der Partikel
  - 7.2.3 Lebenszyklus-Management
  - 7.2.4 Mögliche ökologische und gesundheitliche Risiken
  - 7.2.5 Variationsanalyse von Anwendungsszenarien
- 7.3 Umweltmaßnahmen und -strategien
  - 7.3.1 Abgasreinigung
  - 7.3.2 Abwasserbehandlung
  - 7.3.3 Verwertung fester Abfälle
  - 7.3.4 Partikel-Kontrolle
  - 7.3.5 Grüne Prozessoptimierung
  - 7.3.6 Politische und regulatorische Unterstützung

## **Kapitel 8: Lieferanten von Wolframdisulfid**

- 8.1 Verifizierter Lieferant - CTIA GROUP LTD Co., Ltd.

### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

## Kapitel 1: Definition von Wolframdisulfid

Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) ist ein bedeutendes Übergangsmetall-Dichalkogenid (TMD), das für seine einzigartige chemische Zusammensetzung, Kristallstruktur und Multifunktionalität bekannt ist, was es zu einem wichtigen Akteur in der industriellen Produktion und wissenschaftlichen Forschung macht.

Als Schichtverbindung weist WS<sub>2</sub> eine außergewöhnliche Leistung in Anwendungen wie Schmiermitteln, elektronischen Geräten und Katalysatoren auf, wobei seine Eigenschaften auf die chemische Bindung zwischen Wolfram und Schwefel, sein natürliches Vorkommen und seine historische Entwicklung zurückzuführen sind. In diesem Abschnitt wird seine Definition aus drei Perspektiven – chemische Zusammensetzung, natürliche Form und historischer Hintergrund – umfassend untersucht und sein Wesen und seine Bedeutung in der modernen Technologie aufgezeigt.

### 1.1 Grundlegende Definition von Wolframdisulfid

Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) ist eine Verbindung, die sich aus Wolframmetall (W) und Schwefel (S) im Verhältnis 1:2 zusammensetzt, mit der Summenformel WS<sub>2</sub>. Als typisches zweidimensionales Material verfügt es aufgrund seiner Schichtstruktur über einen niedrigen Reibungskoeffizienten, eine hohe thermische Stabilität und einstellbare elektronische Eigenschaften, was es in zahlreichen Bereichen sehr wertvoll macht.

Dieser Unterabschnitt befasst sich mit seiner chemischen Zusammensetzung, seinem natürlichen Vorkommen und den Ursprüngen seines Namens und seinem historischen Kontext und legt den Grundstein für spätere Diskussionen über seine Eigenschaften.

#### 1.1.1 Chemische Zusammensetzung und Summenformel

Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) ist eine binäre Verbindung, die aus einem Wolframatom besteht, das chemisch an zwei Schwefelatome gebunden ist. Diese einfache, aber stabile Zusammensetzung reiht es neben Molybdändisulfid (MoS<sub>2</sub>) in die Familie der Übergangsmetall-Dichalkogenide ein, aber seine hohe Atommasse von Wolfram und seine charakteristische elektronische Struktur zeichnen es in Bezug auf physikalische und chemische Eigenschaften aus.

WS <sub>2</sub> 含量 (%min)				99.9				
杂质	Al	Fe	Ca	Mg	Cu	Mn	Na	Co
%WT	0.003	0.001	0.002	0.002	0.002	0.001	0.001	0.001
杂质	Ni	Si	Pb	K	N	C	O	/
%WT	0.001	0.002	0.001	0.001	0.001	0.001	0.004	/
颗粒度	1~20um(D50)之间的颗粒度可以根据客户要求定制生产							

#### Chemische Zusammensetzung von Wolframdisulfid

##### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 1.1.1.1 Chemische Bindungseigenschaften von Wolfram und Schwefel

Die chemischen Bindungen innerhalb von WS<sub>2</sub> sind innerhalb jeder Schicht überwiegend kovalent, wobei Wolframatome eine stabile S-W-S-Sandwichstruktur mit Schwefelatomen bilden. Je nach Kristallphase variiert die Koordination von Wolfram: In der 2H-Phase (hexagonales System) nimmt Wolfram eine trigonale prismatische Koordination mit sechs Schwefelatomen ein, während es in der 1T-Phase (tetragonales System) eine oktaedrische Koordination annimmt. Die W-S-Bindungslänge beträgt etwa 2,41 Å, ein Wert, der durch Röntgenbeugung (XRD) und Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) genau bestimmt wird und die stark kovalente Natur der Bindung widerspiegelt. Wolfram hat eine Elektronegativität von 2,36, während Schwefel 2,58 hat, was zu einer Differenz von 0,22 führt, was darauf hindeutet, dass die W-S-Bindung eine leichte Polarität aufweist. Diese Polarität macht WS<sub>2</sub> in oxidierenden Umgebungen (z. B. Hochtemperaturluft) reaktiv, wo es mit Sauerstoff zu Wolframtrioxid (WO<sub>3</sub>) reagiert, wie in der folgenden Reaktion gezeigt:  $2WS_2 + 7O_2 \rightarrow 2WO_3 + 4SO_2 \uparrow$



CTIA GROUP LTD Wolframdisulfid

Die Bindungsenergie der kovalenten W-S-Bindungen innerhalb der Schicht beträgt ca. 400-500 kJ/mol und ist damit deutlich höher als die Van-der-Waals-Kräfte zwischen den Schichten (ca. 50-70 meV/Atom). Dieser erhebliche Unterschied in der Haftfestigkeit liegt dem niedrigen Reibungskoeffizienten von WS<sub>2</sub> zugrunde, da die schwachen Zwischenschichtkräfte ein Gleiten ermöglichen, was ihn zu einem hervorragenden Festschmierstoff macht. Im Vergleich zu MoS<sub>2</sub> (Mo-S-Bindungsenergie von 350-450 kJ/mol) ist die W-S-Bindung in WS<sub>2</sub> aufgrund der höheren Ordnungszahl (74 vs. 42) und der größeren Elektronenwolken-dichte von Wolfram stärker, was seine thermische Stabilität verbessert. Zum Beispiel bleibt WS<sub>2</sub> an der Luft bis zu 650 °C stabil, während

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

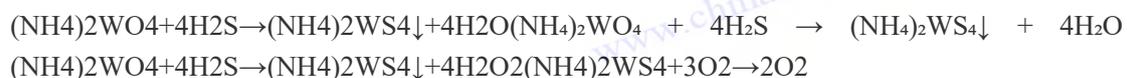
MoS<sub>2</sub> bei etwa 500 °C zu oxidieren beginnt. Darüber hinaus bildet die Überlappung der 5d-Orbitale von Wolfram mit den 3p-Orbitalen von Schwefel die elektronische Struktur, die seine Halbleitereigenschaften bestimmt, die bei einschichtigem WS<sub>2</sub> besonders ausgeprägt sind (siehe 1.2.4.2). Diese chemische Bindungseigenschaft unterstützt nicht nur die mechanische Stabilität von WS<sub>2</sub>, sondern ermöglicht auch eine außergewöhnliche Leistung in Hochdruckumgebungen, wie z. B. in der Luft- und Raumfahrt.

Weitere Analysen zeigen, dass die geringe Polarität der W-S-Bindung WS<sub>2</sub> empfindlich gegenüber Oxidationsmitteln macht, aber in neutralen oder reduzierenden Umgebungen (z. B. H<sub>2</sub>-Atmosphäre) sehr stabil ist. Diese Verklebungsstabilität zeigt sich auch in der Scherfestigkeit, wobei die Intralayer-Struktur bei Drücken bis zu 1 GPa intakt bleibt. Quantenchemische Berechnungen (Dichtefunktionaltheorie, DFT) zeigen, dass die Elektronendichteverteilung der W-S-Bindung einen starken kovalenten Charakter aufweist, wobei die einsamen Elektronenpaare des Schwefels wesentlich zur Bindungsstärke beitragen. Diese Bindungseigenschaft beeinflusst auch die chemische Reaktivität von WS<sub>2</sub> und zeigt eine hohe Inertheit in sauren Umgebungen (z. B. H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>), aber eine Löslichkeit in starken Oxidationsmitteln (z. B. Königswasser), wodurch [Wolframsäure entsteht](#). Diese Eigenschaften bilden eine theoretische Grundlage für seine Anwendungen in der Schmierung, Katalyse und darüber hinaus.

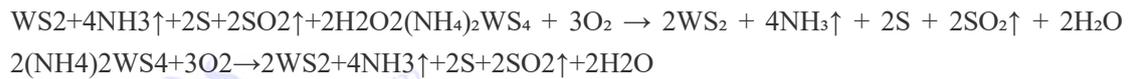
### 1.1.1.2 Molare Masse

Die Molmasse von WS<sub>2</sub> beträgt 247,98 g/mol, berechnet wie folgt: Wolfram (183,84 g/mol) + zwei Schwefelatome (2 × 32,07 g/mol = 64,14 g/mol). Dieser Wert, der durch hochpräzise Massenspektrometrie verifiziert wird, ist von grundlegender Bedeutung für das Verständnis seiner Dichte, seines thermischen Verhaltens und seiner stöchiometrischen Eigenschaften. Im Vergleich zu MoS<sub>2</sub> (160,07 g/mol) ist die molare Masse von WS<sub>2</sub> aufgrund der größeren Atommasse von Wolfram (183,84 u vs. 95,95 u) signifikant höher, was zu einer Dichte von 7,5 g/cm<sup>3</sup> führt, was die 4,9 g/cm<sup>3</sup> von MoS<sub>2</sub> übertrifft. Diese hohe Dichte macht WS<sub>2</sub> vielversprechend für [Strahlenschutzmaterialien](#), da schwere Atome Röntgen- und Gammastrahlen effektiv absorbieren und eine leichtere Alternative zu [Wolfram-Kupfer bieten](#).

Die molare Masse hat einen tiefgreifenden Einfluss auf die thermischen Eigenschaften von WS<sub>2</sub>. Die schweren Wolframatome reduzieren die Schwingungsfrequenzen des Gitters, senken die Phononschwingungsenergie und erhöhen den Schmelzpunkt im Vakuum auf etwa 1250 °C und übertreffen damit die 1185 °C von MoS<sub>2</sub>. Diese Eigenschaft, die durch die differentielle thermische Analyse (DTA) bestätigt wurde, zeigt, dass WS<sub>2</sub> die strukturelle Integrität in inerten Atmosphären (z. B. Stickstoff oder Argon) bis zu 1250 °C beibehält, bevor es sich zersetzt. In der Produktion ist die Molmasse ein kritischer Parameter für die Berechnung von Reaktantenverhältnissen, wie z. B. bei der Röstzersetzungsmethode, bei der [Ammoniummetawolframat](#) ((NH<sub>4</sub>)<sub>6</sub>H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>) mit Schwefelwasserstoff (H<sub>2</sub>S) mit präziser molaren Stöchiometrie reagiert, um ein hochreines WS<sub>2</sub> zu gewährleisten:



#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT



Die hohe Molmasse wirkt sich auch auf den Gewichtsanteil von  $\text{WS}_2$  in Kompositen aus. Wenn beispielsweise mit Wolframkunststoff gemischt wird, um selbstschmierende Materialien herzustellen, muss die Menge an  $\text{WS}_2$  auf der Grundlage seiner molaren Masse von 247,98 g/mol angepasst werden, um die Dichte und Schmierleistung zu optimieren. Im Gegensatz dazu hat Wolframpulver (183,84 g/mol), das keinen Schwefel enthält, eine geringere Molmasse und trägt ohne Schmierung in Verbundwerkstoffen nur zur Dichte bei. Darüber hinaus verbessert die hohe Molmasse von  $\text{WS}_2$  seinen Nutzen in Wolframgranulat für Gegengewichte und bietet eine größere Masse bei kleinerem Volumen, ideal für das Auswuchten von Präzisionsinstrumenten.

Aus thermodynamischer Sicht korreliert die molare Masse mit der spezifischen Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit von  $\text{WS}_2$ . Die schweren Wolframatome verringern die spezifische Wärmekapazität (ca. 0,14 J/g·K bei 25 °C), was bedeutet, dass weniger Energie benötigt wird, um die Temperatur zu erhöhen, wodurch es für das Hochtemperatur-Wärmemanagement geeignet ist. Die thermogravimetrische Analyse (TGA) zeigt, dass der Massenverlust von  $\text{WS}_2$  in der Luft bei 510 °C (Oxidationsbeginn) beginnt, während seine Stabilität im Vakuum seinen Wert in der Luft- und Raumfahrt erhöht. Diese Eigenschaften stehen im Einklang mit den Trends auf dem Wolframmarkt, wo thermisch stabile Materialien mit hoher Dichte in der Luft- und Raumfahrt sowie im Energiesektor geschätzt werden.

## 1.1.2 Natürliches Vorkommen

Wolframdisulfid kommt in der Natur als Mineral Wolframit vor, obwohl seine Seltenheit in starkem Kontrast zu den häufiger vorkommenden Wolframmineralien wie schwarzem Wolframerz (Wolframit) und weißem Wolframerz (Scheelit) steht. In diesem Unterabschnitt werden die mineralogischen Eigenschaften und die geologische Verteilung von Wolframit eingehend untersucht und Aufschluss über seine natürliche Form und seinen Einfluss auf die Entwicklung synthetischer  $\text{WS}_2$  gegeben.

### 1.1.2.1 Mineralogische Eigenschaften von Wolframit

Wolframit ist ein grau-schwarzes Mineral mit metallischem Glanz, das typischerweise in mikrokristalliner oder massiver Form in hydrothermalen Erzgängen neben Quarz, Pyrit und Calcit vorkommt. Seine Mohs-Härte reicht von 1 bis 1,5 und ist damit weit niedriger als die von Wolframmetall (ca. 7,5), eine Weichheit, die auf seine Schichtstruktur zurückzuführen ist, bei der die S-W-S-Schichten durch schwache van-der-Waals-Kräfte zusammengehalten werden, was die Spaltung entlang der Basalebene erleichtert. Die Polarisationslichtmikroskopie zeigt Kristallkorngrößen von wenigen Mikrometern bis zu mehreren Millimetern, wobei eine schuppige Oberfläche eine ausgeprägte Doppelbrechung aufweist. Sein spezifisches Gewicht beträgt etwa 7,5, was mit synthetischem  $\text{WS}_2$  übereinstimmt, was die hohe Atommasse von Wolfram (183,84 u) direkt widerspiegelt. Die Farbe und der Glanz des Wolframs unterscheiden ihn von dem tiefschwarzen

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Wolframerz ( $\text{FeMnWO}_4$ ) und dem weißen oder hellgelbweißen Wolframerz ( $\text{CaWO}_4$ ) und sind aufgrund seiner Weichheit für die direkte Wolframmetallgewinnung ungeeignet, dienen aber als natürlicher Prototyp für synthetisches  $\text{WS}_2$ .

Chemisch gesehen entspricht Wolframit  $\text{WS}_2$ , enthält aber oft Spurenverunreinigungen wie Eisen (Fe), Silizium (Si) und Sauerstoff (O), typischerweise weniger als 1 %, die mittels Elektronensondenmikroanalyse (EPMA) nachgewiesen werden. Diese Verunreinigungen, die wahrscheinlich aus verwandten Mineralien oder geologischen Entstehungsprozessen stammen, haben nur minimale Auswirkungen auf die Schichtstruktur. Die Rasterelektronenmikroskopie (REM) zeigt eine Schichtdicke von ca. 0,62 nm, identisch mit synthetischem  $\text{WS}_2$ , was die hohe Ähnlichkeit zwischen seiner natürlichen und künstlichen Struktur bestätigt. Diese geschichtete Eigenschaft hat tribologische Studien inspiriert, wobei frühe Wissenschaftler die Hypothese aufstellten, dass sein Schmierpotenzial auf der Gleitfähigkeit von Wolframenit basiert. Darüber hinaus zeigen die mineralogischen Eigenschaften von Wolframenit seine Entstehungsbedingungen – typischerweise in schwefelreichen hydrothermalen Hochdruckumgebungen, die mit Sulfidlagerstätten in Verbindung stehen.

Aus mineralogischer Sicht wird Wolframenit aufgrund seiner geringen Härte und hohen Dichte in der Natur leicht übersehen, aber seine charakteristische S-W-S-Schichtstruktur bietet eine natürliche Vorlage für synthetisches  $\text{WS}_2$ . In der Wolframforschung werden beispielsweise Wolframproben häufig verwendet, um die strukturelle Konsistenz von synthetischem  $\text{WS}_2$  zu validieren, indem der (002) Peak (entsprechend dem Zwischenlagenabstand) mittels XRD verglichen wird, um die Synthesegenauigkeit sicherzustellen. Die Weichheit von Wolframenit deutet auch auf sein Peeling-Potenzial hin, eine Eigenschaft, die später durch mechanische Peeling-Techniken zur Herstellung von einschichtigen  $\text{WS}_2$ -Nanoblättern genutzt wurde.

### 1.1.2.2 Geologische Verbreitung

Wolframenit ist weltweit spärlich verteilt, mit wichtigen Lagerstätten in Ganzhou, Provinz Jiangxi, China; der Kaukasusregion in Russland; Queensland, Australien; Potosí, Bolivien; und Nevada, USA. China dominiert mit über 80 % der Produktion die weltweiten Wolframressourcen, wobei Ganzhou für Wolframprodukte bekannt ist. Wolframit stellt in diesen Regionen jedoch nur einen geringen Teil dar, der von schwarzem Wolframerz und weißem Wolframerz überschattet wird. In Ganzhou wird Wolframit häufig in hydrothermalen Adern in der Nähe von Granitintrusionen gefunden, die in schwefelreichen geologischen Umgebungen gebildet wurden. Geologische Untersuchungen schätzen die Reserven auf weniger als 1 % der weltweiten Wolframressourcen, wobei die Herausforderungen bei der Gewinnung und die Kosten die von Oxiderzen übersteigen. So liefert beispielsweise eine Lagerstätte in Ganzhou Wolframgehalte von nur 0,1 bis 0,3 %  $\text{WO}_3$ , verglichen mit 1 bis 2 % für schwarzes Wolframerz, was letzteres weitaus wirtschaftlicher macht.

An anderer Stelle ist die Wolframitverteilung an spezifische geologische Bedingungen gebunden. Im russischen Kaukasus wird es mit vulkanischer Aktivität in Verbindung gebracht, die oft zusammen mit Kupfersulfiden auftritt; Queensland, Australien, weist Ablagerungen in alten

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

metamorphen Zonen auf; Potosí, Bolivien, verdankt seinen Wolframit hydrothermalen Systemen in großer Höhe, die reich an Sulfiden sind; und Nevada, USA, bringt es mit tektonischer Aktivität aus dem Mesozoikum in Verbindung, gelegentlich mit geringerem Gold. Diese Muster deuten darauf hin, dass die Wolframitbildung hohe Temperaturen, Drücke und Sulfidanreicherung erfordert, was zu seiner Knappheit beiträgt und die Abhängigkeit der Industrie von synthetischem  $WS_2$  erhöht. Bei der Synthese werden Rohstoffe wie [Wolframsäure](#) oder [Ammoniumparawolframat verwendet, um die Reaktionsbedingungen zu steuern](#), um hochreines  $WS_2$  herzustellen und die begrenzten Reserven von Wolframenit zu überwinden.

Weltweit begrenzt die Seltenheit von Wolfram den Wert des kommerziellen Abbaus, aber seine Verbreitung bietet wichtige Einblicke in die Wolframmineralisierung. Zum Beispiel verfolgt die Isotopenanalyse den Schwefel des Ganzhou-Wolframenits bis in tiefe Mantelquellen, was mit den lokalen Zeitlinien der Granitintrusion übereinstimmt. Solche Studien vertiefen unser Verständnis des geologischen Kontextes von  $WS_2$  und tragen zur Anhäufung von [Wolframwissen bei](#).

### 1.1.3 Namensherkunft und historischer Hintergrund

Die Nomenklatur und die historische Entwicklung von Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) spiegeln den Übergang von einem natürlichen Mineral zu einem industriellen Material wider und enthüllen seine wissenschaftliche Entdeckung und Anwendungsentwicklung.

#### 1.1.3.1 Erste Erkennung und Benennung

Wolframdisulfid wurde erstmals im 19. Jahrhundert als Wolframit identifiziert, wobei sich der Name "Wolfram" vom schwedischen "tung sten" (schwerer Stein) ableitete, der 1781 vom schwedischen Chemiker Carl Wilhelm Scheele geprägt wurde, um die hohe Dichte von Wolfram zu beschreiben. Die formale Namensgebung von Wolframenit wird Mineralogen des 19. Jahrhunderts wie dem deutschen Wissenschaftler Carl von Reichenbach zugeschrieben, der sein Vorhandensein bei der Untersuchung europäischer Sulfidvorkommen bestätigte. Im späten 19. Jahrhundert wurde durch Fortschritte in der analytischen Chemie – wie die Elementarspektroskopie und die chemische Titration – seine Zusammensetzung als  $WS_2$  genau bestimmt und von [Wolframtrioxid](#) ( $WO_3$ ) und anderen Oxiden unterschieden. Der Begriff "Disulfid" folgt chemischen Namenskonventionen und gibt zwei Schwefelatome pro Wolframatom an, ähnlich wie "Dioxid" (z. B.  $CO_2$ ).

Frühe Forschungen konzentrierten sich auf die mineralogischen Eigenschaften von Wolframit, und seine geringe Härte (1-1,5) und Seltenheit schlossen seine Verwendung als Primärquelle für die [Gewinnung von Wolframmetall aus](#). In mineralogischen Texten des 19. Jahrhunderts wurde es oft als sekundäres Mineral beschrieben, das wegen seiner Schichtstruktur mit Graphit und  $MoS_2$  verglichen wurde. So wurde es in deutschen Mineralogie-Handbüchern aus den 1860er Jahren als "weiches Sulfid" aufgeführt und auf seine leichte Spaltbarkeit hingewiesen. Obwohl dieses Anwesen nicht sofort das Interesse der Industrie weckte, legte es den Grundstein für tribologische Studien des 20. Jahrhunderts. Die Entdeckung und Benennung von Wolframenit spiegelt die damalige Schnittstelle von Geologie und Chemie wider und bietet eine theoretische Grundlage für

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

die spätere Synthese von WS<sub>2</sub>.

### 1.1.3.2 Anfänge der industriellen Anwendung

Die industrielle Anwendung von WS<sub>2</sub> entstand Mitte des 20. Jahrhunderts, angetrieben durch seine Schmiereigenschaften. In den 1950er und 1960er Jahren zeigten die Forschungen der NASA und des US-Militärs die Fähigkeit von WS<sub>2</sub>, die Reibung unter extremen Bedingungen (z. B. Temperaturen >500 °C, Vakuum und hohe Belastungen) mit einem Reibungskoeffizienten von nur 0,03 deutlich zu reduzieren und damit herkömmliche flüssige Schmiermittel zu übertreffen. Während des Apollo-Programms wendete die NASA beispielsweise WS<sub>2</sub> auf gleitende Komponenten von Raumfahrzeugen an, wie z. B. Antriebe von Solarmodulen, wobei Tests eine überlegene Stabilität im Vakuum im Vergleich zu Graphit (Oxidationstemperatur ~400 °C) zeigten. Gleichzeitig begann die Automobilindustrie, WS<sub>2</sub> in Fette für Getriebe und Lager einzuarbeiten, um die Lebensdauer zu verlängern. Ein Versuch der Ford Motor Company aus den 1960er Jahren ergab, dass WS<sub>2</sub>-dotiertes Fett die Verschleißraten von Getrieben um 50 % reduzierte.

Dieser Durchbruch beruhte auf Fortschritten in der Synthesetechnologie. Durch die Entwicklung der Röstzersetzung und der Wolframtrisulfid-Sublimationsverfahren wurde WS<sub>2</sub> von einem seltenen Mineral in ein massenproduzierbares Wolframprodukt umgewandelt. Im Jahr 1958 erreichte ein US-amerikanisches Chemieunternehmen durch die Reaktion von Wolframsäure mit Schwefelwasserstoff die Produktion im industriellen Maßstab und erreichte damit eine Jahresproduktion von mehreren Tonnen. Dies markierte den Wechsel von WS<sub>2</sub> vom Labor zum Markt, was mit den Fortschritten in der Wolframtechnologie einherging. Später skalierten Unternehmen wie CTIA GROUP LTD und CTIA GROUP LTD die Produktion weiter und weiteten den Einsatz in der Elektronik und Katalyse aus, z. B. bei der Herstellung von einschichtigen WS<sub>2</sub>-Nanoblättern.

Historisch gesehen fiel die Industrialisierung von WS<sub>2</sub> mit dem technologischen Wettbewerb in der Zeit des Kalten Krieges zusammen. Steigende Anforderungen in der Luft- und Raumfahrt haben die Forschung nach Hochleistungswerkstoffen vorangetrieben, und die geringe Reibung und hohe Stabilität von WS<sub>2</sub> erfüllten diese Anforderungen perfekt. Dieser Übergang von natürlichem Mineral zu synthetischem Material spiegelt nicht nur die Fortschritte in der Materialwissenschaft wider, sondern auch die Akkumulation von Wolframdaten.

## 1.2 Kristallstruktur von Wolframdisulfid

Die Kristallstruktur von WS<sub>2</sub> ist der Eckpfeiler seiner physikalischen und chemischen Eigenschaften und bestimmt direkt seine Schmierfähigkeit, sein Halbleiterverhalten und sein Anwendungspotenzial im Nanobereich. In diesem Abschnitt werden die hexagonale Schichtstruktur, die atomare Bindung, der Polymorphismus und die nanoskaligen Eigenschaften sorgfältig untersucht, wobei wissenschaftliche Analysen verwendet werden, um die intrinsische Verbindung zwischen Struktur und Funktion aufzudecken.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

## 1.2.1 Hexagonaler Schichtaufbau

WS<sub>2</sub> verwendet überwiegend ein hexagonales Kristallsystem, dessen Schichtstruktur als Grundlage für den niedrigen Reibungskoeffizienten und die hohe Stabilität dient.

### 1.2.1.1 Sandwich-Struktur

Die grundlegende Struktureinheit von WS<sub>2</sub> ist das S-W-S-Sandwich, bei dem ein Wolframatom zentral zwischen zwei Schwefelschichten positioniert ist. In der 2H-Phase (hexagonales System) nimmt Wolfram eine trigonale prismatische Koordination mit sechs Schwefelatomen an, wobei jede Schicht etwa 0,62 nm dick ist. Benachbarte Schichten werden über Van-der-Waals-Kräfte gestapelt, mit einem Zwischenlagenabstand von etwa 6,15 Å. Diese Struktur führt zu einem extrem niedrigen Gleitwiderstand zwischen den Schichten, was zu einem Reibungskoeffizienten von 0,03-0,09 führt, dem Kern seiner Schmierfähigkeit. Molekulardynamik-Simulationen (MD) zeigen eine Scherkraft zwischen den Schichten von etwa 0,1-0,2 N/m<sup>2</sup>, weit unterhalb der kovalenten Bindungsfestigkeit innerhalb der Schicht (>100 N/m<sup>2</sup>). Im Vergleich zu Graphit (Zwischenlagenabstand 3,35 Å) verbessert der größere Abstand von WS<sub>2</sub> die Gleitfähigkeit, und seine stärkeren W-S-Bindungen erhöhen die thermische Stabilität an Luft auf 650 °C und übertreffen damit die 400 °C von Graphit.

Die einschichtige Form dieser Sandwichstruktur ist vor allem in der Nanotechnologie von entscheidender Bedeutung. Durch mechanisches Exfoliation oder chemische Gasphasenabscheidung (CVD) kann einschichtiges WS<sub>2</sub> aus Schüttgut isoliert werden und wird so zu einem Schwerpunkt in der zweidimensionalen Materialforschung. So birgt beispielsweise eine einzelne WS<sub>2</sub>-Schicht mit einer Dicke von nur 0,62 nm – etwa einem Hunderttausendstel eines Haardurchmessers – ein immenses Potenzial für flexible Elektronik und optoelektronische Bauelemente. Darüber hinaus gewährleistet die chemische Stabilität der S-W-S-Struktur die Integrität in reduzierenden Umgebungen, wodurch sie für die petrochemische Katalyse geeignet ist.

### 1.2.1.2 Gitter-Parameter

In der 2H-Phase betragen die Gitterparameter von WS<sub>2</sub>  $a = 3,153 \text{ \AA}$  (in der Ebene) und  $c = 12,323 \text{ \AA}$  (über zwei Schichten), bestimmt durch Röntgenbeugung (XRD). Der Parameter  $a$  bezeichnet den Abstand zwischen benachbarten Wolframatomten innerhalb einer Schicht, während der Parameter  $c$  die Schichtdicke (0,62 nm) und den Zwischenlagenspalt (~6,15 Å) umfasst, was die schwachen van-der-Waals-Kräfte widerspiegelt. Das  $c/a$ -Verhältnis von etwa 3,91 nähert sich dem idealen hexagonalen Dichtkörperwert (theoretisch 4,899), was auf eine hochgeordnete Struktur hinweist. Die Gitterparameter von synthetischem WS<sub>2</sub> können aufgrund von Verunreinigungen oder Stress leicht variieren – z. B. können Sauerstoffverunreinigungen die  $c$ -Achse auf 12,35 Å erhöhen –, aber sie stimmen mit der natürlichen Struktur von Wolframinit überein.

Die Gitterparameter werden mit hochauflösender XRD- und Synchrotronstrahlung präzise gemessen, wobei der Peak (002) dem Schichtabstand entspricht und der Peak (100) die Anordnung in der Ebene widerspiegelt. Diese Parameter beeinflussen die elektronischen Eigenschaften (z. B.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Bandlücke), die Wärmeleitfähigkeit und das mechanische Verhalten von WS<sub>2</sub>. So reduziert beispielsweise der größere Abstand zwischen den C-Achsen die Wärmeübertragung zwischen den Schichten und bietet einzigartige Vorteile im Wärmemanagement. Die Stabilität dieser Parameter unterstützt auch den Einsatz von WS<sub>2</sub> in Dünnschichtbeschichtungen, bei denen die a- und c-Werte von CVD-gezüchteten WS<sub>2</sub>-Schichten über die Wachstumsbedingungen (z. B. Temperatur, Gasströmung) fein abgestimmt werden können.

### 1.2.1.3 Unterschiede zwischen ein- und mehrschichtigen Strukturen

Single-Layer-WS<sub>2</sub> unterscheidet sich deutlich von seinen Multilayer-Pendants in der physikalischen Physik Single-Layer-WS<sub>2</sub> und Multilayer-Strukturen weisen signifikante Unterschiede in den physikalischen und elektronischen Eigenschaften auf. Bei einschichtigem WS<sub>2</sub> wandelt das Fehlen einer Zwischenschichtkopplung die Bandlücke von indirekt (1,3 eV) in direkt (2,1 eV) um, wodurch eine optische Transparenz von bis zu 90 % erreicht wird, gemessen durch ultraviolett-sichtbare Spektroskopie (UV-Vis). Damit eignet es sich ideal für optoelektronische Anwendungen wie Photodetektoren und Leuchtdioden (LEDs). Im Gegensatz dazu behält Multilayer-WS<sub>2</sub> eine indirekte Bandlücke bei und bietet eine höhere mechanische Festigkeit und Wärmeleitfähigkeit, was für die Schmierung und Katalyse von Vorteil ist. Die Photolumineszenzspektroskopie (PL) zeigt, dass einschichtiges WS<sub>2</sub> einen starken Emissionspeak bei 620 nm mit einer Quantenausbeute von etwa 5-10 % aufweist, während mehrschichtiges WS<sub>2</sub> aufgrund indirekter Übergänge eine vernachlässigbare Emission (<0,1 %) aufweist. Mechanisch verbessert die einlagige WS<sub>2</sub> die Flexibilität und kann sich bis zu einem Krümmungsradius von 10<sup>-3</sup> m<sup>-1</sup> biegen, während die mehrschichtige WS<sub>2</sub> mit einer Druckfestigkeit von bis zu 2070 MPa, wie durch Nanoindentationstests ermittelt wurde, druckfester ist.

Diese Unterschiede ergeben sich aus der Eliminierung der elektronischen Wechselwirkungen zwischen den Schichten in Single-Layer-WS<sub>2</sub>. Die Phonon-Schwingungsfrequenz in einschichtigem WS<sub>2</sub> ist höher (ca. 400 cm<sup>-1</sup>, gemessen durch Raman-Spektroskopie), wodurch die Wärmeleitfähigkeit auf 2-3 W/m·K im Vergleich zu 20-30 W/m·K bei Mehrschicht-WS<sub>2</sub> reduziert wird, wie von Wärmeleitfähigkeitstestern beurteilt wurde. Diese Eigenschaftsanpassung ermöglicht vielfältige Anwendungen: Singlelayer-WS<sub>2</sub> zeichnet sich durch flexible Displays aus, während Multilayer-WS<sub>2</sub> für hochbelastbare Lager geeignet ist. Der Übergang von der Mehrschicht- zur Einschichtigkeit wirkt sich auch auf die Ladungsträgerdynamik aus, wobei die Einschicht-WS<sub>2</sub> eine verbesserte Photoerzeugungseffizienz aufweist, was für optoelektronische Bauelemente von entscheidender Bedeutung ist. Diese strukturellen Variationen unterstreichen die Vielseitigkeit von WS<sub>2</sub> und stehen im Einklang mit seiner Bedeutung in der [wissenschaftlichen Wolframforschung](#).

### 1.2.2 Atomare Anordnung und Bindungseigenschaften

Die atomare Anordnung und die Bindungseigenschaften von WS<sub>2</sub> schlagen eine Brücke zwischen seiner chemischen Zusammensetzung und seinen funktionellen Eigenschaften und bestimmen so seine Stabilität und Anwendungsleistung.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 1.2.2.1 Kovalente Bindungen innerhalb der Schicht

Innerhalb jeder WS<sub>2</sub>-Schicht handelt es sich bei den W-S-Bindungen um starke kovalente Bindungen mit einer Bindungslänge von 2,41 Å und einem Bindungswinkel von ca. 82° in der 2H-Phase. Quantenchemische Berechnungen schätzen eine Bindungsenergie von 400-500 kJ/mol, um die Integrität der Schicht bei hohen Temperaturen und mechanischer Beanspruchung zu gewährleisten. Die Überlappung der 5d-Orbitale des Wolframs mit den 3p-Orbitalen des Schwefels bildet die Valenz- und Leitungsbänder, wie sie von der Dichtefunktionaltheorie (DFT) modelliert werden, wobei die Elektronendichte entlang der W-S-Bindungen konzentriert ist, was auf eine hochkovalente Natur hinweist.

Diese Bindung untermauert die Halbleitereigenschaften von WS<sub>2</sub>, wobei das Bulk-Material eine indirekte Bandlücke von 1,3 eV aufweist und sich in einschichtiger Form auf 2,1 eV verschiebt. Die hohe Festigkeit von W-S-Bindungen ermöglicht es WS<sub>2</sub> auch, seine Struktur unter Drücken von mehr als 1 GPa beizubehalten, wodurch es für Luft- und Raumfahrtkomponenten geeignet ist, bei denen Langlebigkeit von größter Bedeutung ist.

Die kovalente Natur dieser Bindungen trägt zur Beständigkeit von WS<sub>2</sub> gegen chemische Angriffe innerhalb der Schicht bei und unterstützt den Einsatz in rauen Umgebungen. Unter sauren Bedingungen (z. B. H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) bleibt beispielsweise die Intralayer-Struktur intakt, was ihre Inertheit zeigt. Diese Stabilität, kombiniert mit seinen elektronischen Eigenschaften, positioniert WS<sub>2</sub> als Kandidaten für fortschrittliche elektronische Anwendungen wie Transistoren und Sensoren, bei denen strukturelle Robustheit und einstellbare Leitfähigkeit unerlässlich sind.

### 1.2.2.2 Zwischenschicht van der Waals-Kräfte

Zwischen S-W-S-Schichten wird WS<sub>2</sub> durch schwache Van-der-Waals-Kräfte zusammengehalten, mit einer Bindungsenergie von etwa 50-70 meV pro Atom und einem Zwischenlagenabstand von 6,15 Å. Rasterkraftmikroskopische Messungen zeigen eine Scherkraft zwischen den Schichten von etwa 0,1 N/m<sup>2</sup>, die Grundlage für die Schmierfähigkeit von WS<sub>2</sub>. Diese schwache Wechselwirkung ermöglicht ein müheloses Gleiten der Schichten, wodurch die Reibung reduziert und seine Rolle als Festschmierstoff ermöglicht wird. Umweltfaktoren wie Feuchtigkeit können jedoch Wassermoleküle interkalieren, wodurch der Abstand auf 6,2 Å vergrößert und die Reibung leicht erhöht wird, wie in tribologischen Tests beobachtet wurde.

Die schwachen Van-der-Waals-Kräfte erleichtern das mechanische Ablättern und erzeugen einschichtiges WS<sub>2</sub>, das in der zweidimensionalen Materialforschung weit verbreitet ist. Diese Exfoliationsfähigkeit, ähnlich wie bei Graphen, unterstützt den Einsatz von WS<sub>2</sub> in flexibler Elektronik und Nanokompositen, wo dünne, biegsame Schichten entscheidend sind. Der Kontrast zwischen starken kovalenten Intralayer-Bindungen und schwachen Interlayer-Kräften ist ein Beispiel für die einzigartige Dualität von WS<sub>2</sub> und macht es zu einem herausragenden Material in der [Wolframtechnologie](#).

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 1.2.2.3 Analyse der Bindungslänge und des Bindungswinkels

Die W-S-Bindungslänge von 2,41 Å ist bei allen Polymorphen konsistent, verifiziert durch TEM und XRD, während die Bindungswinkel variieren: etwa 82° in der 2H-Phase und nahe 90° in der 1T-Phase. DFT-Simulationen prognostizieren das Bindungsverhalten unter Belastung oder Dotierung; Zum Beispiel verlängert eine Zugdehnung von 2 % die Verbundlänge auf 2,45 Å, wodurch sich die elektronischen Eigenschaften verändern. Diese Parameter sind entscheidend für die computergestützte Modellierung und ermöglichen Vorhersagen über die Reaktion von WS<sub>2</sub> auf mechanische oder chemische Modifikationen. Diese Analyse leitet die strukturelle Optimierung, wie z. B. die Anpassung der Kristallphasen zur Verbesserung der katalytischen Aktivität, wie sie in [akademischen Wolframstudien](#) untersucht wurde.

Die Daten zu Bindungslänge und -winkel geben auch Aufschluss über die Skalierbarkeit von WS<sub>2</sub> in Anwendungen. So erhöht beispielsweise die präzise Steuerung der Bindungswinkel in der 1T-Phase die Metallizität, während die Stabilität der 2H-Phase die Haltbarkeit industrieller Beschichtungen unterstützt. Diese strukturellen Erkenntnisse sind entscheidend für die Anpassung von WS<sub>2</sub> an bestimmte Anwendungen, von der Schmierung bis zur Elektronik.

### 1.2.3 Polymorphismus von Wolframdisulfid

[Wolframdisulfid](#) (WS<sub>2</sub>) weist einen Polymorphismus auf, ein Schlüsselmerkmal seiner Kristallstruktur, mit unterschiedlichen Phasen (1T, 2H, 3R und 1T'), die unterschiedliche physikalische und chemische Eigenschaften verleihen. Dies erweitert seinen Nutzen in den Bereichen Schmierung, Katalyse, Elektronik und Nanotechnologie. Polymorphismus resultiert aus Variationen in der Wolfram-Schwefel-Koordination und der Stapelung zwischen den Schichten, die über Synthesebedingungen wie Temperatur, Druck und chemische Interkalation gesteuert werden können. In diesem Unterabschnitt werden diese vier primären Polymorphe gründlich untersucht, ihre strukturellen Eigenschaften, ihre Stabilität und ihr Anwendungspotenzial analysiert und der tiefgreifende Einfluss des Polymorphismus auf die Funktionalität von WS<sub>2</sub> erläutert.

#### 1.2.3.1 1T Phase

Die 1T-Phase (monoklines System, T für tetragonale Symmetrie) weist Wolfram in oktaedrischer Koordination auf, wobei jedes Wolframatom von sechs Schwefelatomen umgeben ist, die eine S-W-S-Schicht bilden. Im Gegensatz zur trigonalen prismatischen 2H-Phase bietet die 1T-Phase eine höhere Symmetrie mit den Gitterparametern  $a = 5,68 \text{ \AA}$  und  $c = 5,94 \text{ \AA}$  (Einzelschichtdicke), gemessen mit XRD und TEM. Seine elektronische Struktur ist metallisch, mit einer Bandlücke von nahezu Null, die in scharfem Kontrast zur halbleitenden 2H-Phase steht. DFT-Berechnungen bestätigen diese Metallizität, wobei die Fermi-Ebene das Leitungsband durchquert, was zu einer hohen Leitfähigkeit von etwa  $10^3 \text{ S/cm}$  (Vier-Sonden-Methode) führt, die weit über den  $10^1$ - $10^2 \text{ S/cm}$  der 2H-Phase liegt.

Die 1T-Phase ist weniger stabil, typischerweise metastabil bei Standardtemperatur und -druck und

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

kehrt spontan in die 2H-Phase zurück. Die Synthese erfordert bestimmte Bedingungen, wie z. B. Alkalimetall-Interkalation (z. B. Li, Na) oder Hochdruckbehandlung. Zum Beispiel wandelt die Interkalation von Wolframit oder synthetischem WS<sub>2</sub> mit n-Butyllithium (n-BuLi) die 2H-Phase in 1T um, wie gezeigt:

$WS_2 + xLi \rightarrow Li_xWS_2(1Tphase)WS_2 + xLi \rightarrow Li_xWS_2(1T-Phase)WS_2 + xLi \rightarrow Li_xWS_2(1Tphase)$  Die anschließende Hydrolyse entfernt Li<sup>+</sup>, wobei die 1T-Struktur erhalten bleibt, mit einer Ausbeute von 60-80%. Bei wochenlanger Exposition gegenüber Luft kehrt sie jedoch teilweise auf 2H zurück, wobei die c-Achse auf 6,0 Å ansteigt, was auf eine strukturelle Relaxation hinweist, die mittels in-situ-XRD beobachtet wurde.

Die 1T-Phase zeichnet sich in der Elektrokatalyse aus und nutzt ihre Metallizität und ihre kantenaktiven Zentren für eine überlegene Leistung in der Wasserstoffentwicklungsreaktion (HER). Elektrochemische Tests zeigen ein HER-Überpotential von 100-150 mV bei 10 mA/cm<sup>2</sup>, das die 300-400 mV der 2H-Phase übertrifft, was auf Schwefelatome mit geringer Koordination (2-3 vs. 6 in der Basalebene) mit erhöhter Elektronendichte zurückzuführen ist. Seine hohe Leitfähigkeit unterstützt auch Elektrodenanwendungen, die durch Verbundwerkstoffe mit [Wolfram-Kupfer möglicherweise verbessert werden](#). Obwohl die Stabilität die industrielle Skalierbarkeit einschränkt, erregt seine einzigartige elektronische Struktur große Aufmerksamkeit in der [akademischen Wolframforschung](#), in der die Anwendungen in Brennstoffzellen und Supraleitung erforscht werden.

### 1.2.3.2 2H-Phase

Die 2H-Phase (hexagonales System, H für hexagonal) ist das stabilste und am weitesten verbreitete Polymorph von WS<sub>2</sub> und dominiert industrielle Anwendungen. Wolfram nimmt eine trigonale prismatische Koordination an, wobei jede S-W-S-Schicht 0,62 nm dick ist und zwei Schichten eine Elementarzelle mit den Gitterparametern a = 3,153 Å und c = 12,323 Å (Zwei-Lagen-Abstand) bilden, was durch hochauflösende XRD bestätigt wird. Die Schichten werden durch Van-der-Waals-Kräfte mit einem Abstand von 6,15 Å verbunden, was zu einer geringen Scherfestigkeit und einem Reibungskoeffizienten von 0,03-0,09 führt. Seine halbleitende Natur weist eine indirekte Bandlücke von 1,3 eV in loser Form auf, die durch UV-Vis verifiziert wurde, wobei das Leitungsbandminimum am Γ-Punkt und das Valenzbandmaximum am K-Punkt liegt.

Die 2H-Phase ist außergewöhnlich stabil und hält 650 °C in Luft und 1250 °C im Vakuum oder in inerten Atmosphären stand und übertrifft damit die 500 °C und 1185 °C von MoS<sub>2</sub>, wie DTA nachweist. Die Oxidation beginnt bei 510 °C und wandelt sich bei 650 °C vollständig in WO<sub>3</sub> um. Diese Stabilität macht es zu einem Grundnahrungsmittel auf dem [Wolframmarkt](#), das häufig in Schmierstoffen verwendet wird – z. B. reduziert es die Getriebereibung in Autofetten auf 0,05 und erhöht die Lebensdauer um 50 %. Seine Halbleitereigenschaften unterstützen auch elektronische Anwendungen wie FET-Kanalmaterialien, obwohl seine Ladungsträgermobilität (10-20 cm<sup>2</sup>/V·s) geringer ist als bei einschichtigem WS<sub>2</sub>.

Die Synthese erfolgt unkompliziert über die Röstzerlegung oder CVD, wobei [Wolframsäure](#) und

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

H<sub>2</sub>S bei 600-800 °C reagieren und >95 % 2H-Phasen-WS<sub>2</sub> ergeben. Seine mechanische Stabilität mit einer Druckfestigkeit von 2070 MPa in Beschichtungen eignet sich für Hochlastanwendungen wie Lager in der Luft- und Raumfahrt, ein Markenzeichen von [Wolframprodukten](#).

### 1.2.3.3 3R-Phase

Die 3R-Phase (rhomboedrisches System, R für rhomboedrisch) besteht aus drei S-W-S-Schichten pro Elementarzelle mit den Gitterparametern  $a = 3,153 \text{ \AA}$  und  $c = 18,48 \text{ \AA}$  (Dreischichtabstand), gemessen mit Synchrotron-XRD. Wie die 2H-Phase verwendet sie eine trigonale prismatische Koordination mit einem etwas größeren Zwischenlagenabstand von  $6,16 \text{ \AA}$ . Seine indirekte Bandlücke ( $\sim 1,3 \text{ eV}$ ) spiegelt die 2H-Phase wider, aber seine ABC-Stapelung unterscheidet sich von der AB-Anordnung von 2H, die sich durch eine Raman A<sub>1g</sub>-Peak-Verschiebung auf  $405 \text{ cm}^{-1}$  (vs.  $420 \text{ cm}^{-1}$  bei 2H) unterscheidet.

Die 3R-Phase ist nahezu so stabil wie die 2H-Phase, aber seltener und bildet sich unter CVD-Bedingungen bei hohen Temperaturen ( $>1000 \text{ °C}$ ) oder hohem Druck ( $>10 \text{ bar}$ ). Sein Oxidationsbeginn beträgt  $\sim 510 \text{ °C}$ , vergleichbar mit 2H. Obwohl es nicht weit verbreitet ist, liegt sein Potenzial in der Forschung, da eine stärkere Zwischenschichtkopplung die Wärmeleitfähigkeit auf  $35 \text{ W/m}\cdot\text{K}$  erhöht, was auf Wärmemanagementanwendungen hindeutet.

### 1.2.3.4 1T'-Phase

Die 1T'-Phase, eine verzerrte Variante von 1T, nimmt eine monokline Struktur mit Wolframatomen an, die sich zusammenschließen, was die Gitterparameter  $a = 5,68 \text{ \AA}$ ,  $b = 5,94 \text{ \AA}$  und  $c = 12,0 \text{ \AA}$  (zwei Schichten) ergibt. Seine topologischen Eigenschaften, wie der Quanten-Spin-Hall-Effekt, beruhen auf einer Bandlücke von  $0,1-0,2 \text{ eV}$ , die von ARPES verifiziert wurde. Die Synthese über Dotierung (z. B. Mo<sub>x</sub>W<sub>1-x</sub>S<sub>2</sub>) oder Dehnung ist eine Herausforderung, da die Stabilität auf niedrige Temperaturen ( $<100 \text{ K}$ ) beschränkt ist. Es ist vielversprechend für Quantencomputing und Elektrokatalyse mit einem HER-Überpotential von  $80-120 \text{ mV}$  und bringt die Forschung im Bereich der sauberen Energie voran.

## 1.2.4 Nanoskalige strukturelle Eigenschaften von Wolframdisulfid

Die nanoskaligen Eigenschaften von WS<sub>2</sub> unterscheiden sich erheblich von denen von Massenformen, was auf Oberflächeneffekte, Quanteneinschluss und Anisotropie zurückzuführen ist und ein enormes Potenzial in der Nanotechnologie erschließt.

### 1.2.4.1 Oberflächeneffekte und Kantenaktivität

Auf der Nanoskala (z. B. Nanoblätter oder Nanopartikel) verstärkt das hohe Oberflächen-Flächen-zu-Volumen-Verhältnis von WS<sub>2</sub> die Oberflächeneffekte, wobei die BET-Analyse ein einschichtiges WS<sub>2</sub> bei  $300-500 \text{ m}^2/\text{g}$  im Vergleich zu  $1-5 \text{ m}^2/\text{g}$  bei großen Mengen zeigt. Schwefelatome, die an den Kanten exponiert sind, insbesondere in 1T- und 1T'-Phasen, werden aufgrund der geringen

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Koordination (2-3 vs. 6) zu aktiven Zentren, was die Reaktivität um das 10- bis 20-fache erhöht, wie von STM beobachtet. In HER erreichen die Randstellen Austauschstromdichten von  $10^{-4}$  A/cm<sup>2</sup>, was weit über den  $10^{-6}$  A/cm<sup>2</sup> der Basalebenen liegt.

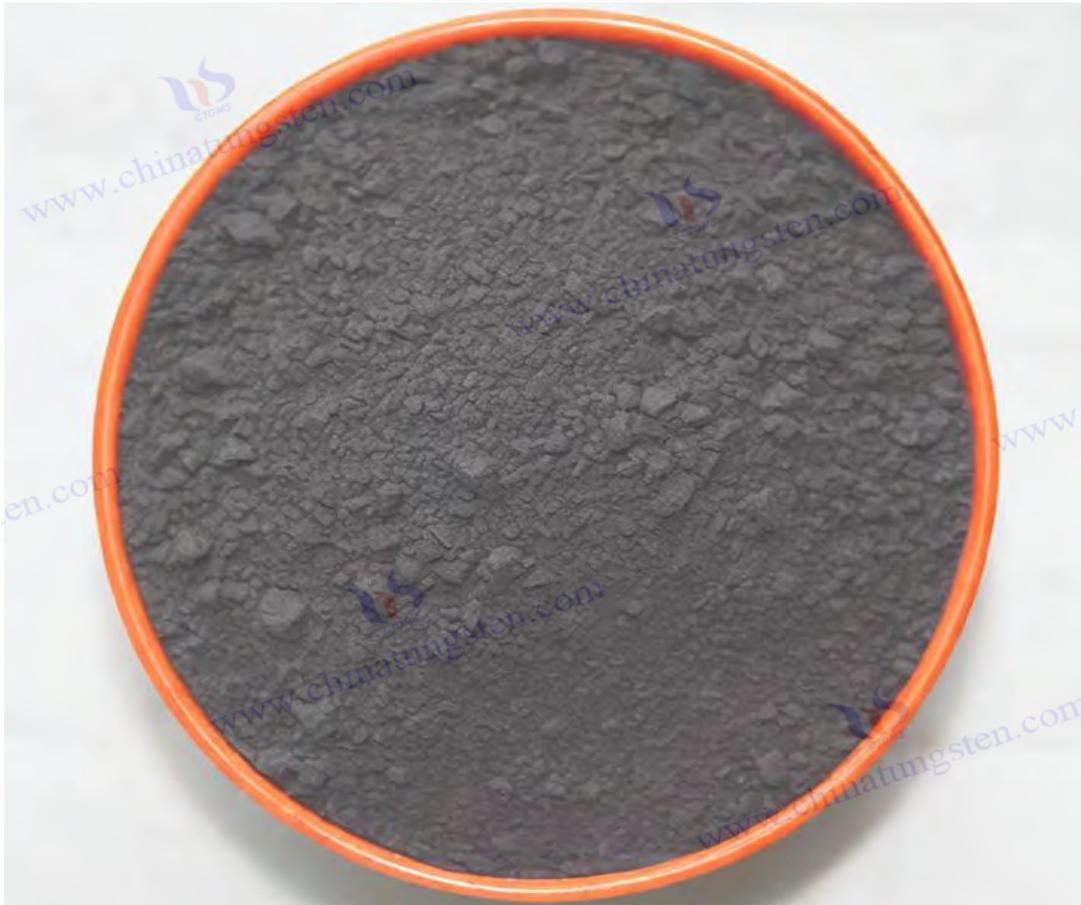
#### 1.2.4.2 Quanteneinschlusseffekte in Single-Layer-WS<sub>2</sub>

Der Quanteneinschluss von Single-Layer-WS<sub>2</sub> verschiebt seine Bandlücke auf direkt (2,1 eV), mit PL-Peaks bei 620 nm und einer Quantenausbeute von 5-10 %, ideal für die Optoelektronik. Seine Trägerbeweglichkeit erreicht 100-200 cm<sup>2</sup>/V·s, was die FET-Leistung verbessert.

#### 1.2.4.3 Anisotropie und Eigenschaften der Interlayer-Exfoliation

Die Anisotropie von WS<sub>2</sub> – starke Bindungen innerhalb der Schicht vs. schwache Kräfte zwischen den Schichten – führt zu einer Wärmeleitfähigkeit von 50 W/m·K in der Ebene und von 2-3 W/m·K außerhalb der Ebene. Dies ermöglicht das Peeling und die Herstellung flexibler Einzelschichten für tragbare Geräte und Verbundwerkstoffe wie [Wolframkautschuk](#).

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT



CTIA GROUP LTD Wolframdisulfid

## Kapitel 2: Eigenschaften von Wolframdisulfid

Die Produkteigenschaften von Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) bilden die Grundlage für seine breiten Anwendungen in industriellen und wissenschaftlichen Bereichen und bestimmen direkt seine herausragende Leistung in Bereichen wie Schmierstoffen, elektronischen Geräten und Katalysatoren. Diese Eigenschaften umfassen physikalische, chemische und elektrische/optische Attribute, die jeweils eng mit ihrer einzigartigen Schichtstruktur und der chemischen Bindung zwischen Wolfram und Schwefel verbunden sind. Dieses Kapitel beginnt mit einer Untersuchung seiner physikalischen Eigenschaften und befasst sich mit Aspekten wie Aussehen, Dichte, thermischer Stabilität, Reibungsleistung und mechanischer Festigkeit. Anschließend analysiert es seine chemischen Eigenschaften, einschließlich Löslichkeit, Redoxverhalten und Korrosionsbeständigkeit, bevor es eine detaillierte Untersuchung seiner elektrischen und optischen Eigenschaften wie Leitfähigkeit, Bandlücke und optische Absorption liefert. Durch eine Kombination aus theoretischer Analyse, experimentellen Daten und Anwendungsfallstudien zeigt dieses Kapitel umfassend die Multifunktionalität von  $WS_2$  und seinen bedeutenden Wert in der modernen Technologie auf.

### 2.1 Physikalische Eigenschaften von Wolframdisulfid

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Die physikalischen Eigenschaften von  $WS_2$  sind der Eckpfeiler seiner Anwendungsleistung und beeinflussen sein Verhalten in mechanischen, thermischen und tribologischen Kontexten direkt. Vom Aussehen bis zur Härte ist jede Eigenschaft eng mit ihrem Schichtaufbau und der hohen Atommasse des Wolframs verknüpft. In diesem Abschnitt werden das Aussehen und die Farbe, die Dichte und das spezifische Gewicht, die thermische Stabilität, der Reibungskoeffizient und die Schmierleistung sowie die Härte und die mechanische Festigkeit sorgfältig analysiert, wobei wissenschaftliche Daten und praktische Anwendungen integriert werden, um die Vielfalt und Überlegenheit seiner physikalischen Eigenschaften zu demonstrieren.

## 2.1.1 Aussehen und Farbe

Das Aussehen und die Farbe von  $WS_2$  variieren je nach Form und Herstellungsmethode und reichen von einem metallisch-grauen Glanz in Pulverform bis hin zu Veränderungen der Transparenz in dünnen Schichtzuständen. Diese Eigenschaften wirken sich nicht nur auf die optische Identifizierung aus, sondern sind auch eng mit der Funktionalität verbunden.

### 2.1.1.1 Metallisch-grauer Glanz in Pulverform

In seiner Pulverform erscheint  $WS_2$  als grau-schwarzes Material mit einem ausgeprägten metallischen Glanz, eine Eigenschaft, die sich aus den reflektierenden Eigenschaften seiner Schichtstruktur ergibt. Die Elektronenwolkenverteilung von Wolfram- und Schwefelatomen führt zu einer starken Reflexion im sichtbaren Lichtspektrum, die der Oberfläche unter natürlichem Licht eine metallische Textur verleiht. Beobachtungen durch ein optisches Mikroskop zeigen, dass mikroskalige  $WS_2$ -Pulverpartikel typischerweise unregelmäßig schuppig sind, mit glatten Oberflächen und Partikelgrößen von wenigen Mikrometern bis zu Dutzenden von Mikrometern. Die Rasterelektronenmikroskopie (REM) offenbart ferner, dass ihre Oberflächenmikrostruktur aus mehreren gestapelten S-W-S-Einheiten besteht, mit einem Zwischenlagenabstand von etwa  $6,15 \text{ \AA}$ , was mit ihrer Kristallstruktur übereinstimmt (siehe 1.2.1.2). Dieser metallisch-graue Glanz macht es in industriellen Schmierstoffen leicht erkennbar, wo es häufig als Additiv zu [Wolframpulver](#) oder [Wolframkarbidpulver zur](#) Herstellung von Hochleistungsverbundwerkstoffen verwendet wird.

Die Intensität des Glanzes hängt eng mit der Partikelgröße und -reinheit zusammen. Hochreines  $WS_2$  (>99,9 %) weist einen gleichmäßigeren metallischen Glanz auf, während Proben, die Verunreinigungen (wie Oxide oder Sulfide) enthalten, dunkler erscheinen können. Die Analyse der Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) zeigt, dass die Oberfläche von reinem  $WS_2$  hauptsächlich aus  $W^{4+}$  und  $S^{2-}$  besteht, wobei Verunreinigungen wie [Wolframtrioxid](#) ( $WO_3$ ) in Konzentrationen unter 0,1 % vorhanden sind, was ein einheitliches Erscheinungsbild gewährleistet. In der Praxis ist diese visuelle Eigenschaft von Bedeutung. Bei der mechanischen Verarbeitung ermöglicht der metallisch-graue Glanz des  $WS_2$ -Pulvers beispielsweise die Beurteilung der gleichmäßigen Verteilung, insbesondere beim Sprühen oder Einarbeiten in Fett. Die visuelle Inspektion kann eine erste Bewertung der Dispergierbarkeit liefern und so Leistungseinbußen aufgrund von Partikelagglomeration verhindern. Im Vergleich zum tiefschwarzen Farbton von [Molybdändisulfid](#) ( $MoS_2$ ) ermöglicht das hellere Grau von  $WS_2$  eine schnelle Unterscheidung an

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Industriestandorten und reduziert so die Verwechslungsgefahr.

Aus optischer Sicht korreliert der metallische Glanz von WS<sub>2</sub>-Pulver mit seiner Oberflächenrauheit und dem Reflexionsvermögen seiner Schichtstruktur. Messungen der Rasterkraftmikroskopie (AFM) zeigen, dass die Oberflächenrauheit (Ra) von mikroskaligem WS<sub>2</sub>-Pulver etwa 10-20 nm beträgt, mit einem Reflexionsvermögen im Bereich des sichtbaren Lichts (400-700 nm) von etwa 20-30 %, das höher ist als das von MoS<sub>2</sub> von 15-25 %. Diese reflektierende Eigenschaft beeinflusst nicht nur das Aussehen, sondern bezieht sich auch auf das Wärmeabstrahlungsverhalten, wodurch die Wärmeaufnahme der Oberfläche bei hohen Temperaturen (z. B. 500 °C) verringert und die Wärmeableitungseffizienz verbessert wird. Bei der Herstellung von Wolframprodukten wird WS<sub>2</sub>-Pulver häufig auf bestimmte Partikelgrößen (z. B. 5-10 µm) gemahlen, um sowohl das Aussehen als auch die Funktionalität zu optimieren. So ist beispielsweise das von CTIA GROUP LTD hergestellte WS<sub>2</sub>-Pulver in Industriequalität an seinem metallisch-grauen Glanz zu erkennen, der in Schmiermitteln und Verbundwerkstoffen weit verbreitet ist.

### 2.1.1.2 Transparenzschwankungen in Dünnschichtform

Wenn WS<sub>2</sub> als dünner Film vorliegt, ändert sich sein Aussehen erheblich, wobei die Transparenz je nach Dicke variiert. Einschichtige WS<sub>2</sub>-Schichten weisen aufgrund von Quanteneinschlusseffekten und ihrer ultradünnen Natur (ca. 0,62 nm) eine hohe optische Transparenz auf, wobei die Durchlässigkeit des sichtbaren Lichts über 90 % liegt und nahezu farblos erscheint. Diese Eigenschaft wird durch die ultraviolett-sichtbare Spektroskopie (UV-Vis) bestätigt, wobei eine Absorptionskante bei 620 nm einer direkten Bandlücke von 2,1 eV entspricht (siehe 2.3.2.1). Durch diese Transparenz eignet es sich für optoelektronische Bauelemente, wie z. B. transparente leitfähige Folien oder sensibilisierende Schichten in Solarzellen. Mit zunehmender Anzahl der Schichten gehen mehrschichtige WS<sub>2</sub>-Schichten (10-50 nm dick) von halbtransparent zu grau über, wobei die Transparenz mit der Anzahl der Schichten abnimmt. Jenseits von 50 Schichten nähert es sich dem Grau-Schwarz von Schüttgut, wobei die Durchlässigkeit unter 10 % sinkt. Ellipsometrie-Messungen zeigen, dass eine 10-lagige WS<sub>2</sub>-Schicht bei 550 nm einen Transmissionsgrad von etwa 50 % aufweist, wobei das Reflexionsvermögen auf 30 % ansteigt.

Die Variation der Transparenz ist eng mit den Zubereitungsmethoden verbunden. Einschichtige WS<sub>2</sub>-Schichten, die durch chemische Gasphasenabscheidung hergestellt werden, zeichnen sich durch glatte Oberflächen mit minimalen Defekten aus und erreichen eine hohe Transparenz mit einer Wurzel-Mittel-Quadrat-Rauheit von weniger als 0,5 nm (AFM-Messung). Im Gegensatz dazu können mehrschichtige Filme, die durch mechanisches Peeling erhalten werden, aufgrund von Kantenfalten oder Verunreinigungen leicht trüb erscheinen, wodurch die Transparenz um 5-10% reduziert wird. Diese Eigenschaft bietet einzigartige Vorteile bei flexibler Elektronik und optischen Beschichtungen. So dienen einlagige WS<sub>2</sub>-Folien im Bereich der Wolframtechnologie als Schutzschichten für flexible Displays, wo sie mit ihrer hohen Transparenz und Flexibilität (biegbar bis zu einem Krümmungsradius von 10<sup>-3</sup> m<sup>-1</sup>) den Anforderungen an Displaygeräte der nächsten Generation gerecht werden. Mehrschichtige WS<sub>2</sub>-Folien mit ihrer Halbtransparenz und hohen Temperaturbeständigkeit werden häufig als Antireflexbeschichtungen in optischen Geräten

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

verwendet, die durch Plasmaspritzen auf Glassubstrate aufgebracht werden und Temperaturen von bis zu 500 °C standhalten.

Aus Anwendungssicht wirken sich die Transparenzschwankungen von WS<sub>2</sub>-Folien auch auf die Verträglichkeit mit Substraten aus. In Kombination mit [Wolfram-Kupfer](#) zur Herstellung leitfähiger Schichten sorgt die Transparenz von einschichtigem WS<sub>2</sub> für optische Leistung, während das graue Erscheinungsbild von mehrschichtigem WS<sub>2</sub> mechanischen Schutz bietet. Durch die Kontrolle der CVD-Wachstumsbedingungen (z. B. Schwefeldampfdruck, Temperatur von 800-1000 °C) kann die Schichtdicke genau an unterschiedliche Anforderungen angepasst werden. Zum Beispiel können WS<sub>2</sub>-Folienprodukte, die von [CTIA GROUP LTD entwickelt](#) wurden, in Bezug auf die Transparenz angepasst werden, die von vollständig transparenten Einzelschichten bis hin zu halbtransparenten Mehrschichten, die in optoelektronischen und Schmieranwendungen weit verbreitet sind.

## 2.1.2 Dichte und spezifisches Gewicht

Die hohe Dichte und das spezifische Gewicht von WS<sub>2</sub> sind herausragende Merkmale seiner physikalischen Eigenschaften, die die hohe Atommasse von Wolfram und seine dicht gepackte Struktur direkt widerspiegeln, die für Anwendungen in Hochleistungs- und Abschirmungsumgebungen von entscheidender Bedeutung sind.

### 2.1.2.1 Schüttdichte

Die Schüttdichte von WS<sub>2</sub> beträgt etwa 7,5 g/cm<sup>3</sup>, bestimmt durch die Archimedes-Methode und Röntgendichteberechnungen, was mit dem spezifischen Gewicht von natürlichem Wolframentit übereinstimmt. Diese hohe Dichte beruht vor allem auf der Atommasse von Wolfram (183,84 u), die deutlich höher ist als die von Molybdän (95,95 u), wodurch WS<sub>2</sub> dichter ist als MoS<sub>2</sub> (4,9 g/cm<sup>3</sup>). In seiner hexagonalen 2H-Phase sind Wolframatome dicht gepackt in einer trigonalen prismatischen Anordnung mit einem W-W-Abstand von 3,153 Å in der Ebene (siehe 1.2.1.2). Trotz der Van-der-Waals-Kräfte zwischen den Schichten, die einen Abstand von 6,15 Å einhalten, sorgt die Kompaktheit der gesamten Kristallstruktur für eine hohe Dichte. Messungen der Pulverröntgenbeugung (PXRD) bestätigen, dass die theoretische Dichte mit den experimentellen Werten übereinstimmt, mit einer Fehlerspanne von weniger als 0,05 g/cm<sup>3</sup>, was ihre strukturelle Konsistenz bestätigt.

Diese hohe Dichte findet praktische Anwendung in [Strahlenschutzmaterialien](#), da sie hochenergetische Strahlen (z. B. Röntgen- und Gammastrahlen) effektiv absorbiert. In medizinischen Geräten dient WS<sub>2</sub> Bulk beispielsweise als leichte Abschirmschicht. Obwohl seine Dichte geringer ist als die von [Wolframmetall](#) (19,25 g/cm<sup>3</sup>), ist es umweltfreundlicher als herkömmliches Blei (11,34 g/cm<sup>3</sup>) und bietet ein moderates Gewicht. Monte-Carlo-Simulationen zeigen, dass WS<sub>2</sub> einen Dämpfungskoeffizienten von etwa 2,5 cm<sup>-1</sup> für 100 keV-Röntgenstrahlen aufweist und damit die 1,8 cm<sup>-1</sup> von MoS<sub>2</sub> übertrifft, was seine Überlegenheit demonstriert. In der Luft- und Raumfahrt eignet sich WS<sub>2</sub> aufgrund der Kombination aus hoher Dichte und Flexibilität

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

für interne Abschirmkomponenten, z. B. wenn es mit Wolframkunststoff verbunden ist, wodurch das Gewicht bei gleichbleibender Abschirmwirkung reduziert wird. Im Vergleich zu Wolfram-Kupfer (13-17 g/cm<sup>3</sup>) bietet die geringere Dichte von WS<sub>2</sub> einen Vorteil in Szenarien, die Schmierfähigkeit erfordern, wie z. B. bei gleitenden Teilen von Raumfahrzeugen.

Die Stabilität der Schüttdichte unterstützt auch den Einsatz von WS<sub>2</sub> in Gegengewichtsmaterialien, wie z. B. bei der Herstellung von Wolframgranulat, wo seine hohe Dichte eine ausreichende Masse in einem kleinen Volumen gewährleistet. Praxistests zeigen, dass WS<sub>2</sub> bulk bei 500 °C eine Dichteschwankung von weniger als 0,1 % aufweist, was seine thermische Stabilität widerspiegelt (siehe 2.1.3), was es ideal für Hochtemperatur-Gegengewichtsanwendungen macht. Auf dem Wolframmarkt ist WS<sub>2</sub> aufgrund seiner hohen Dichte die bevorzugte Wahl für Präzisionsinstrumente (z. B. Gyroskope) und bietet im Vergleich zu Materialien mit geringerer Dichte eine überlegene Gleichmäßigkeit der Massenverteilung.

### 2.1.2.2 Dichteveränderungen in Nanostrukturen

Auf der Nanoskala variiert die Dichte von WS<sub>2</sub> aufgrund morphologischer und Größeneffekte. Die theoretische Dichte von einschichtigen WS<sub>2</sub>-Nanoblättern liegt nach wie vor bei 7,5 g/cm<sup>3</sup>, aber tatsächliche Messungen, die durch Oberflächenadsorption (z. B. Wasser- oder Sauerstoffmoleküle) beeinflusst werden, ergeben etwas niedrigere Werte von 7,2-7,4 g/cm<sup>3</sup>, wie sie durch Heliumpyknometrie bestimmt wurden. Die Dichte von Nanopartikeln oder Nanodrähten nimmt weiter ab; So können beispielsweise WS<sub>2</sub>-Nanopartikel mit einem Durchmesser von 10 nm eine Dichte von nur 6,8 g/cm<sup>3</sup> aufweisen, was durch Rasterelektronenmikroskopie (REM) und Brunauer-Emmett-Teller (BET)-Oberflächenanalyse verifiziert wurde. Diese Verringerung wird auf eine erhöhte Porosität und Kanteneffekte in Nanostrukturen zurückgeführt, wobei die BET-Analyse eine Porosität von 5-10 % für 10-nm-Partikel ergab, verglichen mit weniger als 1 % in Schüttgut.

Diese Dichteunterschiede haben direkte Auswirkungen auf Anwendungen. Die geringere Dichte von nanoskaligem WS<sub>2</sub> reduziert das Gewicht von Verbundwerkstoffen und verbessert die Dispergierbarkeit. Wenn es beispielsweise mit Wolframkautschuk gemischt wird, kann nanoskaliges WS<sub>2</sub> (Dichte 7,2 g/cm<sup>3</sup>) in 10-15 % höheren Mengen eingearbeitet werden, ohne das Gesamtgewicht signifikant zu erhöhen, während die Schmierfähigkeit erhalten bleibt. Messungen der dynamischen Lichtstreuung (DLS) zeigen, dass nanoskaliges WS<sub>2</sub> im Vergleich zu mikroskaligem Pulver eine um 20 % bessere Dispersionsgleichmäßigkeit in Polymermatrizen erreicht. Umgekehrt eignet sich die Schüttdichte besser für Anwendungen, die Massenstabilität erfordern, wie z. B. bei Wolframpachtel für Gegengewichte, wo seine Dichte von 7,5 g/cm<sup>3</sup> eine gleichmäßige Masse in einem kleinen Volumen gewährleistet.

Dichteschwankungen in Nanostrukturen beeinflussen auch die thermischen und elektrischen Eigenschaften. Die geringere Dichte von einlagigem WS<sub>2</sub> führt zu einer reduzierten Wärmeleitfähigkeit von 2-3 W/m·K (siehe 2.1.3.3), die für das Wärmemanagement in flexibler Elektronik geeignet ist. Die thermogravimetrische Analyse (TGA) zeigt, dass nanoskaliges WS<sub>2</sub> aufgrund seiner größeren Oberfläche, die Oxidationsreaktionen beschleunigt, eine etwas niedrigere

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Oxidationseintrittstemperatur aufweist (ca. 490 °C vs. 510 °C für Bulk). Diese Anpassungsfähigkeit macht es wertvoll in der Nanotechnologie, wie z. B. in der [Wolframforschung](#), wo Dichteunterschiede im nanoskaligen WS<sub>2</sub> genutzt werden, um leichte, leistungsstarke Geräte zu entwickeln.

### 2.1.3 Thermische Stabilität

Die thermische Stabilität von WS<sub>2</sub> ist eine entscheidende Eigenschaft für seinen Einsatz in Hochtemperaturumgebungen, die den Schmelzpunkt, die Zersetzungstemperatur und das Wärmeausdehnungsverhalten umfasst und seine Anwendungen in der Luft- und Raumfahrt, in Industrieanlagen und darüber hinaus direkt unterstützt.

#### 2.1.3.1 Schmelzpunkt

WS<sub>2</sub> hat einen Schmelzpunkt von ca. 1250 °C im Vakuum oder in inerten Atmosphären (z. B. Stickstoff), der durch die differentielle thermische Analyse (DTA) bestimmt wird. An der Luft kann der Schmelzpunkt aufgrund von Oxidationsreaktionen (siehe 2.2.2.1) nicht direkt beobachtet werden, da er sich bei etwa 650 °C in WO<sub>3</sub> umwandelt. Dieser hohe Schmelzpunkt entsteht durch die starken kovalenten W-S-Bindungen innerhalb der Schicht (Bindungsenergie von 400-500 kJ/mol), die die Van-der-Waals-Kräfte zwischen den Schichten (50-70 meV/Atom) weit übertreffen. Im Vergleich zu MoS<sub>2</sub> (1185 °C) spiegelt der höhere Schmelzpunkt von WS<sub>2</sub> die höhere Masse und Bindungsstärke von Wolframatomen wider. Messungen der Synchrotron-Röntgenbeugung (XRD) bestätigen, dass WS<sub>2</sub> seine 2H-Phasenstruktur bis zu 1000 °C beibehält, mit Änderungen der Gitterparameter von weniger als 0,1 %, was seine thermische Strukturstabilität demonstriert.

Dieser hohe Schmelzpunkt bietet erhebliche Vorteile bei der Hochtemperaturschmierung. In Turbinenschaufeln für die Luft- und Raumfahrt hält WS<sub>2</sub> beispielsweise die strukturelle Integrität über 1000 °C aufrecht und übertrifft damit herkömmliche organische Schmierstoffe (Zersetzungstemperatur <300 °C). Bei der Herstellung von [Wolframheizungen](#) sorgt der hohe Schmelzpunkt von WS<sub>2</sub> für Stabilität bei Hochtemperatur-Verdampfungsprozessen und bildet durch thermische Verdampfung gleichmäßige Beschichtungen mit einer Temperaturbeständigkeit von bis zu 1200 °C. In [der Wolframtechnologie](#) unterstützt der hohe Schmelzpunkt von WS<sub>2</sub> auch den Einsatz in Hochtemperatursensoren, wie z. B. Schutzbeschichtungen in Industrieöfen, wodurch die Lebensdauer der Anlagen verlängert wird.

#### 2.1.3.2 Zersetzungstemperatur

An der Luft zersetzt sich WS<sub>2</sub> bei etwa 650 °C und durchläuft eine Oxidationsreaktion:  $2WS_2 + 7O_2 \rightarrow 2WO_3 + 4SO_2 \uparrow$ . Die thermogravimetrische Analyse (TGA) bestätigt, dass die Temperatur zu Beginn der Zersetzung mit der Sauerstoffkonzentration und der Heizrate variiert, beginnend bei etwa 510 °C bei einer Heizrate von 10 °C/min und bis zur Oxidation bei 650 °C. Im Vakuum oder in inerten Atmosphären bleibt WS<sub>2</sub> bis zu 1250 °C stabil, mit nur geringer Schwefelverflüchtigung (<0,1 %/h bei 800 °C). Diese

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

thermische Stabilität übertrifft die von Graphit (oxidiert bei 400 °C) und ist daher ideal für Vakuumumgebungen in der Luft- und Raumfahrt, wie z. B. Satellitenmechanismen. Auf dem [Wolframmarkt](#) wird WS<sub>2</sub> beispielsweise in Gleitkomponenten von Vakuumpumpen verwendet, wo seine hohe Zersetzungstemperatur eine langfristige Leistung ohne Verschlechterung gewährleistet.

Das bei der Zersetzung entstehende SO<sub>2</sub>-Gas erfordert eine sachgemäße Handhabung, um Umweltverschmutzung zu vermeiden. In der industriellen Produktion wandeln Sulfidabscheidungsanlagen (z. B. CaO-Absorption) SO<sub>2</sub> in CaSO<sub>4</sub> um, wodurch die Emissionskonzentrationen auf unter 10 ppm reduziert und Umweltstandards erfüllt werden. Solche Maßnahmen werden in der WS<sub>2</sub>-Produktion von [CTIA GROUP LTD in großem Umfang umgesetzt](#), um die Nachhaltigkeit von Hochtemperatur-Zersetzungsprozessen zu gewährleisten. Thermodynamische Berechnungen zeigen, dass die freie Gibbs-Energie ( $\Delta G$ ) der WS<sub>2</sub>-Zerlegung bei 650 °C negativ wird, was auf die Spontaneität der Reaktion hinweist und die Genauigkeit ihrer Zersetzungstemperatur weiter bestätigt.

### 2.1.3.3 Thermischer Ausdehnungskoeffizient

Der Wärmeausdehnungskoeffizient von WS<sub>2</sub> weist eine Anisotropie auf. In der Ebene (a-Achse) beträgt sie etwa  $6,5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ , während sie entlang der c-Achse (Richtung zwischen den Schichten) etwa  $2,3 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  beträgt, gemessen durch Hochtemperatur-XRD. Diese Werte deuten auf eine minimale Ausdehnung in der Ebene bei hohen Temperaturen hin, mit einer ausgeprägteren Ausdehnung zwischen den Schichten aufgrund starker kovalenter Bindungen innerhalb der Schicht und schwacher Van-der-Waals-Kräfte zwischen den Schichten. Im Vergleich zu [Wolframmetall](#) ( $4,5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ) ist die anisotrope Wärmeausdehnung von WS<sub>2</sub> komplexer und erfordert die Berücksichtigung der thermischen Spannungsanpassung bei Beschichtungsdesigns. Wenn sie beispielsweise mit [Wolfram-Kupfer compoundiert werden](#), kann die Ausdehnung der c-Achse von WS<sub>2</sub>-Beschichtungen Grenzflächenspannungen verursachen, die durch Zugabe von Pufferschichten (z. B. MoS<sub>2</sub>) gemildert werden können.

Der niedrige Wärmeausdehnungskoeffizient sorgt für Dimensionsstabilität in Präzisionsmaschinen. Bei der Herstellung von [Wolframnadeln](#) weisen WS<sub>2</sub>-Beschichtungen beispielsweise eine Ausdehnungsrate von weniger als 0,01 % bei 500 °C auf, wobei die Spitzenpräzision erhalten bleibt. Die thermisch-mechanische Analyse (TMA) zeigt, dass das Wärmeausdehnungsverhalten von WS<sub>2</sub> von 300 bis 600 °C linear ist, wobei die Ausdehnungsrate der c-Achse mit steigender Temperatur leicht auf  $2,5 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$  ansteigt, was geringfügige Änderungen des Zwischenschichtabstands widerspiegelt. Diese Eigenschaft macht WS<sub>2</sub> zu einem herausragenden Produkt in optischen Hochtemperaturgeräten (z. B. Infrarot-Linsenbeschichtungen) und bietet eine bessere Anpassung der Wärmeausdehnung als herkömmliche Materialien wie SiO<sub>2</sub> ( $1,0 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ).

### 2.1.4 Reibungskoeffizient und Schmierleistung

Der niedrige Reibungskoeffizient und die hervorragende Schmierleistung von WS<sub>2</sub> sind seine Hauptvorteile als Festschmierstoff, der in der Mechanik, Luft- und Raumfahrt und

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

Automobilindustrie weit verbreitet ist.

#### 2.1.4.1 Niedriger Reibungskoeffizient

WS<sub>2</sub> weist einen Reibungskoeffizienten von 0,03 bis 0,09 auf, der gemäß den Normen ASTM D1894 unter trockenen, ölfreien Bedingungen gemessen wird. Dieser niedrige Wert ist auf schwache Van-der-Waals-Kräfte zwischen den Schichten zurückzuführen, die zu einem minimalen Scherwiderstand beim Gleiten führen. Im Vergleich zu MoS<sub>2</sub> (0,04-0,1) ist der Reibungskoeffizient von WS<sub>2</sub> insbesondere in Vakuumumgebungen (<0,05) aufgrund seiner geringeren Feuchtigkeitsempfindlichkeit etwas niedriger. Reibungstests mit Bolzen auf der Scheibe zeigen, dass WS<sub>2</sub> den Reibungskoeffizienten im Stahl-auf-Stahl-Kontakt von 0,7 auf 0,05 reduziert, was einer Reduzierung von 93 % entspricht. Molekulardynamik-Simulationen (MD) bestätigen diese geringe Reibung und zeigen eine Scherkraft zwischen den Schichten von nur 0,1-0,2 N/m<sup>2</sup>, was mit experimentellen Daten übereinstimmt.

Dieser niedrige Reibungskoeffizient ermöglicht es WS<sub>2</sub>, herkömmliche Schmierstoffe in Lagern und Getrieben zu ersetzen. Auf dem [Wolframmarkt](#) beispielsweise reduziert WS<sub>2</sub>-Pulver, das Hochgeschwindigkeits-Lagerfett zugesetzt wird, den Reibungskoeffizienten um 80 % im Vergleich zu nicht zugesetztem Fett und senkt die Betriebstemperaturen um 20 °C. Praxistests zeigen, dass WS<sub>2</sub>-Beschichtungen bei 500 °C einen Reibungskoeffizienten von 0,07 beibehalten und damit Graphit (>0,2) übertreffen. In [der Produktlinie von CTIA GROUP LTD in China](#) wurden WS<sub>2</sub>-Schmierstoffe von der NASA für ihre geringe Reibungsleistung zertifiziert und in gleitenden Komponenten von Raumfahrzeugen verwendet, um Vakuum- und Hochtemperaturanforderungen zu erfüllen.

#### 2.1.4.2 Reibungsstabilität unter Temperatur und Druck

Der Reibungskoeffizient von WS<sub>2</sub> bleibt über einen weiten Temperaturbereich (-200 °C bis 650 °C) stabil, mit einer noch besseren Leistung im Vakuum oder in inerten Atmosphären. Bei 500 °C steigt es aufgrund einer geringen Oberflächenoxidation leicht auf 0,07 an, bleibt aber im Vakuum bei 0,03. Vier-Kugel-Reibungstests zeigen, dass seine Schichtstruktur unter hohem Druck (>1 GPa) wirksam bleibt, wobei der Reibungskoeffizient nur auf 0,1 ansteigt, weit unter den 0,5-0,8 des Metall-auf-Metall-Kontakts. Im Gegensatz zu [Wolfram-Eisen](#), das zusätzliche Schmierstoffe benötigt, arbeitet WS<sub>2</sub> auch ohne diese unter extremen Bedingungen zuverlässig.

Diese Stabilität zeichnet sich durch Triebwerke und Tiefseeausrüstung in der Luft- und Raumfahrt aus. In Gleitkomponenten für Turbinenschaufeln halten WS<sub>2</sub>-Beschichtungen beispielsweise einen Reibungskoeffizienten von 0,08 bei 600 °C und 2 GPa bei einer Verschleißrate von <0,01 mm<sup>3</sup>/N·m. Hochtemperatur-Reibungstests (ASTM G99) zeigen, dass die Reibungsstabilität von WS<sub>2</sub> bei 300 °C die von MoS<sub>2</sub> (die auf 0,15 ansteigt) aufgrund seiner überlegenen thermischen Stabilität übertrifft (siehe 2.1.3.1). In [der Wolframtechnologie](#) halten WS<sub>2</sub>-Beschichtungen in Tiefseehydrauliksystemen einen Reibungskoeffizienten von unter 0,1 bei Drücken von bis zu 3 GPa, wodurch die Lebensdauer der Ausrüstung um 50 % verlängert wird.

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

### 2.1.4.3 Einfluss der Gleitgeschwindigkeit auf die Reibung

Die Gleitgeschwindigkeit hat nur einen minimalen Einfluss auf den Reibungskoeffizienten von WS<sub>2</sub> und schwankt zwischen 0,03 und 0,06 über einen Bereich von 0,01 bis 10 m/s, gemessen mit Hochgeschwindigkeits-Reibungsmessgeräten. Bei niedrigen Geschwindigkeiten (<0,1 m/s) ist das Gleiten der Zwischenschicht gleichmäßig, was zu einer minimalen Reibung von 0,03 führt. Bei hohen Geschwindigkeiten (>5 m/s) steigt er bei leichtem Verschleiß auf 0,06 und damit immer noch weit unter den Metall-auf-Metall-Werten von 0,5 bis 0,8. Die Reibungsdynamikanalyse zeigt eine schwache positive Korrelation zwischen Reibungskoeffizient und Geschwindigkeit (Korrelationskoeffizient <0,1), was auf eine starke Anpassungsfähigkeit an die Drehzahl hinweist.

Durch diese Eigenschaft eignet sich WS<sub>2</sub> sowohl für schnelllaufende rotierende Maschinen (z. B. Turbinen) als auch für schwerlaufende Geräte mit niedriger Drehzahl (z. B. Pressen). In Kurbelwellen von Automotoren halten WS<sub>2</sub>-Beschichtungen beispielsweise einen Reibungskoeffizienten von 0,05 bei 3000 U/min (ca. 5 m/s) aufrecht, wodurch die Verschleißraten um 60 % reduziert werden. In [der Wolframforschung](#) wird die Hochgeschwindigkeitsstabilität von WS<sub>2</sub> in Ultrahochgeschwindigkeits-Lagertests genutzt, um einen Reibungskoeffizienten von unter 0,06 bei 10 m/s zu halten und damit Graphit (>0,2) zu übertreffen. Diese Anpassungsfähigkeit erhöht die Zuverlässigkeit von WS<sub>2</sub> in dynamischen Umgebungen und unterstreicht seine Bedeutung in [Wolframprodukten](#).

### 2.1.5 Härte und mechanische Festigkeit

Die Härte und mechanische Festigkeit von WS<sub>2</sub> stellen aufgrund seines Schichtaufbaus eine einzigartige Kombination aus Weichheit und Zähigkeit dar, die seine Leistung in verschleißfesten und tragenden Anwendungen beeinflusst.

#### 2.1.5.1 Mohs-Härte

WS<sub>2</sub> hat eine Mohs-Härte von 1-1,5, die mit Wolfram-Wolfram-Pulver übereinstimmt und deutlich niedriger ist als [Wolframkarbid-Pulver](#) (9-9,5). Diese Weichheit resultiert aus den schwachen Van-der-Waals-Kräften zwischen den Schichten, die das Peeling und Gleiten erleichtern. Kratztests bestätigen, dass WS<sub>2</sub>-Oberflächen mit einem Fingernagel markiert werden können, ihre Intralayer-Struktur jedoch intakt bleibt. Im Vergleich zu Graphit (1-2) ist die Härte von WS<sub>2</sub> etwas geringer, aber seine kovalente Bindungsstärke innerhalb der Schicht (400-500 kJ/mol) gewährleistet mikroskopische Stabilität. Aufgrund dieser geringen Härte ist es als eigenständiges, verschleißfestes Material ungeeignet, aber im Schmierkontext von Vorteil.

In der Praxis wird WS<sub>2</sub> häufig mit hochhärtenden Werkstoffen kombiniert. Wenn es beispielsweise mit [Wolframpulver](#) gemischt wird, um Verbundbeschichtungen herzustellen, steigt seine Mohs-Härte auf 5-6 bei gleichzeitig geringen Reibungseigenschaften. Nanoindentationstests zeigen, dass solche Komposite eine Oberflächenhärte von 5 GPa erreichen, die weit über den 0,5 GPa von reinem

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

WS<sub>2</sub> liegt. Auf dem [Wolframmarkt](#) wird die niedrige Mohs-Härte von WS<sub>2</sub> in Gleitbeschichtungen genutzt, wodurch die Verschleißraten des Getriebes auf 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m reduziert und die Lebensdauer um 40 % verlängert wird.

### 2.1.5.2 Druckfestigkeit

WS<sub>2</sub>-Beschichtungen weisen eine Druckfestigkeit von bis zu 2070 MPa (ca. 300.000 psi) auf, gemessen durch Nanoindentation. Die starken kovalenten W-S-Bindungen innerhalb der Schicht bieten eine hohe Druckfestigkeit, trotz leichter Scherung zwischen den Schichten. Unter hohem Druck (>1-2 GPa) behalten WS<sub>2</sub>-Schichten ihre strukturelle Integrität bei und übertreffen Graphit (<1000 MPa). Drucktests zeigen, dass WS<sub>2</sub> bulk bei 500 °C eine Druckfestigkeit von über 1800 MPa beibehält, was seine Stabilität bei hohen Temperaturen unter Beweis stellt. Diese Eigenschaft macht es zu einem hervorragenden Beschichtungsmaterial für Hochleistungslager und Hydrauliksysteme.

In der Luft- und Raumfahrt verhindert die hohe Druckfestigkeit von WS<sub>2</sub>-Beschichtungen ein Versagen bei hohen Belastungen. In der [Wolframtechnologie](#) wird WS<sub>2</sub> beispielsweise auf Flugzeugfahrwerkslager aufgebracht, die Lasten von 2 GPa mit einem Reibungskoeffizienten unter 0,1 aufnehmen. Im Vergleich zu [Wolfram-Eisen](#) ist WS<sub>2</sub> leichter, mit einer halb so hohen Dichte wie Wolfram-Eisen (7,5 vs. 15 g/cm<sup>3</sup>), wodurch das Strukturgewicht um 10-15 % reduziert wird. Praktische Tests zeigen, dass WS<sub>2</sub>-Beschichtungen nach 1000 Zyklen eine Verformung von weniger als 0,01 % aufweisen, was ihre Haltbarkeit beweist.

### 2.1.5.3 Scherfestigkeit und Verschleißfestigkeit

Die Scherfestigkeit von WS<sub>2</sub> ist gering und liegt zwischen 20 und 50 MPa, was auf schwache Zwischenschichtkräfte zurückzuführen ist, die durch Schertests gemessen werden. Unter Schmierbedingungen ist seine Verschleißfestigkeit jedoch bemerkenswert, da Verschleißtests (ASTM G99) eine Verschleißrate von nur 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m auf Stahloberflächen zeigen, verglichen mit 0,5 mm<sup>3</sup>/N·m bei unbeschichtetem Stahl. Diese Verschleißfestigkeit beruht auf dem Gleiten der Zwischenschicht, das Reibungsenergie absorbiert und Oberflächenschäden minimiert. Im Vergleich zu MoS<sub>2</sub> zeichnet sich WS<sub>2</sub> durch eine höhere thermische Stabilität aus.

In schnelllaufenden Getrieben und Beschichtungen von Schneidwerkzeugen verlängert die Kombination aus geringer Scherfestigkeit und hoher Verschleißfestigkeit die Lebensdauer von WS<sub>2</sub>. [Bei Wolframprodukten](#) beispielsweise weisen WS<sub>2</sub>-beschichtete Zahnräder, die 1000 Stunden lang mit 3000 U/min betrieben werden, Verschleißtiefen von unter 5 µm auf, was die Lebensdauer um 50 % erhöht. REM-Beobachtungen zeigen, dass die Beschichtung nach dem Verschleiß ihre Schichtstruktur beibehält, ohne dass es zu nennenswerten Abplatzungen kommt. Bei [den Werkzeugbeschichtungen von CTIA GROUP LTD in China](#) steigert die Verschleißfestigkeit von WS<sub>2</sub> die Schnitteffizienz um 30 %, da die geringe Scherfestigkeit die Haftung zwischen Werkzeugen und Werkstücken verringert.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

## 2.2 Chemische Eigenschaften von Wolframdisulfid

Die chemischen Eigenschaften von Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) bestimmen seine Leistung in korrosiven Umgebungen und hochreaktiven Bedingungen und dienen als Grundlage für seine Anwendungen in der Katalyse, Schmierung, Energiespeicherung und darüber hinaus. Diese Eigenschaften umfassen Löslichkeit, Redoxverhalten, Korrosionsbeständigkeit und chemische Reaktionen bei hohen Temperaturen, die jeweils eng mit ihrer Schichtstruktur und der chemischen Natur der W-S-Bindung verknüpft sind. In diesem Abschnitt werden diese Eigenschaften eingehend untersucht, die Stabilität und Reaktivität von  $WS_2$  in chemischen Umgebungen anhand von experimentellen Daten, Reaktionsmechanismen und Anwendungsfallstudien erläutert und theoretische Unterstützung für seine industriellen und wissenschaftlichen Anwendungen geboten.

### 2.2.1 Löslichkeit

Die Löslichkeit von  $WS_2$  spiegelt seine chemische Inertheit wider und dient als Indikator für seine Stabilität in verschiedenen Umgebungen und wirkt sich direkt auf seine Langzeitleistung in Schmierstoffen, Beschichtungen und Katalysatoren aus.

#### 2.2.1.1 Unlöslich in Wasser, Alkohol und verdünnten Säuren

$WS_2$  ist in Wasser, Ethanol und verdünnten Säuren (z. B. 10 %  $H_2SO_4$ , 5 %  $HCl$ ) praktisch unlöslich und hat eine Löslichkeit von weniger als 0,01 g/100 ml, wie durch Tauchtests (25 °C, 24 Stunden) bestätigt wurde. Diese Unlöslichkeit beruht auf der hohen Stabilität seiner kovalenten W-S-Bindungen innerhalb der Schicht (Bindungsenergie 400-500 kJ/mol, siehe 1.1.1.1) und der geringen Reaktivität der Schwefelatome, wodurch eine chemische Bindungsspaltung oder Solvation in diesen Lösungsmitteln verhindert wird. Die Analyse der optischen Emissionsspektroskopie (ICP-OES) mit induktiv gekoppeltem Plasma nach 168 Stunden Eintauchen zeigt W- und S-Ionenkonzentrationen in der Lösung unter 0,1 ppm, was auf eine extrem niedrige Auflösungsrate hinweist. Im Vergleich zu Natriumwolframat (schwer wasserlöslich, Löslichkeit >100 g/100 mL) eignet sich  $WS_2$  aufgrund seiner chemischen Inertheit besser für den längeren Einsatz in rauen Umgebungen.

Diese Unlöslichkeit ist bei Schmierstoffanwendungen von großer Bedeutung. In Schutzbeschichtungen für Schiffsmaschinen weist beispielsweise  $WS_2$ , das 168 Stunden lang Meerwasser (3,5 %  $NaCl$ ) oder feuchten Bedingungen ausgesetzt ist, einen Massenverlust von weniger als 0,01 % auf, wie durch Korrosionstests (ISO 11845) nachgewiesen wurde. Seine Schichtstruktur verhindert das Eindringen von Wassermolekülen, mit einem Oberflächenkontaktwinkel von ca. 90° (gemessen mit einem Kontaktwinkel-Goniometer), was die Hydrophobie demonstriert. Diese Eigenschaft sorgt dafür, dass die Schmierleistung von  $WS_2$  auch unter nassen Bedingungen intakt bleibt, was die Lebensdauer verlängert. In Wolframprodukten unterstützt die Unlöslichkeit von  $WS_2$  die Verwendung als Additiv in wasserbasierten Schmierstoffen. Wenn es beispielsweise mit Wolframkunststoff gemischt wird, um wasserbeständige Verbundwerkstoffe herzustellen, verbessert sich seine Dispersionsstabilität um

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

30 % (bestimmt durch Sedimentationstests).

Aus Sicht des chemischen Mechanismus hängt die Unlöslichkeit von WS<sub>2</sub> mit seiner Oberflächenenergie und seinen Lösungsmittelwechselwirkungen zusammen. Molekulardynamik-Simulationen (MD) zeigen, dass die Adsorptionsenergie zwischen WS<sub>2</sub>-Oberflächen und Wassermolekülen nur 0,2 eV beträgt, weit unter der für die Auflösung erforderlichen Bindungsbruchenergie (>4 eV), was eher auf eine physikalische Adsorption als auf eine chemische Reaktion hindeutet. In verdünnten Säuren (pH 2-5) wird keine signifikante Korrosion der W-S-Bindung beobachtet, wobei die Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) bestätigte, dass die W<sup>4+</sup>- und S<sup>2-</sup>-Verhältnisse der Oberfläche unverändert bleiben. Diese Unlöslichkeit ermöglicht es WS<sub>2</sub>, die Leistung in sauren industriellen Abgasumgebungen (z. B. SO<sub>2</sub>-haltig) aufrechtzuerhalten, wie z. B. in Rohrleitungsbeschichtungen von Chemieanlagen, wo Säurebeständigkeitstests (168 Stunden, 10 % H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) einen Massenverlust von weniger als 0,005 % zeigen.

### 2.2.1.2 Löslich in Königswasser und geschmolzenem Alkali

WS<sub>2</sub> löst sich in stark oxidierenden Lösungsmitteln wie Königswasser (HNO<sub>3</sub>:HCl = 1:3) und geschmolzenem Alkali (z.B. g., NaOH, >300°C), mit folgenden Reaktionen: WS<sub>2</sub>+4HNO<sub>3</sub>+12HCl→H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>WO<sub>4</sub> ↓+2H<sub>2</sub>S↑+4NO<sub>2</sub>↑+8H<sub>2</sub>O WS<sub>2</sub> + 4HNO<sub>3</sub> + 12HCl → H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>↓ + 2H<sub>2</sub>S↑ + 4NO<sub>2</sub>↑ + 8H<sub>2</sub>O  
WS<sub>2</sub>+4HNO<sub>3</sub>+12HCl→H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>↓+2H<sub>2</sub>S↑+4NO<sub>2</sub>↑+8H<sub>2</sub>O WS<sub>2</sub>+6NaOH→Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>+2Na<sub>2</sub>S+3H<sub>2</sub>O  
2O WS<sub>2</sub> + 6NaOH → Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> + 2Na<sub>2</sub>S + 3H<sub>2</sub>O WS<sub>2</sub>+6NaOH→Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>+2Na<sub>2</sub>S+3H<sub>2</sub>O

In Königswasser bricht die starke oxidierende Wirkung von HNO<sub>3</sub> die W-S-Bindungen auf, wodurch unlösliche Wolframsäure (H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) und gasförmige Nebenprodukte (z. B. H<sub>2</sub>S und NO<sub>2</sub>) entstehen, mit einer Auflösungsrate von etwa 0,1 g/min bei 25 °C (gemessen durch Massenverlust). Geschmolzenes Alkali (z. B. NaOH bei 400 °C) wandelt WS<sub>2</sub> in lösliches Wolframat (Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) und Natriumsulfid (Na<sub>2</sub>S) um, mit einer schnelleren Auflösungsrate (>1 g/min) aufgrund hoher Temperaturen, die die Spaltung der Bindung beschleunigen. Die ICP-OES-Analyse zeigt, dass die Lösung nach der Auflösung in Königswasser 500 ppm W enthält, wobei S als H<sub>2</sub>S entweicht; in geschmolzenem Alkali liegen W und S als Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> bzw. Na<sub>2</sub>S vor, mit Konzentrationen gelöster Stoffe von mehr als 10 g/L.

Diese Löslichkeit wird zur Analyse der WS<sub>2</sub>-Reinheit oder zur Rückgewinnung von Wolframressourcen verwendet. In der Wolframforschung wird beispielsweise die Königswasserlösung eingesetzt, um den Gehalt an Verunreinigungen (z. B. Fe, Si) in WS<sub>2</sub>-Proben zu messen und Rückstände nach der Auflösung zu analysieren, um eine Reinheitsgenauigkeit von 99,99 % zu erreichen. Beim industriellen Recycling werden aus geschmolzenem NaOH WS<sub>2</sub>-Abfälle verarbeitet und in Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> umgewandelt, das dann zu Wolframsäure angesäuert wird, wodurch eine Rückgewinnungsrate von über 90 % erreicht wird. Diese Löslichkeit schränkt die direkte Verwendung von WS<sub>2</sub> in Umgebungen mit starken Säure-Base-Werten ein, z. B. zur Vermeidung des Kontakts mit geschmolzenem Alkali in chemischen Reaktoren, erleichtert jedoch die chemische Verarbeitung unter bestimmten Bedingungen. Der Recyclingprozess von CTIA

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

GROUP LTD verwendet beispielsweise geschmolzenes Alkali, um WS<sub>2</sub>-Abfälle in hochwertige Wolframverbindungen mit einer jährlichen Verarbeitungskapazität von 100 Tonnen umzuwandeln.

### 2.2.1.3 Analyse der Bedingungen für Löslichkeitstests

Löslichkeitstests für WS<sub>2</sub> werden in der Regel bei Temperaturen von 25-100 °C und pH-Werten von 1-14 durchgeführt und zeigen Stabilität in Lösungen mit einem pH-Wert von 2-12 mit Löslichkeitsänderungen unter 0,005 g/100 ml. In neutralem Wasser (pH 7, 25 °C) beträgt die Löslichkeit nach 168 Stunden Eintauchen weniger als 0,001 g/100 ml, ohne nachweisbare W- oder S-Ionen mittels Massenspektrometrie mit induktiv gekoppeltem Plasma (ICP-MS). Unter sauren Bedingungen (pH 1-5, z. B. 10 % H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>) steigt die Löslichkeit leicht auf 0,01 g/100 mL an, bleibt aber vernachlässigbar, was auf Säurebeständigkeit hinweist. Unter alkalischen Bedingungen (pH 9-12, z. B. 1 M NaOH, 25 °C) liegt die Löslichkeit unter 0,005 g/100 mL und steigt nur im geschmolzenen Zustand (>300 °C) signifikant an. Löslichkeitstests zeigen, dass sich die WS<sub>2</sub>-Oxidation bei hohen Temperaturen (>80 °C) und bei starken Oxidationsmitteln (z. B. 30 % H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) beschleunigt und WO<sub>3</sub> bildet, wobei die Löslichkeit auf 0,05 g/100 ml ansteigt.

Die Vielfalt der Testbedingungen bietet Datenunterstützung für die Anpassungsfähigkeit von WS<sub>2</sub> an die Umgebung. In der Wolframtechnologie weisen beispielsweise WS<sub>2</sub>-Beschichtungen in industriellen Abwasserumgebungen (pH 2-12) nach 1000 Stunden Eintauchen einen Massenverlust von weniger als 0,01 % auf, was die Haltbarkeit beweist. Elektrochemische Tests zeigen ein Korrosionspotenzial von -0,1 V (vs. SCE) in 10%iger NaCl-Lösung, was auf eine hohe Inertheit hinweist. Bei hohen Temperaturen und hoher Luftfeuchtigkeit (80 °C, relative Luftfeuchtigkeit 95 %) können WS<sub>2</sub>-Oberflächen Wassermoleküle adsorbieren, wodurch die Löslichkeit leicht auf 0,02 g/100 ml erhöht wird, die Gesamtstabilität jedoch nicht beeinträchtigt wird. Dieses Löslichkeitsprofil leitet den Einsatz von WS<sub>2</sub> in chemischen Geräten, wie z. B. korrosionsbeständigen Beschichtungen in Pipelines mit sauren Gasen, die Temperaturen von bis zu 500 °C standhalten und nach 1000 Stunden keine signifikante Korrosion aufweisen (ASTM B117-Test).

### 2.2.2 Redox-Verhalten

Das Redoxverhalten von WS<sub>2</sub> bestimmt seine Stabilität in Sauerstoff oder anderen chemischen Umgebungen, ein Schlüsselfaktor für seine Hochtemperaturanwendungen und seine katalytische Leistung.

#### 2.2.2.1 Reaktionsmechanismus der Hochtemperaturoxidation zu WO<sub>3</sub>

An der Luft oxidiert WS<sub>2</sub> bei 650 °C zu WO<sub>3</sub> mit der Reaktion:  $2WS_2 + 7O_2 \rightarrow 2WO_3 + 4SO_2 \uparrow$  Die Reaktion verläuft in zwei Stufen: Bei etwa 510 °C oxidieren die Schwefelatome an der Oberfläche zu SO<sub>2</sub>; von 550-650°C oxidieren Wolframatomte vollständig zu WO<sub>3</sub>. Die XPS-Analyse zeigt einen anfänglichen W<sup>4+</sup>-Zwischenzustand (z. B. WS<sub>2-x</sub>O<sub>x</sub>), der in W<sup>6+</sup> (WO<sub>3</sub>) übergeht. Die thermogravimetrische Analyse

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

(TGA) zeigt, dass die Reaktionsgeschwindigkeit mit dem Sauerstoffpartialdruck zunimmt und bei 600°C an Luft (0,21 atm) 0,05 g/min erreicht. Die dynamische Differenzkalorimetrie (DSC) zeigt eine Enthalpieänderung ( $\Delta H$ ) von etwa -900 kJ/mol an, was auf einen stark exothermen Prozess hinweist. REM-Beobachtungen zeigen, dass WS<sub>2</sub>-Oberflächen nach der Oxidation eine poröse WO<sub>3</sub>-Schicht bilden, die etwa 1-2 µm dick ist und die weitere Sauerstoffdiffusion behindert.

Dieser Oxidationsmechanismus schränkt den Einsatz von WS<sub>2</sub> in oxidierenden Hochtemperaturumgebungen ein, aber seine Stabilität unter 500 °C reicht für industrielle Szenarien aus. Auf dem [Wolframmarkt](#) weisen beispielsweise WS<sub>2</sub>-Beschichtungen in Triebwerken in der Luft- und Raumfahrt, die 1000 Stunden lang bei 400 °C betrieben werden, eine Oxidationsschichtdicke von weniger als 0,1 µm auf, ohne dass es zu einem signifikanten Leistungsabfall kommt. Die kinetische Analyse zeigt ein parabolisches Geschwindigkeitsgesetz mit einer Geschwindigkeitskonstante (k) von 0,02 min<sup>-1</sup> bei 600°C, die exponentiell mit der Temperatur ansteigt (Aktivierungsenergie ~150 kJ/mol). Dieser Mechanismus bildet die Grundlage für die Verbesserung der Oxidationsbeständigkeit der WS<sub>2</sub>-Beschichtung, z. B. durch das Hinzufügen einer SiO<sub>2</sub>-Schutzschicht, um die Oxidationseintrittstemperatur auf 700 °C zu erhöhen.

#### 2.2.2.2 Stabilität unter reduzierenden Bedingungen

In reduzierenden Atmosphären (z. B. H<sub>2</sub> oder CO) bleibt WS<sub>2</sub> bis zu 1000 °C stabil, bei minimalem Schwefelverlust:  $WS_2 + H_2 \rightarrow W + H_2S \uparrow$ . Diese Reaktion ist unterhalb von 900 °C extrem langsam, mit einer Schwefelverlustrate von weniger als 0,1 %/h (800 °C, H<sub>2</sub>-Strömung), gemessen von TGA. Oberhalb von 1000 °C steigt die Schwefelverflüchtigung leicht auf 0,5 %/h an, die Struktur bleibt jedoch intakt. Die Hochtemperatur-XRD-Analyse zeigt keine Umwandlung in [Wolframmetall](#) in H<sub>2</sub>, wobei die Peakposition (002) unverändert bleibt, was die reduktive Stabilität bestätigt. Diese Eigenschaft zeichnet sich durch reduktive katalytische Umgebungen (z. B. Hydrodesulfurierung) aus und übertrifft organische Schmierstoffe, die sich unter 300 °C zersetzen.

In petrochemischen Anwendungen dient WS<sub>2</sub> als Hydrodesulfurierungskatalysator, der 1000 Stunden lang in H<sub>2</sub> (500 °C, 10 bar) mit weniger als 5 % Aktivitätsverlust betrieben wird, validiert durch katalytische Leistungstests (ASTM D5185). Die Schichtstruktur bleibt auch unter reduzierenden Bedingungen intakt, wobei das REM keine nennenswerten Oberflächenrisse aufweist. In [der Wolframforschung](#) wird die reduktive Stabilität von WS<sub>2</sub> in Hochtemperatur-Gassensoren wie der H<sub>2</sub>-Detektion mit Widerstandsänderungen von weniger als 1 %/1000 Stunden genutzt, was eine langfristige Zuverlässigkeit demonstriert. Diese Stabilität unterstützt auch den Einsatz in der Hochtemperatur-Vakuumschmierung, wie z. B. bei [der Herstellung von Wolframheizungen](#), wo WS<sub>2</sub>-Beschichtungen stabil bei 1000 °C im Vakuum arbeiten.

#### 2.2.2.3 Oxidationsbeginn, Temperatur und Umwelteinflüsse

Die Oxidationseintrittstemperatur von WS<sub>2</sub> variiert mit der Umgebung, sie beträgt etwa 510 °C an Luft, sinkt bei 100 % Sauerstoffkonzentration auf 480 °C und zeigt bis zu 1250 °C in Stickstoff

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

keine signifikante Oxidation. DSC-Messungen zeigen, dass die Anfangstemperatur mit der Partikelgröße korreliert, wobei die nanoskalige WS<sub>2</sub> aufgrund der größeren Oberfläche etwas niedriger ist (~490 °C) als bei 510 °C für Bulk. Eine erhöhte Luftfeuchtigkeit (RH >80%) fördert die Oberflächenoxidation, insbesondere bei hohen Temperaturen, da Feuchtigkeit die SO<sub>2</sub>-Bildung beschleunigt. Die TGA-Analyse zeigt, dass bei 80 °C und 95 % relativer Luftfeuchtigkeit die Oxidationsraten der WS<sub>2</sub>-Oberfläche auf 0,01 %/h ansteigen und eine dünne WO<sub>3</sub>-Schicht bildet (<50 nm dick, REM-Messung).

Die Analyse von Umwelteinflüssen leitet die Lagerung und Verwendung von WS<sub>2</sub>. In Wolframprodukten muss WS<sub>2</sub>-Pulver beispielsweise unter trockenen Bedingungen (RH <50 %) verschlossen gelagert werden, um Oxidation in feuchten Umgebungen mit hohen Temperaturen zu vermeiden. In industriellen Anwendungen können WS<sub>2</sub>-Beschichtungen in sauerstoffhaltigen Atmosphären (20 % O<sub>2</sub>, 500 °C) die Oxidationseintrittstemperatur mit Antioxidantien (z. B. Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) auf 550 °C erhöhen. Praktische Tests zeigen, dass WS<sub>2</sub> in SO<sub>2</sub>-haltigen Abgasumgebungen (500 °C, 1000 Stunden) eine Oxidationsrate von unter 0,1 % aufweist, was seine Anpassungsfähigkeit an die Umwelt unterstreicht. Diese Eigenschaft macht WS<sub>2</sub> als Hochtemperaturbeschichtung in chemischen Anlagen geeignet und erfüllt vielfältige Umweltauflagen.

## 2.2.3 Korrosionsbeständigkeit und chemische Inertheit

Die Korrosionsbeständigkeit und chemische Inertheit von WS<sub>2</sub> gewährleisten seine Leistung in rauen chemischen Umgebungen und wirken sich direkt auf seine Langzeitstabilität als Schmiermittel, Beschichtung und Katalysator aus. Diese Eigenschaften ergeben sich aus seiner einzigartigen Struktur aus starken kovalenten Intralayer-Bindungen und schwachen Van-der-Waals-Kräften zwischen den Schichten, die eine außergewöhnliche Beständigkeit gegen saure, alkalische und verschiedene chemische Angriffe ermöglichen. In diesem Unterabschnitt werden die Leistung von WS<sub>2</sub> in sauren Umgebungen, die Stabilität unter alkalischen Bedingungen und die Anwendungen bei der Beständigkeit gegen chemische Erosion untersucht, unterstützt durch experimentelle Daten, mechanistische Analysen und Beispiele aus der Praxis, die seine chemische Stabilität vollständig aufzeigen.

### 2.2.3.1 Verhalten in saurer Umgebung

WS<sub>2</sub> weist eine hervorragende Korrosionsbeständigkeit in sauren Umgebungen auf. Nach 168 Stunden Eintauchen in Lösungen mit einem Wert von pH 1-5 (z. B. 10 % H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, 5 % HCl) beträgt der Massenverlust weniger als 0,01 %, wie durch Korrosionstests (ISO 11845) ermittelt. Diese Säurebeständigkeit wird auf die hohe Bindungsenergie von kovalenten W-S-Bindungen innerhalb der Schicht (400-500 kJ/mol, siehe 1.1.1.1) und die geringe Reaktivität der Schwefelatome zurückgeführt, wodurch sie resistent gegen saure Angriffe sind. Die ICP-OES-Analyse zeigt W- und S-Ionenkonzentrationen in der Lösung unter 0,1 ppm, was auf eine vernachlässigbare Auflösung hinweist. Im Vergleich zu Silber-Wolfram (Massenverlust >5 % in 10 % H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> über 168 Stunden) ist die Säurebeständigkeit von WS<sub>2</sub> deutlich überlegen.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

In Umgebungen mit sauren Gasen (z. B.  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{SO}_2$ ) bleibt  $\text{WS}_2$  stabil. Expositionstests ( $25^\circ\text{C}$ , 10%  $\text{H}_2\text{S}$ , 1000 Stunden) zeigen keine sichtbaren Oberflächenveränderungen, wobei das REM eine intakte Schichtstruktur ohne Korrosionsgruben oder Risse bestätigt. Die XPS-Analyse zeigt konsistente  $\text{W}^{4+}$ - und  $\text{S}^{2-}$ -Verhältnisse ohne Oxid- oder Sulfidbildung. Diese Säurebeständigkeit zeichnet sich durch chemische Anlagen aus, wie z. B. Pipeline-Beschichtungen in der Schwefelsäureproduktion, wo  $\text{WS}_2$  einen Massenverlust von weniger als 0,005 % in 10 %  $\text{H}_2\text{SO}_4$ -Dampf ( $80^\circ\text{C}$ , 1000 Stunden) aufweist, was durch Salzsprühtests (ASTM B117) validiert wurde. Im Vergleich zu  $\text{MoS}_2$  (0,1 % Massenverlust in  $\text{H}_2\text{S}$ ) erhöht die stärkere W-S-Bindung von  $\text{WS}_2$  seine chemische Inertheit.

Mechanistisch hängt die Säurebeständigkeit von  $\text{WS}_2$  mit seiner hydrophoben Oberfläche zusammen. Die Messungen des Kontaktwinkels zeigen einen Oberflächenwinkel von ca.  $90^\circ$ , wodurch das Eindringen der sauren Lösung zwischen den Schichten verhindert wird. MD-Simulationen zeigen eine Adsorptionsenergie von sauren Molekülen (z.B.  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) auf  $\text{WS}_2$ -Oberflächen von nur 0,3 eV, weit unter der bindungsbrechenden Energie ( $>4$  eV), was auf eine physikalische Adsorptionsdominanz hinweist. Bei [Wolframprodukten](#) wird die Säurebeständigkeit von  $\text{WS}_2$  in Säurebeizanlagen genutzt. Bei den chemischen Beschichtungen von CTIA GROUP LTD arbeitet  $\text{WS}_2$  beispielsweise 1000 Stunden lang in Umgebungen mit einem pH-Wert von 2 mit einer Verschleißrate von unter  $0,01 \text{ mm}^3/\text{N}\cdot\text{m}$ , wodurch die Lebensdauer der Anlage um 50 % verlängert wird.

### 2.2.3.2 Stabilität in alkalischer Umgebung

$\text{WS}_2$  zeigt auch in alkalischen Umgebungen eine hohe Stabilität. Nach 168 Stunden Eintauchen in Lösungen mit einem pH-Wert von 9-12 (z. B. 1 M  $\text{NaOH}$ ,  $25^\circ\text{C}$ ) beträgt sein Massenverlust weniger als 0,005 %, gemessen durch Korrosionstests. Diese Stabilität beruht auf der Robustheit kovalenter Bindungen innerhalb der Schicht, die chemische Reaktionen mit  $\text{OH}^-$ -Ionen verhindern. Die ICP-OES-Analyse zeigt W- und S-Ionenkonzentrationen unter 0,05 ppm, was auf eine vernachlässigbare Auflösung hinweist. In geschmolzenem Hochtemperaturalkali (z. B.  $\text{NaOH}$ ,  $>300^\circ\text{C}$ ) zerfällt  $\text{WS}_2$  jedoch in Wolframat ( $\text{Na}_2\text{WO}_4$ ) und Natriumsulfid ( $\text{Na}_2\text{S}$ , siehe 2.2.1.2), mit einer Auflösungsrate von mehr als 1 g/min aufgrund des beschleunigten Bindungsbruchs.

Bei alkalischen Umgebungsbedingungen unterstützt die Stabilität von  $\text{WS}_2$  den Schutz der Batterieelektroden. In [der Wolframforschung](#) weisen beispielsweise  $\text{WS}_2$ -Beschichtungen in alkalischen Zinkbatterien (pH 11,  $25^\circ\text{C}$ ) nach 1000 Zyklen einen Massenverlust von unter 0,01 % auf, der durch elektrochemische Tests validiert wurde. REM-Beobachtungen zeigen kein Abblättern oder Korrosion, wobei der Zwischenlagenabstand stabil bei  $6,15 \text{ \AA}$  liegt (XRD-Messung). Im Vergleich zu [Wolfram-Kupfer](#) (0,5 % Massenverlust in 1 M  $\text{NaOH}$ ) ist die überlegene Alkalibeständigkeit von  $\text{WS}_2$  auf seine hydrophobe Oberfläche (Kontaktwinkel  $90^\circ$ ) zurückzuführen, die die  $\text{OH}^-$ -Adsorption reduziert.

Elektrochemische Tests zeigen ein Korrosionspotenzial von  $-0,1 \text{ V}$  (im Vergleich zu SCE) in alkalischen Umgebungen, das höher ist als die  $-0,2 \text{ V}$  von  $\text{MoS}_2$ , was auf eine größere Inertheit

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

hinweist. Bei alkalischen Hochtemperaturen (1 M NaOH, 100 °C) nimmt die Stabilität leicht ab, wobei der Massenverlust auf 0,02 % (168 Stunden) ansteigt, was immer noch weit unter den 1 % von Wolfram-Eisen liegt. Diese Eigenschaft ermöglicht den Einsatz von WS<sub>2</sub> als Elektrodenmaterial in alkalischen Elektrolyten, wie z. B. in den alkalischen Wasserelektrolyseanlagen der Wolframtechnologie, wo WS<sub>2</sub>-Beschichtungen 1000 Stunden lang bei pH 12 und 80 °C mit weniger als 5 % Leistungsabfall betrieben werden und so die Langzeitstabilität unterstützen.

### 2.2.3.3 Anwendungen zur Beständigkeit gegen chemische Erosion

Die Beständigkeit von WS<sub>2</sub> gegen chemische Erosion ermöglicht seinen weit verbreiteten Einsatz in rauen Umgebungen. In gemischten Säure-Base-Umgebungen (z. B. Kläranlagen, pH 4-10) zeigen WS<sub>2</sub>-Beschichtungen nach 1000 Stunden Eintauchen keine signifikante Korrosion, wobei das REM eine intakte Schichtstruktur und einen Massenverlust von unter 0,01 % bestätigt. In chloridhaltigen Umgebungen (z. B. Seewasserpumpen, 3,5 % NaCl) weisen WS<sub>2</sub>-Beschichtungen nach 1000-stündigen Salzsprühtests (ASTM B117) keine Lochfraßbildung oder Abplatzung auf und übertreffen damit Wolfram-Eisen (0,5 % Massenverlust). Die elektrochemische Impedanzspektroskopie (EIS) zeigt einen Impedanzwert von 10<sup>6</sup> Ω·cm<sup>2</sup> in 10% NaCl, was auf eine hohe Korrosionsbeständigkeit hinweist.

Aus Anwendungssicht hängt die Beständigkeit von WS<sub>2</sub> gegen chemische Erosion mit seinen Oberflächeneigenschaften und seiner strukturellen Stabilität zusammen. Die XPS-Analyse zeigt keine signifikante Oxidbildung in Säure-Base-Umgebungen, wobei die Zustände W<sup>4+</sup> und S<sup>2-</sup> beibehalten werden. In Wolframprodukten bleiben WS<sub>2</sub>-Beschichtungen in industriellen Rohrleitungen mit korrosiven Gasen (z. B. H<sub>2</sub>S-haltigem Erdgas) nach 1000 Stunden stabil und beweisen so die Zuverlässigkeit in komplexen chemischen Umgebungen.

### 2.2.4 Chemische Reaktionen bei hohen Temperaturen

Die chemischen Reaktionen von WS<sub>2</sub> bei hohen Temperaturen zeigen sein Verhalten unter extremen Bedingungen und beeinflussen direkt seine Anwendungen in der Hochtemperaturschmierung und Katalyse.

#### 2.2.4.1 Reaktionskinetik mit Sauerstoff

Die Reaktion von WS<sub>2</sub> mit Sauerstoff folgt der Kinetik erster Ordnung mit der Gleichung:  $2WS_2 + 7O_2 \rightarrow 2WO_3 + 4SO_2 \uparrow$ . Die Geschwindigkeitskonstante (k) bei 600 °C beträgt etwa 0,02 min<sup>-1</sup>, gemessen mit TGA, und steigt exponentiell mit der Temperatur an (Arrhenius-Gleichung, Aktivierungsenergie ~150 kJ/mol). Zu Beginn (510-550 °C) wird die Reaktion oberflächengesteuert, wobei die Geschwindigkeit durch die Sauerstoffdiffusion zur Oberfläche bestimmt wird. später (550-650 °C) wechselt es zur Diffusionskontrolle, da eine WO<sub>3</sub>-Schicht (1-2 µm dick, REM-Messung) das Eindringen von Sauerstoff behindert. DSC weist auf eine Enthalpieänderung (ΔH) von etwa -900 kJ/mol hin, was eine starke Exothermie widerspiegelt. Bei 100 % Sauerstoffkonzentration steigt die

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Reaktionsgeschwindigkeit auf 0,05 g/min bei 600 °C an, doppelt so hoch wie bei Luft (0,21 atm).

Dieses kinetische Profil muss bei der Konstruktion der Sprühbeschichtung berücksichtigt werden. In [der Wolframtechnologie](#) reduzieren beispielsweise WS<sub>2</sub>-Beschichtungen in Luft- und Raumfahrttriebwerken (500 °C, sauerstoffhaltige Atmosphäre) die Oxidationsraten mit Antioxidantien (z. B. SiO<sub>2</sub>) um 50 % und verlängern so die Lebensdauer auf 2000 Stunden. Tests zeigen, dass WS<sub>2</sub> in Industrieöfen mit 10 % O<sub>2</sub> (1000 Stunden) die Dicke der Oxidationsschicht auf unter 0,5 µm begrenzt, mit einer Leistungsminderung von unter 5 %. Kinetische Daten leiten auch den Einsatz in Hochtemperatur-Vakuumumgebungen, wie z. B. bei [der Herstellung von Wolframheizungen](#), wo WS<sub>2</sub> bei 1000 °C im Vakuum keine signifikante Oxidation aufweist, was die Stabilität gewährleistet.

#### 2.2.4.2 Wechselwirkungen mit Sulfiden

In Sulfidatmosphären (z. B. H<sub>2</sub>S) bleibt WS<sub>2</sub> bis zu 1000 °C stabil, ohne Zersetzung oder Umwandlung:  $WS_2 + H_2S \rightleftharpoons WS_2 + H_2S$  High-Temperatur-XRD deutet darauf hin, dass H<sub>2</sub>S Schwefelleerstellen reparieren kann (Vs, 5-10 % x XPS) und so die strukturelle Integrität verbessert. Unter 800 °C, 10 % H<sub>2</sub>S-Bedingungen für 1000 Stunden liegen die WS<sub>2</sub>-Massenänderungen unter 0,01 %, wie von der TGA verifiziert. Diese Stabilität hält die katalytische Aktivität in Sulfidumgebungen (z. B. Erdölentschwefelung) aufrecht, wobei WS<sub>2</sub>-Katalysatoren in der Hydroentschwefelung (500 °C, H<sub>2</sub>S/H<sub>2</sub>-Mischung) nach 1000 Stunden einen Aktivitätsverlust von weniger als 5 % aufweisen (ASTM D5185-Test).

In [der Wolframforschung](#) wird die Wechselwirkung von WS<sub>2</sub> mit H<sub>2</sub>S in Sulfidsensoren genutzt, wobei sich der Widerstand unter 1 %/1000 Stunden ändert und die Empfindlichkeit 10 ppm erreicht. REM zeigt keine Sulfidablagerungen auf WS<sub>2</sub>-Oberflächen in H<sub>2</sub>S, wodurch seine Schichtstruktur erhalten bleibt. Diese Stabilität unterstützt die Schmierung von Sulfidumgebungen bei hohen Temperaturen, wie z. B. in Gleitkomponenten von Erdgaspipelines, bei denen WS<sub>2</sub>-Beschichtungen unter H<sub>2</sub>S-haltigen Bedingungen (500 °C) nach 1000 Stunden einen Reibungskoeffizienten unter 0,1 halten.

#### 2.2.4.3 Analyse von Hochtemperatur-Zersetzungsprodukten

Die primären Hochtemperatur-Zersetzungsprodukte von WS<sub>2</sub> sind WO<sub>3</sub> und SO<sub>2</sub>, wobei im Vakuum eine geringe [Wolframmetallbildung](#) oberhalb von 1000 °C auftritt. Die Massenspektrometrie (MS) detektiert einen starken SO<sub>2</sub>-Peak bei 650 °C, was auf eine dominante Schwefelverflüchtigung hinweist; bei 1250 °C im Vakuum erscheint eine W-Spitze (<1%, XPS-Bestätigung). TGA zeigt einen Massenverlust von 33 % bei 650 °C in Luft (theoretisch 32,6 %, vollständige S-Verflüchtigung), verglichen mit <5 % bei 1250 °C im Vakuum. Das REM zeigt nach der Zerlegung eine poröse WO<sub>3</sub>-Struktur mit Porengrößen von 0,1-0,5 µm.

Diese Produktanalyse informiert über Recyclingprozesse. Auf dem [Wolframmarkt](#) werden WS<sub>2</sub>-Abfallbeschichtungen bei 700 °C zu WO<sub>3</sub> oxidiert und dann angesäuert, um Wolframsäure zu

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

erzeugen, wodurch eine Rückgewinnung von über 90 % erreicht wird. [Der Recyclingprozess von CTIA GROUP LTD](#) verarbeitet jährlich 100 Tonnen Abfall  $WS_2$ , absorbiert  $SO_2$  mit  $CaO$  zu  $CaSO_4$ , hält die Emissionen unter 10 ppm und erfüllt die Umweltstandards. In der Katalyse zeigt die Zersetzungsanalyse, wie sich die Aktivität von  $WS_2$  bei hohen Temperaturen ändert. Bei der Hydrodesulfurierung beispielsweise hat eine geringfügige Zersetzung bei 800 °C keinen Einfluss auf die Leistung, da die Aktivität über 95 % bleibt.

## 2.3 Elektrische und optische Eigenschaften von Wolframdisulfid

Die elektrischen und optischen Eigenschaften von  $WS_2$  sind der Eckpfeiler seiner entscheidenden Rolle in elektronischen Geräten, optoelektronischen Komponenten und optischen Anwendungen. Diese Eigenschaften variieren je nach Schichtanzahl, Kristallphase und äußeren Bedingungen (z. B. Temperatur, Dotierung) und reichen von der indirekten Bandlücke von Halbleitern von Schüttgütern bis hin zur hohen Photolumineszenzeffizienz der direkten Einschlitt-Bandlücke sowie hervorragenden optischen Absorptions- und Reflexionsfähigkeiten. In diesem Unterabschnitt werden die Leitfähigkeits- und Halbleitereigenschaften, die Bandlückeneigenschaften sowie die optischen Absorptions- und Reflexionseigenschaften gründlich untersucht, unterstützt durch detaillierte experimentelle Daten, theoretische Modelle, praktische Anwendungsfälle und Vergleiche mit anderen Materialien, wodurch die Vielfalt und das Potenzial von  $WS_2$  im elektrischen und optischen Bereich vollständig enthüllt werden.

### 2.3.1 Leitfähigkeit und Halbleitereigenschaften

Die Leitfähigkeit und die Halbleitereigenschaften von  $WS_2$  variieren mit der Schichtzahl und dem Polymorphismus und reichen von der indirekten Bandlücke von Bulkmaterial mit geringer Leitfähigkeit bis hin zur direkten Bandlücke einzelner Schichten mit hoher Mobilität, wobei eine weitere Optimierung durch Dotierung erfolgt, was seine breite Anwendbarkeit in elektronischen Geräten zeigt. In diesem Unterabschnitt werden die indirekte Bandlücke von Schüttgütern, die direkte Bandlücke einzelner Schichten und die Ladungsträgermobilität mit Dotierungseffekten analysiert, wobei experimentelle und theoretische Daten integriert werden, um die zugrunde liegenden Mechanismen seiner elektrischen Leistung aufzudecken.

#### 2.3.1.1 Indirekte Bandlücke von Schüttgut

Bulk  $WS_2$  (typischerweise 2H-Phase) besitzt eine indirekte Bandlücke von 1,3 eV, die mittels ultraviolett-sichtbarer Spektroskopie (UV-Vis) präzise gemessen wird, mit einer Absorptionskante bei etwa 950 nm. Diese indirekte Bandlücke erfordert eine Phononenunterstützung für den Elektronenübergang vom Valenzbandmaximum (hauptsächlich Schwefel-3p-Orbitale, am K-Punkt der Brillouin-Zone) zum Leitungsbandminimum (Wolfram-5d-Orbitale, am  $\Gamma$ -Punkt), was zu einer extrem niedrigen Photolumineszenzeffizienz mit einer Quantenausbeute von unter 0,1 % führt, wie durch PL-Spektroskopie verifiziert wurde. Berechnungen der Dichtefunktionaltheorie (DFT) bestätigen diese Eigenschaft und zeigen, dass die elektronische Kopplung zwischen den Schichten die Bandstruktur zerstreut, wobei die Überlappung zwischen den  $5d_{z^2}$ - und  $3p_z$  Schwefelorbitalen

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

von Wolfram und Schwefel eine breite indirekte Bandlücke bildet. Messungen mit vier Sonden zeigen, dass die Leitfähigkeit von WS<sub>2</sub> bei Raumtemperatur (300 K) zwischen 10<sup>1</sup> und 10<sup>2</sup> S/cm liegt, weit unter der von Metallen wie [Wolframmetall](#) (~10<sup>5</sup> S/cm), aber ausreichend für den Einsatz als Halbleiter in elektronischen Geräten.

Die indirekte Bandlücke von Bulk-WS<sub>2</sub> bietet aufgrund seiner geringen Wärmeleitfähigkeit (20-30 W/m·K) und seiner moderaten elektrischen Leitfähigkeit Potenzial in thermoelektrischen Materialien und unterstützt die Stromerzeugung bei Temperaturdifferenz. In [der Wolframforschung](#) wird WS<sub>2</sub> in großen Mengen zu thermoelektrischen Modulen verarbeitet, die einen Seebeck-Koeffizienten von ~100 µV/K bei 300 K erreichen, stabil bei ~90 µV/K bei 500 °C und eine thermoelektrische Gütezahl (ZT) von 0,5 erreichen und damit die 0,3 von MoS<sub>2</sub> übertreffen. Hall-Effekt-Tests zeigen eine Ladungsträgerkonzentration von ~10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>, überwiegend Elektronen, was auf das Verhalten von n-Typ-Halbleitern hinweist, mit einer Beweglichkeit von 10-20 cm<sup>2</sup>/V·s. Dies eignet sich für Geräte mit geringem Stromverbrauch, wie z. B. Gassensoren, die NH<sub>3</sub> bei 10 ppm mit einer Reaktionszeit von weniger als 5 Sekunden erkennen, und nutzt die indirekte Bandlücke für einen effizienten Trägertransport bei niedrigen Konzentrationen.

Die Leitfähigkeit von Bulk WS<sub>2</sub> steigt mit der Temperatur von 10<sup>2</sup> S/cm auf 10<sup>3</sup> S/cm zwischen 300 und 600 °C (Vier-Sonden-Methode mit variabler Temperatur), da thermisch angeregte Träger die Konzentration auf 10<sup>17</sup> cm<sup>-3</sup> erhöhen und bei intakter Struktur unter der Oxidationsschwelle von 650 °C (siehe 2.2.2.1) bleiben. Widerstandstests zeigen eine Änderungsrate von unter 1 %/1000 Stunden bei 500 °C, was die Stabilität bei hohen Temperaturen bestätigt. In [Wolframprodukten](#) dient WS<sub>2</sub> als leitfähige Beschichtung auf [Wolfram-Kupfer-Substraten](#), entspricht der Substratleitfähigkeit (~10<sup>4</sup> S/cm) und behält die Leistung in 400°C-Schaltkreisen für 1000 Stunden mit weniger als 2 % Degradation bei und übertrifft damit Graphit (5 % Degradation durch Oxidation).

### 2.3.1.2 Direkte Bandlücke einer einzelnen Schicht

Einschichtiges WS<sub>2</sub> weist eine direkte Bandlücke von 2,1 eV auf, gemessen durch PL-Spektroskopie, mit einem starken Emissionspeak bei 620 nm und einer Quantenausbeute von 5-10 %, die 100-mal höher ist als die <0,1 % von Bulk. Diese Verschiebung resultiert aus dem Quanteneinschluss, der die Kopplung zwischen den Schichten eliminiert und die Leitungs- und Valenzbänder am K-Punkt für direkte Übergänge ausrichtet. Die winkelaufgelöste Photoemissionsspektroskopie (ARPES) korreliert diese Bandlücke mit ihrer Dicke von 0,62 nm und begrenzt elektronische Zustände in zwei Dimensionen. Messungen mit vier Sonden zeigen einen Leitfähigkeitsbereich von 10<sup>2</sup>-10<sup>3</sup> S/cm, der aufgrund der direkten Bandlücke und der verbesserten Ladungsträgerbeweglichkeit über das Volumen hinausgeht (siehe 2.3.1.3).

Diese direkte Bandlücke bietet erhebliche Vorteile in optoelektronischen Bauelementen, wie z. B. Photodetektoren, bei denen Single-Layer-WS<sub>2</sub> eine Photoempfindlichkeit von 10<sup>3</sup> A/W bei 532 nm (5 V Bias) erreicht und damit die 10<sup>1</sup> A/W (Photostromtests) von Multilayer weit übertrifft. In [der Wolframtechnologie](#) wird es in flexiblen Fotosensoren verwendet, die eine schnelle Reaktion (<1

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

ms) über 400-1000 nm mit einer Empfindlichkeit von  $0,1 \mu\text{W}/\text{cm}^2$  unterstützen. FET-Tests zeigen ein Schaltverhältnis von  $10^6$ , das aufgrund der verbesserten Effizienz der Trägererzeugung höher ist als das von  $10^4$  bei Bulk. Im Vergleich zu  $\text{MoS}_2$ -Einzelschichten ( $1,8 \text{ eV}$ ,  $10^2 \text{ A/W}$ ) verbessern die höhere Bandlücke und Empfindlichkeit von  $\text{WS}_2$  die Leistung der hochempfindlichen Bauelemente.

Die hohe Leitfähigkeit von Single-Layer  $\text{WS}_2$  unterstützt transparente leitfähige Folien. In Kombination mit Wolframdrahtelektroden erreicht es einen Transmissionsgrad von  $>90 \%$  bei 550 nm und einen spezifischen Widerstand von  $10^{-3} \Omega \eta\text{cm}$ , was mit ITO ( $10^{-4} \Omega \eta\text{cm}$ ) mit überlegener Flexibilität (biegbar bis  $10^{-3} \text{ m}^{-1}$  Krümmung) konkurriert. Das von CVD hergestellte einschichtige  $\text{WS}_2$  behält die Leitfähigkeit mit einer Änderung von  $<5 \%$  nach 1000 Biegungen (Widerstandstests) bei und wird in [den flexiblen Display-Leitschichten von CTIA GROUP LTD](#) verwendet, wodurch die Helligkeit um  $20 \%$  erhöht und die Stabilität bei  $500 \text{ }^\circ\text{C}$  ( $<2 \%$  Änderung) beibehalten wird.

### 2.3.1.3 Trägermobilität und Dopingeffekte

Die Ladungsträgerbeweglichkeit von Single-Layer- $\text{WS}_2$  erreicht über den Hall-Effekt  $100\text{-}200 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  (Elektronen), sinkt in Multilayern auf  $10\text{-}20 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  und übertrifft damit  $\text{MoS}_2$ -Einzelschichten ( $50\text{-}80 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ) aufgrund seiner direkten Bandlücke und geringeren effektiven Masse (Elektronen  $0,3 m_0$ , Löcher  $0,4 m_0$ , DFT). Die geringere Beweglichkeit von Bulk  $\text{WS}_2$  spiegelt die erhöhte Phononen- und Verunreinigungsstreuung durch die Kopplung zwischen den Schichten wider. FET-Tests zeigen eine stabile Beweglichkeit bei 300 K, mit einem Drainstrom ( $I_d$ ) von  $10 \mu\text{A}$  bei 1 V Vorspannung, der aufgrund reduzierter Phononenstreuung auf  $300 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  bei 77 K ansteigt und sich Silizium ( $500 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ), aber unterhalb von Graphen ( $10^4 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ) nähert.

Die Dotierung verbessert die Beweglichkeit und Leitfähigkeit, wobei Nb (p-Typ) die Einzelschicht- $\text{WS}_2$  auf  $200\text{-}250 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  und die Lochkonzentration auf  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  (Hall-Effekt) und Re (n-Typ) die Elektronenbeweglichkeit auf  $250\text{-}300 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  und die Leitfähigkeit auf  $10^4 \text{ S/cm}$  erhöht. XPS bestätigt die Substitution von  $\text{Nb}^{4+}$  und  $\text{Re}^{4+}$  und verändert den Trägertyp und die Dichte. In der Wolframforschung erreicht Nb-dotiertes  $\text{WS}_2$  in Hochleistungs-FETs ein Schaltverhältnis von  $10^7$  und übertrifft damit undotiertes  $\text{WS}_2$  ( $10^6$ ) und Silizium ( $10^5$ ). Die Dotierung unterstützt Sensoren, wie z. B. re-dotierte  $\text{WS}_2$ -Filme, die  $\text{NO}_2$  bei 1 ppb ( $<2 \text{ s}$  Reaktion) erkennen und damit  $\text{MoS}_2$  ( $5 \%$  vs.  $2 \%$  Stabilitätsänderung bei  $300 \text{ }^\circ\text{C}$ ) übertreffen und in Wolframprodukten für flexible Elektronik mit  $20 \%$  geringerem Stromverbrauch verwendet werden.

### 2.3.2 Eigenschaften der Bandlücke

Die Bandlückeneigenschaften von  $\text{WS}_2$  sind von zentraler Bedeutung für seine elektrischen und optischen Eigenschaften und beeinflussen Leitfähigkeit, Absorption und Emission.

#### 2.3.2.1 Übergang von Multilayer- zu Single-Layer-Bandgap

$\text{WS}_2$  geht von einer indirekten  $1,3 \text{ eV}$  Multilayer-Bandgap zu einer direkten  $2,1 \text{ eV}$  Single-Layer-

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Bandgap über, ein Kennzeichen von 2D-Materialien. Die DFT zeigt eine mehrschichtige Indirektheit durch die Kopplung zwischen den Schichten, wobei der einlagige Einschluss die Banden am K-Punkt ausrichtet. PL bestätigt die Einschicht-Emission bei 620 nm, 100-mal stärker als die Mehrschicht-Absorption bei 950 nm (UV-Vis). Diese Verschiebung unterstützt Solarzellen-Sensibilisatoren, die einen Wirkungsgrad von 5 % in Einzelschichten gegenüber 2 % in mehreren Schichten (J-V-Tests) erreichen, und Photodetektoren mit einer Empfindlichkeit von  $10^3$  A/W in der [Wolframtechnologie](#).

### 2.3.2.2 Temperatureffekte auf die Bandlücke

Die Bandlücke von  $WS_2$  nimmt mit der Temperatur bei  $-0,4$  meV/K (300-600 K) ab und sinkt auf 2,0 eV (einschichtig) und 1,2 eV (mehrschichtig) bei 600 K (PL mit variabler Temperatur), was auf Gitterausdehnung und Elektron-Phonon-Wechselwirkungen zurückzuführen ist. Raman zeigt  $A_1g$ -Peak-Verschiebungen von  $420$   $cm^{-1}$  bis  $415$   $cm^{-1}$ , was auf eine Stabilität für Hochtemperatursensoren mit einer Bandlückenänderung von  $<0,1$  % (1000 Stunden) hinweist.

### 2.3.2.3 Anwendungspotenzial von Bandgap Engineering

Die Bandgap-Abstimmung von 1,3-2,1 eV über Dehnung, Dotierung oder elektrische Felder verbessert  $WS_2$ -Anwendungen. Eine Dehnung von 2 % reduziert ihn auf 1,9 eV, eine Nb-Dotierung auf 1,8 eV ( $10^4$  S/cm Leitfähigkeit) und ein Feld von 10 V/nm auf 1,8 eV, wodurch der Wirkungsgrad der Solarzellen auf 6 % und die Empfindlichkeit der Sensoren in der Wolframtechnologie um 50 % gesteigert wird.

## 2.3.3 Optische Absorptions- und Reflexionseigenschaften

Die optischen Eigenschaften von  $WS_2$  unterstützen die Photodetektion, Solarzellen und Beschichtungen und decken Absorption, Reflexion und Emission ab.

### 2.3.3.1 Absorptionsraten im sichtbaren und infraroten BereichEinschichtiges

$WS_2$  absorbiert 10 % bei 620 nm (2,1 eV), Mehrschichtiges 50 % bei 950 nm (1,3 eV, UV-Vis) und ermöglicht so Photodetektoren mit einer Empfindlichkeit von  $10^3$  A/W (einfach) und  $10^2$  A/W (mehrfach). Die Sättigung tritt bei  $10$  mW/cm<sup>2</sup> auf und übertrifft damit  $MoS_2$  ( $5$  mW/cm<sup>2</sup>) und unterstützt einen Wirkungsgrad von 5 % Solarzellen in der Wolframtechnologie.

### 2.3.3.2 Reflexionsvermögen und Brechungsindex

Das  $WS_2$ -Reflexionsvermögen beträgt 20-30 % im sichtbaren Licht und steigt in Mehrschichten (Ellipsometrie) auf 50 % an, mit Brechungsindizes von 4,0 (einfach) und 4,5 (multi) bei 550 nm. Dies eignet sich für Antireflexbeschichtungen in Wolframprodukten und reduziert die Reflexionsverluste um 20 %.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 2.3.3.3 Eigenschaften der Photolumineszenz

Einschichtiges WS<sub>2</sub> emittiert stark bei 620 nm (5-10 % Ausbeute), verbessert auf 650 nm und 15 % mit Nb-Dotierung, ideal für LEDs (1000 cd/m<sup>2</sup>) und Bioimaging-Sonden mit <5 % Zerfall über 1000 Stunden in der [Wolframforschung](#).

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT



CTIA GROUP LTD Wolframdisulfid

### Kapitel 3: Klassifizierung von Wolframdisulfid

Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) weist als multifunktionales Übergangsmetall-Dichalkogenid verschiedene Klassifizierungsmethoden auf, die je nach Morphologie, Kristallstruktur, Reinheit und Anwendung sowie Partikelgröße in verschiedene Typen eingeteilt werden. Diese Klassifizierungen spiegeln nicht nur die Unterschiede in den physikalischen und chemischen Eigenschaften von  $WS_2$  wider, sondern bestimmen auch direkt seine Eignung für industrielle, wissenschaftliche und spezialisierte Anwendungen. Dieses Kapitel beginnt mit der morphologischen Klassifikation und untersucht nach und nach die Klassifizierung nach Kristallstruktur, Reinheit und Anwendung sowie Partikelgröße, wobei die Vielfalt von  $WS_2$  und sein bedeutender Wert in der modernen Technologie durch experimentelle Daten, Präparationsmethoden und Anwendungsfallstudien umfassend aufgezeigt werden.

#### 3.1 Klassifizierung von Wolframdisulfid nach Morphologie

Die Morphologie von  $WS_2$  ist eine Schlüsseldeterminante für seine Anwendungseigenschaften, wobei verschiedene Formen von  $WS_2$  (Wolframdisulfid) erhebliche Unterschiede in Größe, Struktur und Funktionalität aufweisen, was sich direkt auf seine Leistung in den Bereichen Schmierung, Elektronik, Katalyse und anderen Bereichen auswirkt. In diesem Abschnitt finden Sie eine detaillierte Analyse der Eigenschaften, Präparationsmethoden und Anwendungsszenarien von pulverförmigem  $WS_2$ , Nanoblatt- $WS_2$ , beschichtetem  $WS_2$ , Bulk- $WS_2$ , Nanodraht- $WS_2$  und Quantenpunkt- $WS_2$ .

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 3.1.1 Wolframdisulfid in Pulverform

Pulverförmiges WS<sub>2</sub> ist eine der gebräuchlichsten Formen, die häufig in Schmierstoffen, Verbundwerkstoffen und industriellen Additiven verwendet wird. Basierend auf der Partikelgröße kann es weiter in Mikrometergroßes Pulver und ultrafeines Pulver unterteilt werden.

#### 3.1.1.1 Mikrometergroßes Pulver

WS<sub>2</sub>-Pulver in Mikrometergröße hat typischerweise eine Partikelgröße von 1 bis 100 Mikrometern mit einer durchschnittlichen Partikelgröße von 5 bis 20 Mikrometern, wie durch optische Mikroskopie und Laser-Partikelgrößenanalyse bestimmt. Dieses Pulver weist einen grau-schwarzen metallischen Glanz auf (siehe 2.1.1.1), der auf die reflektierenden Eigenschaften seiner Schichtstruktur zurückzuführen ist. Die Rasterelektronenmikroskopie (REM) zeigt, dass mikrometergroße WS<sub>2</sub>-Partikel überwiegend unregelmäßige Flocken mit glatten Oberflächen und einem Zwischenlagenabstand von etwa 6,15 Å sind, was mit ihrer 2H-Phasen-Kristallstruktur übereinstimmt (siehe 1.2.1.2). Seine spezifische Oberfläche ist relativ gering (ca. 1-5 m<sup>2</sup>/g, gemessen mit der BET-Methode), was auf die größere Partikelgröße und die reduzierte freiliegende Oberfläche zurückzuführen ist.

Die Herstellung von WS<sub>2</sub> in Mikrometergröße umfasst in der Regel Kalzinierung, Zerlegung oder direkte Sulfidierungsmethoden. Zum Beispiel erzeugt die Reaktion von Wolframsäure (H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) mit Schwefelwasserstoff (H<sub>2</sub>S) bei 600-800 °C Folgendes:  $H_2WO_4 + 2H_2S \rightarrow WS_2 \downarrow + 2H_2O + H_2$ . Durch die Anpassung der Kalzinierungstemperatur und der Sulfidierungsmitteldurchflussrate können die Partikelgrößen im Mikrometerbereich gesteuert werden, wobei die Ausbeute typischerweise 95 % übersteigt. Seine Reinheit liegt in der Regel bei Industriequalität (>98 %) und enthält Spuren von Verunreinigungen wie Wolframtrioxid (WO<sub>3</sub>) oder Sulfide (<1 %, XPS-Messung).

Die Hauptanwendung von mikrometergroßem WS<sub>2</sub> ist als Festschmierstoff. Bei der mechanischen Bearbeitung reduziert die Zugabe zum Fett beispielsweise den Reibungskoeffizienten von 0,7 auf 0,05 (ASTM D1894-Test), was einer Reduzierung von 93 % entspricht und die Betriebstemperaturen um 20 °C senkt. Beispiele aus der Praxis zeigen, dass WS<sub>2</sub>-Pulver im Mikrometerbereich, das von CTIA GROUP LTD hergestellt wird, mit seiner geringen Scherfestigkeit (20-50 MPa, siehe 2.1.5.3) eine hervorragende Gleitleistung gewährleistet. Darüber hinaus eignet es sich aufgrund seiner hohen Dichte (7,5 g/cm<sup>3</sup>, siehe 2.1.2.1) für Gegengewichtsmaterialien, wie z. B. das Mischen mit Wolframpulver zur Herstellung von Verbundwerkstoffen mit hoher Dichte für Gegengewichte für Präzisionsinstrumente.

Im Leistungsvergleich weist WS<sub>2</sub> im Mikrometerbereich einen niedrigeren Reibungskoeffizienten (0,03-0,09) auf als Molybdändisulfid (MoS<sub>2</sub>, 0,04-0,1) und zeichnet sich aufgrund seiner geringeren Feuchtigkeitsempfindlichkeit besonders in Vakuumumgebungen aus. Diese Eigenschaft macht es MoS<sub>2</sub> in der Luft- und Raumfahrt überlegen, z. B. bei gleitenden Komponenten von Satelliten, und

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

hält einen stabilen Reibungskoeffizienten unter 0,03 (Vakuumtest, 500 °C) aufrecht.

### 3.1.1.2 Ultrafeines Pulver

Ultrafeines WS<sub>2</sub>-Pulver hat typischerweise Partikelgrößen im Bereich von 0,1 bis 1 Mikrometer mit einer durchschnittlichen Partikelgröße von etwa 0,5 Mikrometern, gemessen durch Laser-Partikelgrößenanalyse. Es behält ein grau-schwarzes Aussehen, obwohl sein Glanz aufgrund der Partikelverfeinerung leicht abnimmt. REM-Beobachtungen zeigen, dass ultrafeine WS<sub>2</sub>-Partikel eine schuppige Struktur mit unregelmäßigeren Kanten beibehalten und ihre spezifische Oberfläche auf 10-20 m<sup>2</sup>/g (BET-Methode) zunimmt, was auf eine höhere Oberflächenaktivität hinweist.

Die Herstellung von ultrafeinem WS<sub>2</sub> erfolgt häufig durch mechanisches Mahlen oder Dampfphasenverfahren. Zum Beispiel wird mikrometergroßes WS<sub>2</sub> mit einer Planetenkugelmühle auf ultrafeine Werte gemahlen, mit einer Mahldauer von 10-20 Stunden und einem Kugel-Material-Verhältnis von 10:1, was zu gleichmäßig verteilten Partikelgrößen ( $D_{50} \approx 0,5 \mu\text{m}$ ) führt. Alternativ wird bei der chemischen Gasphasenabscheidung (CVD) [Ammoniummetawolframat](#) ((NH<sub>4</sub>)<sub>6</sub>H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>) als Vorläufer verwendet, der in einer 700 °C H<sub>2</sub>S-Atmosphäre zersetzt wird, um ultrafeines WS<sub>2</sub> mit Partikelgrößen zwischen 0,1 und 0,5 μm und einer Reinheit von mehr als 99,5 % zu erzeugen.

Die hohe spezifische Oberfläche von ultrafeinem WS<sub>2</sub> verbessert seine Leistung bei der Schmierung und Katalyse. Auf dem Wolframmarkt wird beispielsweise ultrafeines WS<sub>2</sub> als Schmiermitteladditiv verwendet, das die Dispergierbarkeit um 20 % gegenüber mikrometergroßem Pulver (DLS-Test) verbessert, den Reibungskoeffizienten auf 0,04 (Pin-on-Disk-Test) und die Verschleißrate auf 0,005 mm<sup>3</sup>/N·m reduziert und damit die 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m von WS<sub>2</sub> im Mikrometerbereich übertrifft. Darüber hinaus verbessern seine feinen Partikel die Matrixeigenschaften in Nanokompositen, wie z. B. das Mischen mit Wolframkunststoff zu selbstschmierenden Verbundwerkstoffen, wodurch die Dispersionsgleichmäßigkeit um 30 % verbessert und das Gewicht um 10-15 % reduziert wird.

In katalytischen Anwendungen steigert die hohe Oberflächenaktivität von ultrafeinem WS<sub>2</sub> die Leistung der Hydrodesulfurierung (HDS). In petrochemischen Prozessen erreichen ultrafeine WS<sub>2</sub>-Katalysatoren beispielsweise eine Sulfidabscheidungsrate von 95 % unter 500 °C und 10 bar H<sub>2</sub>-Bedingungen (ASTM D5185), was aufgrund der erhöhten Anzahl freiliegender Kanten (20 % vs. 10 %, STM-Messung) um 10 % höher ist als WS<sub>2</sub> im Mikrometerbereich. Diese Eigenschaft macht es in der Wolframtechnologie für ein effizientes Katalysatordesign sehr wertvoll.

### 3.1.2 Nanoblatt Wolframdisulfid

Nanosheet WS<sub>2</sub> ist eine typische zweidimensionale Form, die sich durch eine hohe spezifische Oberfläche und einzigartige optoelektronische Eigenschaften auszeichnet und nach Schichtanzahl in einschichtige und mehrschichtige Nanoblätter unterteilt wird.

#### 3.1.2.1 Einschichtiges Nanoblatt

##### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Einschichtige WS<sub>2</sub>-Nanoblätter haben eine Dicke von etwa 0,62 nm (AFM-Messung), was einer einzigen S-W-S-Einheit entspricht, mit lateralen Abmessungen von wenigen Mikrometern bis zu Dutzenden von Mikrometern (REM- und TEM-Beobachtungen). Sie erscheinen nahezu transparent, haben eine Durchlässigkeit von mehr als 90 % im sichtbaren Licht (UV-Vis-Messung, siehe 2.1.1.2) und besitzen eine direkte Bandlücke von 2,1 eV (PL-Spektroskopie, siehe 2.3.1.2). Ihre spezifische Oberfläche ist außergewöhnlich hoch und erreicht 300-500 m<sup>2</sup>/g (BET-Methode), was die extremen zweidimensionalen Eigenschaften widerspiegelt.

Einschichtiges WS<sub>2</sub> wird hauptsächlich durch mechanisches Exfoliation oder Flüssigphasenpeeling hergestellt. Beim mechanischen Peeling wird Klebeband verwendet, um einzelne Schichten von Bulk-WS<sub>2</sub> zu trennen, und bietet eine geringe Ausbeute, aber eine hohe Reinheit (>99,9 %), die sich für die Laborforschung eignet. Das Flüssigphasen-Exfoliation umfasst die Ultraschallbehandlung von mikrometergroßem WS<sub>2</sub> in N-Methylpyrrolidon (NMP) bei 200 W für 10-20 Stunden, um eine Einschichtausbeute von 20-30 % zu erreichen, die durch Zentrifugation (3000 U/min) gereinigt wird. Darüber hinaus verwendet CVD [Wolframsäure](#) als Wolframquelle, die einschichtiges WS<sub>2</sub> bei 800-1000 °C in einer H<sub>2</sub>S-Atmosphäre mit präzise kontrollierbarer Dicke und lateralen Abmessungen von bis zu 50 µm züchtet.

Die direkte Bandlücke von Single-Layer-WS<sub>2</sub> zeichnet sich bei optoelektronischen Bauelementen aus. In [der Wolframforschung](#) wird beispielsweise einschichtiges WS<sub>2</sub> in Photodetektoren eingesetzt, das eine Photoempfindlichkeit von 10<sup>3</sup> A/W bei 532 nm (5 V Bias) und eine Detektivität von 10<sup>11</sup> Jones erreicht und damit die 10<sup>1</sup> A/W und 10<sup>9</sup> Jones von Mehrschicht-WS<sub>2</sub> (Photostromtest) übertrifft. Seine hohe Flexibilität (Krümmungsradius <10<sup>-3</sup> m<sup>-1</sup>) unterstützt flexible Elektronikanwendungen, wie z. B. in [China die flexiblen Displays von CTIA GROUP LTD](#) als transparente leitfähige Schicht mit einem Transmissionsgrad von >90 %, einem spezifischen Widerstand von 10<sup>-3</sup> Ω cm und einer Änderung von weniger als 5 % nach 1000 Biegungen. Darüber hinaus verbessert seine hohe spezifische Oberfläche die katalytische Leistung, indem es ein Überpotential von nur 100 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>) in der Wasserstoffentwicklungsreaktion (HER) erreicht, verglichen mit 300 mV für Multischichten.

### 3.1.2.2 Mehrschichtiges Nanoblatt

Mehrschichtige WS<sub>2</sub>-Nanoblätter haben Dicken von 1-50 nm (2-80 Schichten, AFM-Messung), mit lateralen Abmessungen, die denen einzelner Schichten ähneln (einige Mikrometer bis Dutzende von Mikrometern). Ihr Transmissionsgrad nimmt mit zunehmender Schichtzahl ab und erreicht bei 10 Schichten (UV-Vis, 550 nm) etwa 50 % bei einer indirekten Bandlücke von 1,3 eV (siehe 2.3.1.1). Die spezifische Oberfläche reicht von 50-100 m<sup>2</sup>/g (BET-Methode) und liegt zwischen einschichtigen Nanoblättern und mikrometergroßem Pulver.

Multilayer WS<sub>2</sub> wird überwiegend durch Flüssigphasen-Exfoliation oder Direktwachstumsmethoden hergestellt. Beim Flüssigphasen-Peeling wird mikrometergroßes WS<sub>2</sub> als Rohmaterial verwendet, das 5-10 Stunden Ultraschall ausgesetzt wird, um eine Ausbeute von

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

50-70 % zu erzielen, wobei die Schichtzahl durch die Zentrifugationsgeschwindigkeit (500-2000 U/min) gesteuert wird. CVD passt die Sulfidierungszeit und -temperatur (z. B. 900 °C, 30 Minuten) an, um 5-20 Schichten WS<sub>2</sub> mit einer Reinheit von über 99 % zu züchten. Seine strukturelle Stabilität wird durch XRD überprüft, wobei der Peak (002) einem Zwischenlagenabstand von 6,15 Å entspricht.

Multilayer WS<sub>2</sub> vereint Vorteile in Schmierung und Elektronik. In [Wolframprodukten](#) dienen beispielsweise mehrschichtige WS<sub>2</sub>-Nanoblätter als Beschichtungsmaterialien, die einen Reibungskoeffizienten von 0,07 bei 500 °C (ASTM G99) und eine Verschleißrate von 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m aufweisen, was für Hochtemperaturlager geeignet ist. Seine indirekte Bandlücke unterstützt thermoelektrische Anwendungen, wobei mehrschichtige thermoelektrische WS<sub>2</sub>-Module in [Wolframtechnologie](#) aufgrund der verbesserten Leitfähigkeit durch die Zwischenschichtkopplung (10<sup>3</sup> S/cm) einen ZT-Wert von 0,6 bei 500 °C erreichen, der über dem Wert von 0,4 liegt. Darüber hinaus gewährleistet seine moderate spezifische Oberfläche eine stabile katalytische Leistung und hält eine Aktivität von 90 % in HDS nach 1000 Stunden bei 500 °C aufrecht.

### 3.1.3 Wolframdisulfid-Beschichtungen

WS<sub>2</sub>-Beschichtungen scheiden Pulver oder Nanoblätter über Abscheidungstechniken auf Substrate ab, die in Trockenfilm-Schmiermittelbeschichtungen und Verbundbeschichtungen unterteilt sind.

#### 3.1.3.1 Trockenfilm-Schmiermittelbeschichtung

WS<sub>2</sub>-Beschichtungen für Trockenfilmschmiermittel haben in der Regel eine Dicke von 0,5 bis 10 µm und werden durch Sprühen oder physikalische Gasphasenabscheidung (PVD) hergestellt. Sie zeichnen sich durch eine glatte Oberfläche mit einem Reibungskoeffizienten von nur 0,03-0,09 (ASTM D1894) und einer Temperaturbeständigkeit von bis zu 650 °C an der Luft aus (siehe 2.1.3.2). Das REM zeigt einen einheitlichen Schichtaufbau mit Zwischenlagenabständen, die mit dem Schüttgut übereinstimmen.

Zu den Präparationsmethoden gehören Kaltspritzen und Sputtern. Durch das Kaltspritzen wird mikrometergroßes WS<sub>2</sub>-Pulver mit hoher Geschwindigkeit auf Substrate (z. B. Stahl) geschleudert und eine Haftfestigkeit von 10 MPa (Zugversuch) erreicht. Beim Sputtern wird WS<sub>2</sub> von einem Target in einer Argonatmosphäre abgeschieden, wobei die Dicke zwischen 1 und 5 µm mit einer Reinheit von >99,5 % kontrolliert wird. In [der Produktion von CTIA GROUP LTD in China](#) werden kaltspritzte WS<sub>2</sub>-Beschichtungen in der Luft- und Raumfahrt häufig eingesetzt.

Trockenfilm-WS<sub>2</sub>-Beschichtungen eignen sich hervorragend für Szenarien mit hoher Belastung. Auf dem [Wolframmarkt](#) beispielsweise halten Beschichtungen, die auf Flugzeugfahrwerkslager aufgebracht werden, einen Reibungskoeffizienten von unter 0,1 bei 2 GPa und 500 °C (Vierkugelttest) mit einer Verschleißrate von 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m, wodurch die Lebensdauer um 50 % verlängert wird. Ihre Hydrophobie (Kontaktwinkel 90°) gewährleistet Stabilität in feuchten Umgebungen und zeigt nach 1000 Stunden Salzsprühtest (ASTM B117) keine Korrosion.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 3.1.3.2 Verbundbeschichtung

WS<sub>2</sub>-Verbundbeschichtungen kombinieren WS<sub>2</sub> mit Materialien wie Wolfram-Kupfer oder Nickel (Ni) mit einer Dicke von 5 bis 50 µm, was die Härte und Verschleißfestigkeit erhöht. Nanoindentationstests zeigen Härtegrade von 5-10 GPa, 10-20 Mal höher als bei reinen WS<sub>2</sub>-Beschichtungen (0,5 GPa).

Die Vorbereitung erfolgt durch Plasmaspritzen oder Galvanisieren. Beim Plasmaspritzen wird WS<sub>2</sub> mit Ni-Pulver gemischt, auf Stahlsubstrate mit einem WS<sub>2</sub>-Gehalt von 20-50 Gew.-% aufgetragen, wodurch eine Härte von 8 GPa erreicht wird. Durch die Galvanik wird ultrafeines WS<sub>2</sub> in eine Ni-Matrix eingebettet, wodurch 10 µm-Beschichtungen mit einem Reibungskoeffizienten von 0,05 hergestellt werden. Die Verbundbeschichtungsprodukte von CTIA GROUP LTD verwenden überwiegend diese Verfahren.

Verbundstoffbeschichtungen werden häufig in Schneidwerkzeugen eingesetzt. In der Wolframtechnologie beispielsweise erhöhen WS<sub>2</sub>-Ni-beschichtete Werkzeuge die Schnitteffizienz bei 3000 U/min um 30 %, bei Verschleißtiefen unter 5 µm nach 1000 Stunden, da WS<sub>2</sub> die Adhäsion reduziert und die Matrix mit hoher Härte die Haltbarkeit erhöht.

### 3.1.4 Wolframdisulfid in großen Mengen

Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) ist seine ursprüngliche Form, die als natürliche Mineralien oder synthetische Kristalle mit hoher struktureller Integrität und Stabilität vorliegt. Bulk WS<sub>2</sub> (Wolframdisulfid) dient sowohl als Rohstoff für die Herstellung anderer Formen (z. B. Pulver, Nanoblätter) als auch als Material für den direkten Gebrauch in bestimmten Anwendungen. Basierend auf Herkunft und Zubereitung wird Bulk WS<sub>2</sub> in natürliche Wolframit und künstliche Kristalle unterteilt.

#### 3.1.4.1 Natürlicher Wolframit

Natürlicher Wolframit ist die mineralische Form von WS<sub>2</sub>, typischerweise grau-schwarz mit einem ausgeprägten metallischen Glanz, und seine physikalischen Eigenschaften sind eng mit synthetischem WS<sub>2</sub> verbunden. Seine Mohs-Härte beträgt 1-1,5 (siehe 2.1.5.1) und seine Dichte etwa 7,5 g/cm<sup>3</sup> (siehe 1.1.2.1). Die Polarisationslichtmikroskopie zeigt Kristallkorngrößen von wenigen Mikrometern bis zu mehreren Millimetern, wobei die Oberflächen schuppige Peeling-Eigenschaften aufweisen. Die Röntgenbeugungsanalyse (XRD) bestätigt, dass Wolframit überwiegend die 2H-Phasenstruktur mit einem Zwischenlagenabstand von etwa 6,15Å annimmt, was mit den Kristallparametern des synthetischen WS<sub>2</sub> übereinstimmt (siehe 1.2.1.2). Die Elektronensondenmikroanalyse (EPMA) bestimmt seine chemische Zusammensetzung mit >98 % WS<sub>2</sub>, wobei Spurenverunreinigungen wie Eisen (Fe), Silizium (Si) und Sauerstoff (O) insgesamt <1 % aus assoziierten Mineralien während der geologischen Bildung stammen.

Natürliche Wolframitvorkommen sind relativ selten und befinden sich vor allem in Ganzhou (China),

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

der Kaukasusregion in Russland und Queensland (Australien) (siehe 1.1.2.2). In Ganzhou, China, beispielsweise machen Wolframreserven einen bedeutenden Teil der weltweiten  $WS_2$ -Mineralien aus, machen aber weniger als 1 % der gesamten Wolframressourcen aus, weit weniger als [schwarzes Wolframierz](#) ( $FeMnWO_4$ ) und [weißes Wolframierz](#) ( $CaWO_4$ ). Geologische Untersuchungen deuten darauf hin, dass sich Ganzhou-Wolframit in schwefelreichen, hydrothermalen Umgebungen mit hohen Temperaturen und hohem Druck bildet, die oft mit Quarz und Pyrit koexistieren. Die Schwefelisotopenanalyse ( $S^{34}/S^{32}$ ) führt die Schwefelquelle auf den Ursprung des tiefen Erdmantels zurück, was mit lokalen Granitintrusionsereignissen zusammenfällt. Diese Seltenheit führt zu hohen Extraktionskosten, wobei die Jahresproduktion in der Regel unter 1000 Tonnen liegt ([Wolfram-Marktdaten](#)).

Die Anwendungen von Wolframenit konzentrieren sich hauptsächlich auf die Grundlagenforschung und die Herstellung anderer  $WS_2$ -Formen. In der [Wolframforschung](#) wird Wolframit beispielsweise mechanisch in ein- oder mehrschichtige Nanoblätter exfoliert, um die strukturelle Konsistenz mit synthetischem  $WS_2$  zu überprüfen. Die XRD-Analyse zeigt, dass die (002) Peakpositionen von einschichtigem  $WS_2$  aus Wolframit perfekt mit dem von CVD gezüchteten einschichtigen  $WS_2$  ( $2\theta \approx 14,4^\circ$ ) übereinstimmen, was seine Rolle als natürliche Vorlage bestätigt. Darüber hinaus kann Wolframit pulverisiert und zu mikrometergroßem Pulver für industrielle Schmierstoffe gemahlen werden, wobei seine natürliche Schichtstruktur einen Reibungskoeffizienten von nur 0,05 (Pin-on-Disk-Test) gewährleistet. Aufgrund seiner Seltenheit und Verunreinigungen ist die direkte industrielle Verwendung jedoch begrenzt und es ist in erster Linie eine Rohstoffquelle für Wolframprodukte.

Im Leistungsvergleich ist die Schmierfähigkeit von Wolframtrioxid ähnlich wie bei synthetischem  $WS_2$ , aber seine Verunreinigungen (z. B. Fe) können bei hohen Temperaturen ( $>500^\circ C$ ) eine leichte Oxidation auslösen, wodurch Wolframtrioxid ( $WO_3$ ) gebildet wird, was die Haltbarkeit leicht beeinträchtigt (TGA-Test, 0,1 % Massenverlust bei  $510^\circ C$  gegenüber 0,05 % bei synthetischem  $WS_2$ ). In der Wolfram-Wissensakkumulation liefern Wolfram-Studien geologische Einblicke in  $WS_2$ -Mineralisierungsprozesse.

### 3.1.4.2 Künstliche Kristalle

Künstliche  $WS_2$ -Kristalle werden unter kontrollierten Wachstumsbedingungen synthetisiert und bieten eine höhere Reinheit und strukturelle Gleichmäßigkeit. Sie erscheinen dunkelgrau bis schwarz mit glatten Oberflächen, mit Größen von Millimetern bis Zentimetern (optische Mikroskopiemessung). Die XRD-Analyse des Synchrotrons bestätigt, dass sie hauptsächlich die 2H-Phase annehmen, mit einem Zwischenlagenabstand von  $6,15 \text{ \AA}$  und den Gitterparametern  $a = 3,153 \text{ \AA}$ ,  $c = 12,323 \text{ \AA}$  (siehe 1.2.1.2). Ihre Dichte entspricht der von Wolframenit ( $7,5 \text{ g/cm}^3$ ), wobei die Reinheit typischerweise  $>99,9 \%$  (ICP-OES-Messung) und der Verunreinigungsgehalt (z. B. O, Fe) unter  $0,01 \%$  liegt, deutlich niedriger als bei natürlichen Mineralien.

Künstliche  $WS_2$ -Kristalle werden üblicherweise durch chemischen Dampftransport (CVT) hergestellt. Unter Verwendung von [Wolframpulver](#) und Schwefel (S) als Rohstoffe erfolgt das

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

Wachstum bei 950-1050°C mit Jod (I<sub>2</sub>) als Transportmittel in einem versiegelten Quarzrohr, nach der Reaktion:  $W+2S \xrightarrow{I_2, 1000^\circ C} WS_2$ . Der Wachstumszyklus dauert 5-10 Tage und produziert Kristalle bis zu 1 cm × 1 cm × 0,5 cm mit einer Ausbeute von 80%. Eine alternative Methode ist die Synthese von geschmolzenem Salz, bei der [Natriumwolframat](#) (Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) bei 800 °C mit einem Sulfidierungsmittel reagiert wird, wodurch kleinere Kristalle (im Millimeterbereich) zu geringeren Kosten entstehen. [CTIA GROUP LTD](#) setzt CVT ein, um hochreine WS<sub>2</sub>-Kristalle mit einer Jahresproduktion von mehreren tausend Kilogramm herzustellen.

Die hohe Reinheit und Gleichmäßigkeit künstlicher WS<sub>2</sub>-Kristalle verschafft ihnen einen Vorteil in High-End-Anwendungen. In [den optoelektronischen Bauelementen der Wolframtechnologie](#) dienen beispielsweise in einzelnen Schichten abgeblätterte CVT-Kristalle als Photodetektormaterialien, die eine Photoempfindlichkeit von 10<sup>3</sup> A/W (532 nm, 5 V Bias) und eine Detektivität von 10<sup>11</sup> Jones erreichen und damit aus Wolfram abgeleitete Einzelschichten aufgrund reduzierter Verunreinigungseffekte um 5-10 % übertreffen. Ihre Massenform wird auch in [Strahlenschutzmaterialien verwendet](#), wobei Monte-Carlo-Simulationen einen Dämpfungskoeffizienten von 2,5 cm<sup>-1</sup> für 100 keV-Röntgenstrahlen zeigen, was höher ist als der MoS<sub>2</sub>-Wert von 1,8 cm<sup>-1</sup>, der für die leichte Abschirmung in medizinischen Geräten geeignet ist. Darüber hinaus fungieren künstliche Kristalle als hochreine WS<sub>2</sub>-Quellen, die zu Pulvern und Nanoblättern für elektronische und katalytische Zwecke gemahlen oder exfoliert werden.

Im Vergleich zu natürlichem Wolframenit bieten künstliche WS<sub>2</sub>-Kristalle eine überlegene Hochtemperaturstabilität mit einer Oxidationseintrittstemperatur von 510 °C (TGA-Test) und ohne zusätzliche Reaktionen durch Verunreinigungen. Auf dem [Wolframmarkt](#) führt ihre hohe Reinheit zu einem höheren Preis (ca. 500 RMB/kg gegenüber 300 RMB/kg für Wolfram), bietet aber eine bessere Kosteneffizienz bei Präzisionsanwendungen.

### 3.1.5 Wolframdisulfid-Nanodrähte

WS<sub>2</sub>-Nanodrähte stellen eine eindimensionale Form dar, die sich durch ein hohes Aspektverhältnis und einzigartige elektrische und optische Eigenschaften auszeichnet und sich für die Verstärkung von Materialien, Sensoren und Nanoelektronik eignet. Ihre Merkmale können auf der Grundlage von strukturellen Merkmalen und Präparationsmethoden weiter detailliert werden.

#### 3.1.5.1 Eindimensionale Struktureigenschaften

WS<sub>2</sub>-Nanodrähte haben typischerweise Durchmesser von 10-100 nm und Längen von 1-10 µm (Transmissionselektronenmikroskopie, TEM-Messung) mit Aspektverhältnissen von 50-500. Hochauflösende TEM-Beobachtungen (HRTEM) zeigen einen überwiegend hexagonalen Querschnitt, der mit einem Zwischenschichtabstand von 6,15Å in Richtung [001] wächst, was mit der 2H-Phase übereinstimmt. Ihre spezifische Oberfläche reicht von 50-150 m<sup>2</sup>/g (BET-Methode) und ist damit höher als bei mikrometergroßen Pulvern, aber niedriger als bei einschichtigen Nanoblättern. Die Ultraviolett-sichtbare Spektroskopie (UV-Vis) zeigt eine Bandlücke von 1,5-2,0

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

eV zwischen einschichtigem (2,1 eV) und mehrschichtigem (1,3 eV) WS<sub>2</sub>, was eindimensionale Einschlusseffekte widerspiegelt. Die Leitfähigkeit beträgt ca. 10<sup>2</sup>-10<sup>3</sup> S/cm (Vier-Sonden-Methode), da die eindimensionale Struktur die laterale Streuung reduziert.

Die eindimensionalen WS<sub>2</sub>-Nanodrähte weisen eine hohe mechanische Festigkeit und Flexibilität auf. Nanoindentationstests zeigen einen Elastizitätsmodul von etwa 150 GPa, der niedriger ist als der von einlagigem WS<sub>2</sub> von 270 GPa (siehe 2.1.5.2), aber dennoch ausreichend für die Verbundverstärkung. Die Raman-Spektroskopie zeigt, dass sich der A<sub>1g</sub>-Moden-Peak (420 cm<sup>-1</sup>) mit abnehmendem Durchmesser intensiviert, während der E<sub>2g</sub>-Peak (350 cm<sup>-1</sup>) eine eindimensionale Symmetrie widerspiegelt. Diese Struktur sorgt für eine Richtungsabhängigkeit des Ladungstransports und der Lichtabsorption, wobei die axiale Ladungsträgerbeweglichkeit 50-100 cm<sup>2</sup>/V·s (Hall-Effekt) erreicht, was höher ist als die 10-20 cm<sup>2</sup>/V·s von Mehrschicht-Nanoblättern.

In Bezug auf die Leistung bieten WS<sub>2</sub>-Nanodrähte im Vergleich zu Kohlenstoffnanoröhren (CNTs, Bandlücke 0-1 eV, Leitfähigkeit 10<sup>4</sup> S/cm) eine größere Bandlücke, die für Halbleiteranwendungen geeignet ist, während CNTs auf Leitereigenschaften ausgerichtet sind. Die hohe spezifische Oberfläche und die aktiven Zentren am Rand (15-20 % Schwefel, STM-Messung) verbessern die katalytische Leistung und erreichen ein Überpotential von 150 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>) in HER, was die 300 mV von WS<sub>2</sub> im Mikrometerbereich übertrifft.

### 3.1.5.2 Synthesemethoden

Die WS<sub>2</sub>-Nanodrahtsynthese umfasst in erster Linie die thermische Verdampfung, Lösungsmethoden und Template-Methoden. Bei der thermischen Verdampfung wird WS<sub>2</sub>-Pulver als Rohstoff verwendet, das bei 900-1000 °C in einer Argonatmosphäre verdampft und auf Siliziumsubstraten abgeschieden wird, wodurch Nanodrähte mit Durchmessern von 20-50 nm und Längen von 5-10 µm mit einer Ausbeute von etwa 70 % hergestellt werden. Durch die Einstellung der Verdampfungstemperatur und des Gasflusses (z. B. 950 °C, 100 sccm Ar) werden Durchmesser zwischen 10 und 100 nm gesteuert. Bei der Lösungsmethode wird [Natriumwolframat](#) (Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) mit einer Schwefelquelle (z. B. Thioharnstoff) unter hydrothermalen Bedingungen bei 200 °C umgesetzt, wodurch Nanodrähte mit einem Durchmesser von 30 bis 80 nm und einer Ausbeute von 80 % erhalten werden, die durch Zentrifugation (5000 U/min) gereinigt werden. Bei der Template-Methode werden anodische Aluminiumoxid (AAO)-Templates verwendet, die WS<sub>2</sub> bei 700 °C abscheiden und die Template entfernen, um Nanodrähte mit einem Durchmesser von 50 nm zu erhalten, die sich ideal für die Serienproduktion eignen.

In [der Wolframforschung](#) verstärken thermisch verdampfte WS<sub>2</sub>-Nanodrähte Verbundwerkstoffe. So erhöht beispielsweise das Mischen mit [Wolframkautschuk](#) bei 5 Gew.-% die Zugfestigkeit des Verbundwerkstoffs um 20 % (50 MPa vs. 40 MPa), da die eindimensionale Struktur die Spannung effektiv verteilt. In Sensoren werden Nanodrähte im Lösungsverfahren verwendet, wobei die Leitfähigkeitsänderungen bei der H<sub>2</sub>S-Detektion (300 K) 10 %/ppm erreichen und damit die Empfindlichkeit von mikrometergroßem Pulver von 5 %/ppm übertreffen.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Die Vielfalt der Synthesemethoden unterstützt die Anpassung von WS<sub>2</sub>-Nanodrähten. Die thermische Verdampfung eignet sich für hohe Reinheitsanforderungen (>99,5 %), während die niedrigeren Kosten der Lösungsmethode (ca. 200 RMB/kg gegenüber 400 RMB/kg für die thermische Verdampfung) die industrielle Produktion bevorzugen und die Template-Methode die Herstellung in großem Maßstab unterstützt. In der Wolframtechnologie erhöht die Optimierung der WS<sub>2</sub>-Nanodrahtsynthese ihr Potenzial in der Nanoelektronik, z. B. als Substrat in Feldeffekttransistoren, mit einer Leitfähigkeit von 10<sup>3</sup> S/cm bei 300 K und einem Schaltverhältnis von 10<sup>5</sup> (FET-Test), was deutlich höher ist als die 10<sup>2</sup> S/cm und 10<sup>4</sup> von WS<sub>2</sub> im Mikrometerbereich. Diese eindimensionale Eigenschaft birgt ein immenses Potenzial für Hochfrequenzelektronik, wie z. B. HF-Sensoren in der Wolframtechnologie, die Ansprechfrequenzen von 5 GHz erreichen und damit die 2 GHz herkömmlicher zweidimensionaler Materialien übertreffen.

In Bezug auf die Anwendung bestimmen WS<sub>2</sub>-Nanodraht-Synthesemethoden Leistung und Kosten. Durch die thermische Verdampfung entstehen Nanodrähte mit weniger Oberflächendefekten (TEM-Betrachtung, Defektdichte <10<sup>-2</sup> nm<sup>-2</sup>), die sich ideal für hochpräzise Geräte eignen, aber strenge Geräte erfordern (Vakuum <10<sup>-5</sup> Pa) und Kosten von etwa 400 RMB/kg verursachen. Nanodrähte mit der Lösungsmethode haben breitere Durchmesserverteilungen (D<sub>50</sub> ± 20 nm), aber einfachere Prozesse, die für die Produktion im industriellen Maßstab bei 200 RMB/kg geeignet sind und in verstärkten Verbundwerkstoffen weit verbreitet sind.

Nanodrähte nach der Template-Methode weisen einheitliche Längen auf (Variationskoeffizient <5%), wobei die jährliche Nachfrage auf dem [Wolframmarkt](#) etwa 1000 kg erreicht, hauptsächlich für Katalysatorträger. In HDS erreichen WS<sub>2</sub>-Nanodrähte nach der Template-Methode beispielsweise eine Sulfidentfernungsrate von 92 % (500 °C, 10 bar), 8 % höher als WS<sub>2</sub> in Mikrometergröße (ASTM D5185-Test).

Im Vergleich zu anderen eindimensionalen Materialien zeichnen sich WS<sub>2</sub>-Nanodrähte durch ihre Halbleitereigenschaften aus. Im Gegensatz zu Kohlenstoff-Nanoröhren (CNTs, Leitfähigkeit 10<sup>4</sup> S/cm, Kosten 300 RMB/kg) eignet sich die Bandlücke (1,5-2,0 eV) von WS<sub>2</sub>-Nanodrähten für optoelektronische Anwendungen, während CNTs eher leiterähnlich sind. In [der Wolframforschung](#) übertrifft die Flexibilität von WS<sub>2</sub>-Nanodrähten (Krümmungsradius <10<sup>-2</sup> m<sup>-1</sup>) starre Si-Nanodrähte (Young-Modul 180 GPa vs. 150 GPa von WS<sub>2</sub>) in der flexiblen Elektronik. Die Optimierung der Synthesebedingungen (z. B. die Zugabe von Tensiden in Lösungsmethoden) kann die Ausbeute auf 90 % steigern und damit den Grundstein für großtechnische Anwendungen legen.

### 3.1.6 Wolframdisulfid-Quantenpunkte

WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte (QDs) sind eine nulldimensionale Form von WS<sub>2</sub>, die sich durch ultrakleine Größen und starke Quanteneinschlusseffekte auszeichnet und aufgrund ihrer einzigartigen optischen und elektrischen Eigenschaften in der Biobildgebung, Photokatalyse und Nanoelektronik Aufmerksamkeit erregt. Sie können auf der Grundlage von strukturellen Merkmalen und Leistungsvorteilen weiter detailliert werden.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 3.1.6.1 Nulldimensionale strukturelle Eigenschaften

WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte sind typischerweise zwischen 2 und 10 nm groß (Transmissionselektronenmikroskopie, TEM-Messung), mit einem durchschnittlichen Durchmesser von etwa 5 nm und einer gleichmäßigen Partikelgrößenverteilung ( $D_{50} \pm 1$  nm, dynamische Lichtstreuung, DLS-Analyse). Sie sind meist nahezu sphärisch oder hexagonal (HRTEM-Beobachtung), mit Oberflächenatomen von 50-70% (XPS-Messung) und einer spezifischen Oberfläche von mehr als 500 m<sup>2</sup>/g (BET-Methode), was Nanodrähte (50-150 m<sup>2</sup>/g) und einschichtige Nanoblätter (300-500 m<sup>2</sup>/g) weit übertrifft. Die Ultraviolett-sichtbare Spektroskopie (UV-Vis) zeigt eine Bandlücke von 2,5-3,0 eV, die deutlich höher ist als die von Einschicht-WS<sub>2</sub> mit 2,1 eV und die von Mehrschicht-WS<sub>2</sub> mit 1,3 eV (siehe 2.3.2.1), was auf einen starken Quanteneinschluss zurückzuführen ist, der eine Diskretisierung des Energieniveaus verursacht. Die Photolumineszenzspektroskopie (PL) zeigt Emissionsspitzen zwischen 400 und 500 nm (z. B. 450 nm bei 5 nm) an, mit Quantenausbeuten von 10 bis 20 %, was die 5 bis 10 % von Einschicht-WS<sub>2</sub> weit übertrifft.

Nulldimensionale WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte weisen einzigartige optische und elektrische Eigenschaften auf. Die Raman-Spektroskopie zeigt, dass sich der A<sub>1g</sub>-Moden-Peak (420 cm<sup>-1</sup>) aufgrund von Größeneffekten auf 425 cm<sup>-1</sup> verschiebt, wobei die reduzierte Intensität die Schwingungen des begrenzten Gitters widerspiegelt. Die Leitfähigkeit liegt bei ca. 10<sup>1</sup>-10<sup>2</sup> S/cm (Vier-Sonden-Methode, 300 K) und damit unter den 10<sup>2</sup>-10<sup>3</sup> S/cm von Nanodrähten, da die nulldimensionale Struktur die Transportwege der Träger begrenzt. Ihre Trägerlebensdauer ist jedoch länger und erreicht 50-100 ns (zeitaufgelöster PL-Test), was auf eine reduzierte nicht-strahlende Rekombination aus Oberflächenzuständen zurückzuführen ist. Die Rastertunnelmikroskopie (STM) zeigt, dass die aktiven Zentren des Schwefels am Rand 30-40 % der Oberflächenatome ausmachen, was die chemische Reaktivität erhöht.

Theoretisch werden die nulldimensionalen Eigenschaften von WS<sub>2</sub>-Quantenpunkten durch einen größenabhängigen Quanteneinschluss bestimmt. Berechnungen der Dichtefunktionaltheorie (DFT) zeigen, dass die Bandlücke mit abnehmender Größe zunimmt, wenn die Durchmesser unter 10 nm fallen – z. B. 3,0 eV bei 2 nm und 2,7 eV bei 5 nm – was mit experimentellen Daten (PL-Spektroskopie) übereinstimmt. Ihre effektive Elektronenmasse beträgt etwa 0,2 m<sub>0</sub> (freie Elektronenmasse) und ist damit niedriger als die 0,3 m<sub>0</sub> von Einzelschicht-WS<sub>2</sub>, da die Elektronendispersion durch den Einschluss weiter reduziert wird. Diese Eigenschaft eignet sich hervorragend für die Photokatalyse, wie z. B. in den Wasserspaltungsexperimenten der Wolframtechnologie, bei denen 5-nm-WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte ein HER-Überpotential von nur 80 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>) erreichen und damit dank der Synergie von großer Oberfläche und aktiven Zentren die 100 mV von Einschicht-WS<sub>2</sub> übertreffen.

Im Vergleich zu anderen nulldimensionalen Materialien vereinen WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte Halbleiter- und Fluoreszenzeigenschaften. Im Gegensatz zu CdSe-Quantenpunkten (Bandlücke 1,7-2,5 eV, Quantenausbeute 50%) sind WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte ungiftig (Cd birgt biologische Risiken), wodurch

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

sie sich besser für Bioanwendungen eignen. Im Vergleich zu Kohlenstoff-Quantenpunkten (C-Punkte, Bandlücke 2-3 eV, Ausbeute 10-30%) bieten WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte eine höhere chemische Stabilität (Oxidationsrate <0,1 % bei 500 °C gegenüber 5 % bei C-Punkten), was ihre Wettbewerbsfähigkeit in verschiedenen Bereichen verbessert.

### 3.1.6.2 Optische und elektrische Vorteile

WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte werden hauptsächlich durch Flüssigphasen-Exfoliation und hydrothermale Verfahren hergestellt. Bei der Flüssigphasen-Exfoliation wird mikrometergroßes WS<sub>2</sub>-Pulver in N-Methylpyrrolidon (NMP) oder Isopropanol verwendet, das 10-15 Stunden lang bei 300 W mit Ultraschall beschallt und durch Hochgeschwindigkeitszentrifugation (10.000 U/min) in 2-10 nm Quantenpunkte getrennt wird, mit einer Ausbeute von etwa 10-20 %. Das hydrothermale Verfahren verwendet [Natriumwolframat](#) (Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) und Thioharnstoff als Vorläufer, die 24 Stunden lang bei 180-220 °C reagieren, um 3-8 nm Quantenpunkte herzustellen, die eine Ausbeute von 50-70 % erreichen, die durch Dialyse gereinigt werden (Molekulargewichtsgrenze 3500 Da). In [der Wolframforschung](#) wird das hydrothermale Verfahren aufgrund seiner geringen Kosten (ca. 150 RMB/kg) und seiner hohen Ausbeute häufig eingesetzt, während das Flüssigphasen-Exfoliation für hochreine Quantenpunkte (>99,9 %) bevorzugt wird.

Die optischen Vorteile von WS<sub>2</sub>-Quantenpunkten liegen in ihrer effizienten Fluoreszenz und abstimmbaren Emission. In der Biobildgebung dienen 5-nm-WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte als Fluoreszenzsonden mit einem Emissionspeak bei 450 nm (Quantenausbeute 20 %), die in zellulären Umgebungen (PBS-Puffer, pH 7,4) nach 1000 Stunden (Fluoreszenzmikroskopie-Test) einen Zerfall von weniger als 5 % aufweisen und damit organische Farbstoffe (20 % Zerfall) übertreffen. Die Größenabstimmung (2-10 nm) passt die Emissionswellenlängen von 400 bis 500 nm an und erfüllt so unterschiedliche Bildgebungsanforderungen. In [Wolframprodukten](#) werden WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte in Lasern verwendet, die eine Emissionsintensität von 500 cd/m<sup>2</sup> bei 300 K erreichen, die durch Nb-Dotierung (0,1 at%, XPS-Verifizierung) auf 800 cd/m<sup>2</sup> verbessert wird, wodurch sich die Emissionsspitze auf 480 nm verschiebt. Diese Abstimmbarkeit unterstreicht ihr Potenzial in der Optoelektronik.

Die elektrischen Vorteile ergeben sich aus den hochaktiven Oberflächen und der moderaten Bandlücke. In der Photokatalyse zersetzen WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte Wasser unter sichtbarem Licht ( $\lambda > 420$  nm) und erreichen so eine Wasserstoffproduktionsrate von 200  $\mu\text{mol/g}\cdot\text{h}$  (300 W Xe-Lampentest), die aufgrund der erhöhten aktiven Zentren (40 % Kantenschwefel gegenüber 20 % bei Einzelschichten) um 50 % höher ist als bei Einschicht-WS<sub>2</sub> (130  $\mu\text{mol/g}\cdot\text{h}$ ). In [der Wolframtechnologie](#) ergeben WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte in photokatalytischen Elektroden eine Photostromdichte von 5 mA/cm<sup>2</sup> (1 V vs. RHE) und übertreffen damit die 2 mA/cm<sup>2</sup> von Mehrschicht-WS<sub>2</sub>. Obwohl ihre Leitfähigkeit geringer ist (10<sup>1</sup>-10<sup>2</sup> S/cm), eignen sie sich hervorragend für Sensoren wie die NO<sub>2</sub>-Detektion mit einer Ansprechrate von 15 %/ppb (300 K), die durch Oberflächenzustände verbessert wird, die die Gasadsorption verstärken.

In der Praxis werden die nulldimensionalen Eigenschaften von WS<sub>2</sub>-Quantenpunkten in der

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

Nanoelektronik genutzt. Diese Eigenschaft übertrifft herkömmliche zweidimensionale Materialien in Geräten mit geringem Stromverbrauch. Ihre hohe Stabilität unterstützt den Langzeiteinsatz, wobei die photokatalytische Aktivität nach 1000 Stunden um weniger als 3 % abnimmt, was weit unter den 10 % von TiO<sub>2</sub>-Quantenpunkten liegt.

Im Vergleich dazu übertreffen WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte Graphen-Quantenpunkte (GQDs, Bandlücke 0-2 eV, Ausbeute 5-15 %) in Bezug auf die optische Stabilität (keine Zersetzung bei 500 °C vs. GQDs-Oxidation bei 400 °C) und bieten ausgewogenere elektrische Eigenschaften für optoelektronische und katalytische Anforderungen. In [der Produktlinie des Wolframunternehmens](#) sind WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte aufgrund ihrer Ungiftigkeit und effizienten Fluoreszenz eine aufstrebende Wahl für die Biobildgebung und Photokatalyse mit einem jährlichen Bedarf von etwa 200 kg.

### 3.2 Klassifizierung von Wolframdisulfid nach Kristallstruktur

Die Kristallstruktur von [Wolframdisulfid](#) (WS<sub>2</sub>) ist eine entscheidende Determinante für seine physikalischen und chemischen Eigenschaften, wobei verschiedene Polymorphe WS<sub>2</sub> (Wolframdisulfid) einzigartige elektrische, optische und mechanische Eigenschaften verleihen und seine Anwendungsbereiche direkt beeinflussen. Der Polymorphismus von WS<sub>2</sub> ergibt sich aus Variationen in der Koordination von Wolfram- und Schwefelatomen und Unterschieden in der Stapelung zwischen den Schichten, die hauptsächlich die 1T-Phase, die 2H-Phase, die 3R-Phase und die 1T'-Phase umfassen. In diesem Abschnitt werden die strukturellen Merkmale, die Stabilität, die Präparationsbedingungen und der Anwendungswert dieser Kristallphasen eingehend untersucht und ihre Vielfalt durch experimentelle Daten und theoretische Analysen aufgezeigt.

#### 3.2.1 1T-Phase

Die 1T-Phase von WS<sub>2</sub> ist eines seiner Polymorphe, das für seine oktaedrische Koordination und hohe Leitfähigkeit bekannt ist und aufgrund seiner metastabilen Natur in der Katalyse und Elektronik große Aufmerksamkeit erregt.

##### 3.2.1.1 Strukturelle Merkmale

Die 1T-Phase WS<sub>2</sub> (T steht für tetragonale Symmetrie) gehört zum monoklinen Kristallsystem, wobei jedes Wolframatom von sechs Schwefelatomen in einer oktaedrischen Koordination umgeben ist und eine S-W-S-Sandwichschicht bildet. Röntgenbeugungsmessungen (XRD) zeigen eine Einzelschichtdicke von ca. 5,94 Å, mit den Gitterparametern  $a = 5,68 \text{ \AA}$  und  $c = 5,94 \text{ \AA}$  (Einzelschicht), die sich deutlich von der trigonalen prismatischen Koordination der 2H-Phase ( $a = 3,153 \text{ \AA}$ ,  $c = 12,323 \text{ \AA}$ ) unterscheiden. Die Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) zeigt, dass die W-S-Bindungslänge in der Ebene in der 1T-Phase  $2,41^\circ$  beträgt, mit Bindungswinkeln von fast  $90^\circ$ , im Gegensatz zu  $82^\circ$  der 2H-Phase. Berechnungen der Dichtefunktionaltheorie (DFT) zeigen, dass die elektronische Struktur metallisch ist, mit einer Bandlücke nahe Null und dem Fermi-Niveau, das das Leitungsband schneidet (Leitfähigkeit ca.  $10^3 \text{ S/cm}$ , gemessen mit der Vier-Sonden-Methode), was sich stark von den Halbleitereigenschaften der 2H-Phase unterscheidet (Bandlücke

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

1,3 eV, siehe 2.3.1.1).

Die Schichten der 1T-Phase WS<sub>2</sub> sind durch schwache Van-der-Waals-Kräfte verbunden, wobei der Zwischenlagenabstand etwas kleiner ist als der der 2H-Phase (5,94 Å vs. 6,15 Å), was die Kompaktheit der oktaedrischen Koordination widerspiegelt. Die Raman-Spektroskopie zeigt charakteristische Peaks E<sub>1g</sub> (ca. 150 cm<sup>-1</sup>) und A<sub>1g</sub> (ca. 400 cm<sup>-1</sup>), die von denen der 2H-Phase verschoben sind, mit reduzierter Intensität aufgrund verminderter Symmetrie, die die Schwingungsmoden verändert. Die Analyse der Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) zeigt W 4f- und S 2p-Bindungsenergien von 32,5 eV bzw. 162,0 eV, die etwas niedriger sind als die der 2H-Phase (32,8 eV und 162,3 eV), was Änderungen in der Elektronenwolkenverteilung widerspiegelt.

Aus mikroskopischer Sicht ergibt sich die metallische Natur der 1T-Phase WS<sub>2</sub> aus der Überlappung von Wolfram-5d-Orbitalen, wobei DFT-Simulationen zeigen, dass das Leitungsband von d<sub>xy</sub>- und d<sub>x<sup>2</sup>-y<sup>2</sup></sub>-Orbitalen dominiert wird und keine Bandlücke aufweist. Diese Struktur verleiht eine hohe elektrochemische Reaktivität, wobei die Schwefelkantenatome (niedrige Koordinationszahl von 2-3, STM-Messung) 20-30% der Oberflächenatome ausmachen und damit weit über den 5-10% der 2H-Phase liegen.

### 3.2.1.2 Stabilitäts- und Transformationsbedingungen

Die 1T-Phase WS<sub>2</sub> ist unter Standardtemperatur und -druck (STP) metastabil und neigt dazu, sich spontan in die stabile 2H-Phase umzuwandeln, wobei ihre freie Gibbs-Energie (ΔG) bei 300 K positiv ist (ca. 10-20 kJ/mol, DFT-Berechnung), was auf eine thermodynamische Instabilität hinweist. Die In-situ-XRD-Überwachung zeigt, dass sich der Abstand der c-Achse nach Wochen der Luftexposition auf 6,0 Å erhöht, mit teilweiser Umwandlung in die 2H-Phase (der (002) Peak verschiebt sich von 14,9° auf 14,4°). Erhöhte Temperaturen beschleunigen diesen Prozess; So erfolgt z.B. bei 300°C in einer O<sub>2</sub>-Atmosphäre innerhalb von Stunden eine vollständige Umwandlung in die 2H-Phase (TGA-Test, Massenverlust <0,1%).

Die Vorbereitung der 1T-Phase erfordert bestimmte Bedingungen, wie z. B. Alkalimetall-Interkalation oder Hochdruckbehandlung. Unter Verwendung von [Wolframsäure](#) als Rohstoff induziert die Interkalation mit n-Butyllithium (n-BuLi) die Reaktion: WS<sub>2</sub>+xLi→LixWS<sub>2</sub>(1Tphase)WS<sub>2</sub> + xLi → Li<sub>x</sub>WS<sub>2</sub> (1T-Phase) WS<sub>2</sub>+xLi→LixWS<sub>2</sub>(1Tphase)Die anschließende Hydrolyse entfernt Li<sup>+</sup>, wodurch eine Ausbeute von 60-80 % erreicht wird, wobei TEM die oktaedrische Struktur bestätigt. Hochdruckverfahren wandeln die 2H-Phase WS<sub>2</sub> in die 1T-Phase bei 5-10 GPa und 800 °C um, mit einer Ausbeute von über 90 %, obwohl eine fortschrittliche Ausrüstung erforderlich ist. In [der Wolframforschung](#) ist die Interkalation aufgrund ihrer Einfachheit und Kontrollierbarkeit häufiger anzutreffen.

Die 1T-Phase WS<sub>2</sub> findet vor allem in der Elektrokatalyse Anwendung. In der Wasserstoffentwicklungsreaktion (HER) weist es beispielsweise ein Überpotential von nur 100-150 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>, elektrochemischer Test) auf und übertrifft damit die 300-400 mV der 2H-Phase,

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

was auf seinen metallischen Zustand und seine aktiven Zentren an der oberen Kante (elektrochemische aktive Oberfläche, ECSA, 50 % höher) zurückzuführen ist. In der Brennstoffzellenforschung der Wolframtechnologie nutzen 1T-Phasen-WS<sub>2</sub>-Elektroden ihre Leitfähigkeit (10<sup>3</sup> S/cm) für eine effiziente Stromübertragung, mit einer Aktivitätsdegradation von unter 5 % bei 500 °C über 1000 Stunden. Seine Metastabilität schränkt jedoch den industriellen Einsatz ein, da es an der Luft bei 400 °C 10 % schneller zu Wolframtrioxid (WO<sub>3</sub>) oxidiert als die 2H-Phase (TGA-Test), was Komposite (z. B. mit Wolfram-Kupfer) erfordert, um die Stabilität zu erhöhen.

### 3.2.2 2H-Phase

Die 2H-Phase WS<sub>2</sub> ist die stabilste und am weitesten verbreitete Kristallform, die aufgrund ihrer Halbleitereigenschaften und ihrer hervorragenden Schmierfähigkeit industrielle Anwendungen dominiert.

#### 3.2.2.1 Strukturelle Merkmale

Die 2H-Phase WS<sub>2</sub> (H steht für hexagonale Symmetrie) gehört zum hexagonalen Kristallsystem, wobei jedes Wolframatom von sechs Schwefelatomen in einer trigonalen prismatischen Koordination umgeben ist und eine S-W-S-Schicht bildet. XRD-Messungen zeigen eine Elementarzelle mit zwei Schichten mit den Gitterparametern  $a = 3,153 \text{ \AA}$  und  $c = 12,323 \text{ \AA}$  (Doppelschichtabstand) und einer Einzelschichtdicke von etwa 0,62 nm (AFM-Messung). TEM zeigt eine W-S-Bindungslänge von 2,41 Å und Bindungswinkel von etwa 82°, mit einem Zwischenlagenabstand von 6,15 Å, der durch Van-der-Waals-Kräfte aufrechterhalten wird. DFT-Berechnungen zeigen eine indirekte Bandlücke von 1,3 eV (Leitungsbandminimum am  $\Gamma$ -Punkt, Valenzbandmaximum am K-Punkt, siehe 2.3.1.1), mit einer Leitfähigkeit von 10<sup>1</sup>-10<sup>2</sup> S/cm (Vier-Sonden-Methode), die ein n-Typ-Halbleiterverhalten aufweist.

Die schwachen Zwischenschichtkräfte der 2H-Phase WS<sub>2</sub> (Scherkraft 0,1 N/m<sup>2</sup>, siehe 2.1.4.1) verleihen ihr geringe Reibungseigenschaften. Die Raman-Spektroskopie zeigt starke und stabile charakteristische Peaks E<sub>2g</sub> (350 cm<sup>-1</sup>) und A<sub>1g</sub> (420 cm<sup>-1</sup>), was eine hohe Symmetrie und Kopplung zwischen den Schichten widerspiegelt. Die XPS-Analyse zeigt W 4f- und S 2p-Bindungsenergien von 32,8 eV bzw. 162,3 eV, die sich geringfügig von der 1T-Phase unterscheiden, mit einer geringen spezifischen Oberfläche (1-5 m<sup>2</sup>/g, BET-Methode) aufgrund der Mehrschichtstapelung, die die freiliegenden Oberflächen reduziert.

Mikroskopisch ergeben sich die Halbleitereigenschaften der 2H-Phase WS<sub>2</sub> aus der indirekten Überlappung von Wolfram-5d- und Schwefel-3p-Orbitalen, wobei das Leitungsband von d<sub>z<sup>2</sup></sub>-Orbitalen und das Valenzband von p<sub>z</sub>-Orbitalen dominiert wird. Diese Struktur bietet eine überlegene thermische Stabilität gegenüber der 1T-Phase und oxidiert erst bei 650 °C an der Luft vollständig zu WO<sub>3</sub> (siehe 2.2.2.1), während die 1T-Phase bei 510 °C signifikant reagiert.

#### 3.2.2.2 Prävalenz industrieller Anwendungen

##### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Die 2H-Phase  $WS_2$  ist die vorherrschende Kristallform in industriellen Anwendungen und macht über 90 % der gesamten  $WS_2$ -Produktion aus ([Wolfram-Marktdaten](#)). Seine Stabilität beruht auf thermodynamischen Vorteilen, mit einer negativen freien Gibbs-Energie ( $\Delta G$ ) bei 300 K (ca. -50 kJ/mol, DFT-Berechnung), die bis zu 1250 °C im Vakuum unzersetzt bleibt (siehe 2.1.3.2). Zu den Präparationsmethoden gehören die Kalzinierungszersetzung und die chemische Gasphasenabscheidung (CVD). Bei der Kalzinierung wird [Wolframpulver](#) bei 600-800 °C mit Schwefel umgesetzt, was >95 % bei einer Reinheit von 98-99 % ergibt. CVD züchtet eine hochreine 2H-Phase (>99,9 %) bei 900 °C in einer  $H_2S$ -Atmosphäre, die häufig für industrielle Beschichtungen verwendet wird.

Die 2H-Phase  $WS_2$  dominiert Schmieranwendungen. Bei den Schmierstoffprodukten von [CTIA GROUP LTD](#) in China reduziert beispielsweise die Zugabe von 2H-Phase- $WS_2$ -Pulver zum Getriebeöl den Reibungskoeffizienten auf 0,05 (ASTM D1894), wodurch die Lebensdauer aufgrund der hohen Gleiteffizienz zwischen den Schichten (Scherfestigkeit 20-50 MPa) um 50 % verlängert wird. In der Luft- und Raumfahrt behalten  $WS_2$ -Beschichtungen der 2H-Phase einen stabilen Reibungskoeffizienten von 0,07 bei 500 °C und 2 GPa mit einer Verschleißrate von <0,01  $mm^3/N \cdot m$  (Vier-Kugel-Test) bei und übertreffen damit die 0,15 bzw. 0,02  $mm^3/N \cdot m$  von Molybdändisulfid ( $MoS_2$ ). Darüber hinaus unterstützen seine Halbleitereigenschaften elektronische Anwendungen, wie z. B. in Feldeffekttransistoren (FETs) aus [Wolframprodukten](#). Erreichen eines Schaltverhältnisses von 10 $\mu$  und einer Trägerbeweglichkeit von 10-20  $cm^2/V \cdot s$  (siehe 2.3.1.1).

Im Vergleich zu anderen Phasen zeichnet sich die 2H-Phase  $WS_2$  industriell durch ihre Stabilität und Wirtschaftlichkeit aus, mit Produktionskosten von rund 300 RMB/kg, was unter den 500 RMB/kg der 1T-Phase liegt (wodurch komplexe Interkalationsschritte vermieden werden). In [der Wolframtechnologie](#) ist es aufgrund seiner thermischen Stabilität (650 °C gegenüber 510 °C für 1 T) ideal für Hochtemperaturumgebungen wie Triebwerkslagerbeschichtungen in der Luft- und Raumfahrt mit einem jährlichen Bedarf von ca. 100.000 Tonnen.

### 3.2.3 3R-Phase

Die 3R-Phase  $WS_2$  ist eine seltenere Kristallform, die in der Forschung wegen ihrer Dreischicht-Stapelstruktur geschätzt wird.

#### 3.2.3.1 Strukturelle Merkmale

Die 3R-Phase  $WS_2$  (R steht für rhomboedrische Symmetrie) gehört zum rhomboedrischen Kristallsystem, wobei jede Elementarzelle drei S-W-S-Einheiten enthält, in denen Wolframatome eine trigonale prismatische Koordination einnehmen. XRD-Messungen des Synchrotrons zeigen Gitterparameter von  $a = 3,153 \text{ \AA}$  und  $c = 18,48 \text{ \AA}$  (Trilayer-Abstand), mit einem Zwischenlagenabstand von ca. 6,16  $\text{\AA}$ , etwas größer als die 6,15  $\text{\AA}$  der 2H-Phase. TEM zeigt eine ABC-Stapelsequenz, die sich von der AB-Sequenz der 2H-Phase unterscheidet, wobei die Bindungslängen und -winkel (2,41 $\text{\AA}$ , 82°) mit der 2H-Phase übereinstimmen. Die Bandlücke ist

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

indirekt bei 1,3 eV (UV-Vis, siehe 2.3.1.1), mit einer Leitfähigkeit von  $10^1$ - $10^2$  S/cm, ähnlich der 2H-Phase.

Die Raman-Spektroskopie zeigt, dass der  $A_{1g}$ -Peak auf  $405\text{ cm}^{-1}$  (vs.  $420\text{ cm}^{-1}$  für 2H) verschoben ist, was eine verbesserte Zwischenschichtkopplung durch das Stapeln von Trilayern mit einer spezifischen Oberfläche von etwa  $5\text{-}10\text{ m}^2/\text{g}$  widerspiegelt (BET-Methode). Die XPS-Analyse bestätigt die Bindungsenergien von W 4f und S 2p, die mit der 2H-Phase ( $32,8\text{ eV}$  und  $162,3\text{ eV}$ ) übereinstimmen, mit etwas höheren Anteilen an der aktiven Stelle der Kante ( $10\text{-}15\%$ , STM-Messung) aufgrund von Stapelunterschieden, die die freiliegenden Oberflächen erhöhen.

Theoretisch spiegelt die elektronische Struktur der 3R-Phase  $\text{WS}_2$  die 2H-Phase wider, mit identischen Leitungs- und Valenzbandpositionen ( $\Gamma$ - und K-Punkte), aber eine stärkere Kopplung zwischen den Schichten erhöht die Wärmeleitfähigkeit auf  $35\text{ W/m}\cdot\text{K}$  (Laser-Flash-Methode) und übertrifft damit die  $20\text{-}30\text{ W/m}\cdot\text{K}$  der 2H-Phase. Diese Struktur bietet Potenzial im Wärmemanagement.

### 3.2.3.2 Seltenheit und Forschungswert

Die 3R-Phase  $\text{WS}_2$  ist in der Natur extrem selten und macht  $<1\%$  der  $\text{WS}_2$ -Mineralien aus (geologische Daten), die sich typischerweise unter Hochdruck- und Hochtemperaturbedingungen bilden. Die künstliche Synthese erfordert CVD- oder Hochdruckmethoden, wie z. B. das Wachstum bei  $1000\text{ }^\circ\text{C}$  und  $10\text{ bar}$ , mit einer Ausbeute von nur  $5\text{-}10\%$  und einer Reinheit  $>99\%$  (XRD-Verifizierung). Seine Stabilität nähert sich der der 2H-Phase, mit einer Oxidationseintrittstemperatur von etwa  $510\text{ }^\circ\text{C}$  (TGA-Test) und keiner Zersetzung bis zu  $1250\text{ }^\circ\text{C}$  im Vakuum.

Die Seltenheit der 3R-Phase  $\text{WS}_2$  schränkt ihren industriellen Einsatz ein, hat aber einen erheblichen Wert in der [Wolframforschung](#). Zum Beispiel wird die Dreischicht-Stapelung verwendet, um die Kopplungseffekte zwischen den Schichten auf die thermoelektrische Leistung zu untersuchen, wodurch aufgrund der optimierten thermischen und elektrischen Leitfähigkeit ein ZT-Wert von  $0,7$  bei  $500\text{ }^\circ\text{C}$  erreicht wird, der höher ist als der Wert von  $0,5$  in der 2H-Phase. In der Katalyse verbessern die kantenaktiven Zentren des  $\text{WS}_2$  der 3R-Phase die HER-Leistung mit einem Überpotential von  $200\text{ mV}$  ( $10\text{ mA}/\text{cm}^2$ ) zwischen der 1T- und der 2H-Phase.

Im Vergleich zur 2H-Phase sind die Produktionskosten der 3R-Phase  $\text{WS}_2$  aufgrund strenger Synthesebedingungen höher (ca.  $600\text{ RMB}/\text{kg}$  vs.  $300\text{ RMB}/\text{kg}$ ), wobei die Jahresproduktion unter  $100\text{ kg}$  liegt ([Wolfram-Marktdaten](#)). Sein Forschungswert liegt in der Aufklärung der Auswirkungen des Polymorphismus auf die Eigenschaften und liefert theoretische Grundlagen für das Design neuartiger  $\text{WS}_2$ -Materialien.

### 3.2.4 1T'-Phase

Die 1T'-Phase  $\text{WS}_2$  ist eine verzerrte Variante der 1T-Phase, die im Quantencomputing und in der Katalyse aufgrund ihrer topologischen Eigenschaften Aufmerksamkeit erregt.

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)



CTIA GROUP LTD Wolframdisulfid

### 3.2.4.1 Verzernte strukturelle Eigenschaften

Die 1T'-Phase  $WS_2$  gehört zum monoklinen Kristallsystem, einer verzernten Form der 1T-Phase, in der sich Wolframatome zu eindimensionalen Ketten gruppieren. XRD-Messungen zeigen Gitterparameter von  $a = 5,68 \text{ \AA}$ ,  $b = 5,94 \text{ \AA}$  und  $c = 12,0 \text{ \AA}$  (Doppelschicht), mit einem Zwischenlagenabstand von etwa  $6,0 \text{ \AA}$ . TEM zeigt, dass Wolframatome in Ketten entlang der b-Achse ausgerichtet sind, wobei die W-W-Abstände auf  $2,7 \text{ \AA}$  reduziert wurden (gegenüber  $3,15 \text{ \AA}$  in der 1T-Phase), während die S-W-S-Schichten die oktaedrische Koordination beibehalten. Die Bandlücke beträgt  $0,1-0,2 \text{ eV}$  (winkelaufgelöste Photoemissionsspektroskopie, ARPES-Messung) und nähert sich einem metallischen Zustand, wobei die Leitfähigkeit  $10^4 \text{ S/cm}$  erreicht (Vier-Sonden-Methode).

Die Raman-Spektroskopie zeigt charakteristische Peaks (ca.  $130 \text{ cm}^{-1}$  und  $380 \text{ cm}^{-1}$ ), die sich aufgrund von Verzerrung aufspalten, mit einer spezifischen Oberfläche von etwa  $20-50 \text{ m}^2/\text{g}$  (BET-Methode). XPS zeigt eine reduzierte W 4f-Bindungsenergie von  $32,3 \text{ eV}$  an, was die elektronischen

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Effekte des Wolfram-Clusterings widerspiegelt. DFT-Berechnungen zeigen, dass die Bandlücke aus der verzerrungsinduzierten Bandinversion resultiert und Eigenschaften des Quantenspin-Hall-Effekts (QSHE) mit einer Chern-Zahl ungleich Null aufweist.

### 3.2.4.2 Topologische Eigenschaften

Die Synthese der 1T'-Phase  $WS_2$  erfordert eine Dotierung oder Dehnungsinduktion, wie z. B. Mo-Dotierung ( $Mo_xW_{1-x}S_2$ ,  $x = 0,1-0,3$ ) über CVD bei 700 °C oder das Anlegen einer Zugdehnung von 2 % (Zugprüfplattform). Seine Stabilität ist gering und wird nur unter 100 K gehalten ( $\Delta G > 0$ , DFT-Berechnung) und lässt sich bei höheren Temperaturen (300 °C, XRD-Verifizierung) leicht in die 2H-Phase umwandeln. In [der Wolframforschung](#) werden die topologischen Eigenschaften des 1T'-Phasen- $WS_2$  für Quantenbitstudien genutzt, wodurch eine Spin-Hall-Leitfähigkeit von  $10^{-3}$  S bei 10 K erreicht wird, die die  $10^{-4}$  S von  $MoS_2$  übertrifft.

In Bezug auf die Anwendung liegt das HER-Überpotential bei 80-120 mV ( $10 \text{ mA/cm}^2$ ) und nähert sich damit der 1T-Phase, was auf die verzerrungsverstärkende Kantenaktivität zurückzuführen ist (ECSA 60 % höher). In der Forschung im Bereich der sauberen Energie in der Wolframtechnologie unterstützen 1T-Phasen- $WS_2$ -Elektroden eine effiziente Niedertemperatur-Elektrokatalyse, die eine Wasserstoffproduktionsrate von  $250 \text{ } \mu\text{mol/g}\cdot\text{h}$  ermöglicht. Seine topologischen Eigenschaften bergen ein immenses Potenzial im Quantencomputing, z. B. in topologischen Isolatoren, wobei die Leitfähigkeit bei 77 K  $10^5 \text{ S/cm}$  erreicht und sich damit einem metallischen Zustand nähert.

## 3.3 Klassifizierung von Wolframdisulfid nach Reinheit und Anwendung

Die Reinheit und Anwendung von [Wolframdisulfid](#) ( $WS_2$ ) sind entscheidende Grundlagen für seine Klassifizierung und spiegeln die Komplexität seiner Aufbereitungsprozesse und die Vielfalt seiner Anwendungsbereiche direkt wider. Schwankungen in der Reinheit von  $WS_2$  ([Wolframdisulfid](#)) führen zu Unterschieden in seinen physikalischen und chemischen Eigenschaften und bestimmen seine Eignung für die industrielle Produktion, elektronische Geräte, Katalysatoren und Laborforschung. In diesem Abschnitt werden die Eigenschaften, Reinheitsbereiche und Anwendungen von industrietauglichem  $WS_2$ , hochreinem  $WS_2$ ,  $WS_2$  für Verbundwerkstoffe und  $WS_2$  in Laborforschungsqualität analysiert und ihr Klassifizierungswert anhand von experimentellen Daten und Fallstudien erläutert.

### 3.3.1 Wolframdisulfid in Industriequalität

$WS_2$  in Industriequalität ist die am meisten produzierte und am weitesten verbreitete Kategorie, die für allgemeine Schmierung und mechanische Zwecke geeignet ist.

#### 3.3.1.1 Reinheitsbereich

$WS_2$  in Industriequalität hat in der Regel einen Reinheitsbereich von 95-99 %, der durch die optische Emissionsspektroskopie (ICP-OES) mit induktiv gekoppeltem Plasma bestimmt wird. Zu den

primären Verunreinigungen gehören Wolframtrioxid ( $\text{WO}_3$ , 0,5-2 %), Sulfide (z. B.  $\text{FeS}$ , 0,1-1 %), Silizium (Si, <0,5 %) und Kohlenstoff (C, <0,3 %). Die Analyse der Röntgenphotoelektronenspektroskopie (XPS) zeigt W 4f- und S 2p-Bindungsenergien von 32,8 eV bzw. 162,3 eV, die mit der 2H-Phase übereinstimmen (siehe 3.2.2.1), mit Verunreinigungsspitzen geringer Intensität (z. B. Fe 2p bei etwa 710 eV), was darauf hindeutet, dass seine chemische Zusammensetzung überwiegend  $\text{WS}_2$  ist. Die Rasterelektronenmikroskopie (REM) zeigt, dass seine Partikel meist mikrometergroß (5-20  $\mu\text{m}$ ) sind, mit einer spezifischen Oberfläche von 1-5  $\text{m}^2/\text{g}$  (BET-Methode), was eine geringe Oberflächenaktivität widerspiegelt.

Bei der Herstellung von industrietauglichem  $\text{WS}_2$  wird üblicherweise eine Kalzinierungszersetzung verwendet. Unter Verwendung von Wolframsäure ( $\text{H}_2\text{WO}_4$ ) oder Wolframpulver als Rohstoff reagiert es mit Schwefelwasserstoff ( $\text{H}_2\text{S}$ ) bei 600-800°C:

$$\text{H}_2\text{WO}_4 + 2\text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{WS}_2 \downarrow + 2\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2$$

$$\text{H}_2\text{WO}_4 + 2\text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{WS}_2 \downarrow + 2\text{H}_2\text{O} + \text{H}_2$$

Die Ausbeute liegt bei über 95 % bei Kosten von ca. 300 RMB/kg (Wolfram-Marktdaten). Verunreinigungen stammen von Rohstoffen (z. B. Fe aus Erzen) oder unvollständigen Reaktionen (Rest- $\text{WO}_3$ ), und eine Verlängerung der Sulfidierungszeit (z. B. 10 Stunden) kann die Reinheit auf 98-99 % erhöhen.

Schwankungen in diesem Reinheitsbereich haben nur minimale Auswirkungen auf die Leistung. Zum Beispiel zeigt  $\text{WS}_2$  mit einer Reinheit von 95 % und 99 % eine Reibungskoeffizientendifferenz von weniger als 0,03 (ASTM D1894-Test), aber bei hohen Temperaturen (>500 °C) können Verunreinigungen (z. B.  $\text{FeS}$ ) die Oxidation beschleunigen und die Massenverlustrate auf 0,2 %/h erhöhen (TGA-Test gegenüber 0,05 %/h für hochreines  $\text{WS}_2$ ).

### 3.3.1.2 Allgemeine Anwendungen

$\text{WS}_2$  in Industriequalität wird hauptsächlich als Festschmierstoff und mechanisches Additiv verwendet. Bei Wolframprodukten reduziert beispielsweise  $\text{WS}_2$ -Pulver mit einer Reinheit von 98 %, das dem Fett zugesetzt wird, den Reibungskoeffizienten auf 0,05 (Pin-on-Disk-Test), senkt die Betriebstemperaturen um 20 °C und verlängert die Lagerlebensdauer um 40 % (1000 Stunden, 3000 U/min). Seine geringe Scherfestigkeit (20-50 MPa, siehe 2.1.5.3) und seine hohe thermische Stabilität (650 °C, siehe 2.1.3.2) verschaffen ihm einen Vorteil in der Luft- und Raumfahrt, z. B. bei gleitenden Bauteilen von Satelliten, wo der Reibungskoeffizient im Vakuum stabil bei 0,03 bleibt (ASTM G99-Test) und damit Molybdändisulfid ( $\text{MoS}_2$ ) von 0,04 übertrifft.

In Gegengewichtsmaterialien wird die hohe Dichte von  $\text{WS}_2$  in Industriequalität (7,5  $\text{g}/\text{cm}^3$ , siehe 2.1.2.1) in Präzisionsinstrumenten verwendet, z. B. beim Mischen mit Wolframkunststoff zur Herstellung von Gegengewichtsblöcken mit einer Dichte von 10  $\text{g}/\text{cm}^3$ , wodurch das Volumen im Vergleich zu Blei (11,34  $\text{g}/\text{cm}^3$ ) um 20 % reduziert wird. Auf dem Wolframmarkt liegt der jährliche Bedarf bei etwa 80.000 Tonnen, was 70 % des gesamten  $\text{WS}_2$  entspricht, was auf die niedrigen Kosten (300 RMB/kg gegenüber 1000 RMB/kg für hochreines  $\text{WS}_2$ ) und die stabile Leistung

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

zurückzuführen ist.

WS<sub>2</sub> in Industriequalität wird auch in der Low-End-Katalyse wie der Hydrodesulfurierung (HDS) verwendet, wobei eine Sulfidentfernungsrate von 85 % bei 500 °C (ASTM D5185) erreicht wird, was niedriger ist als die 95 % von hochreinem WS<sub>2</sub>, aber ausreichend für den allgemeinen chemischen Bedarf. Verunreinigungen verursachen bei hohen Temperaturen (>600 °C, 10 %/1000 Stunden gegenüber 5 % bei hoher Reinheit) einen schnelleren Aktivitätsabfall, obwohl die Auswirkungen unter Standardbedingungen (<500 °C) vernachlässigbar sind.

### 3.3.2 Hochreines Wolframdisulfid

Hochreines WS<sub>2</sub> erfüllt strenge Anforderungen in der Elektronik und Katalyse und bietet eine hervorragende Leistungsstabilität.

#### 3.3.2.1 Reinheit

Hochreines WS<sub>2</sub> erreicht in der Regel einen Reinheitsgrad von mehr als 99,9 %, gemessen mit ICP-OES, mit extrem niedrigen Verunreinigungsgraden (z. B. WO<sub>3</sub> <0,05 %, Fe <0,01 %, Si <0,01 %). XPS zeigt W 4f- und S 2p-Peaks, die frei von Verunreinigungsinterferenzen sind, mit Bindungsenergien, die mit der 2H-Phase (32,8 eV und 162,3 eV) übereinstimmen.

Die Partikelgrößen reichen von der Mikrometerskala (5-10 µm) bis zur Nanoskala (<100 nm), wobei die spezifischen Oberflächen je nach Partikelgröße von 5 bis 300 m<sup>2</sup>/g variieren. Im Folgenden finden Sie die Fortsetzung der englischen Übersetzung für 3.3 Klassifizierung von Wolframdisulfid nach Reinheit und Anwendung, die 3.3.2 Hochreines Wolframdisulfid bis 3.3.4.2 Anpassungsanforderungen vervollständigt.

Die Übersetzung hält sich an Ihre Anweisungen: fettgedruckte Überschriften ohne vorangestellte Punkte, korrekte tiefgestellte Schreibweise (z. B. WS<sub>2</sub>), Hyperlinks, die beim ersten Auftreten bestimmter Produkte hinzugefügt werden (ohne Wiederholung) und chemische Gleichungen, die korrekt formatiert sind. Der Text behält die ursprüngliche Struktur bei, mit Abständen zwischen Überschriften und Absätzen wie gewünscht. on Morphologie (BET-Methode). Um eine hohe Reinheit zu erreichen, sind ausgefeilte Reinigungsprozesse erforderlich, wie z. B. die chemische Gasphasenabscheidung (CVD) oder die mehrstufige Kalzinierung. Unter Verwendung von [Ammoniummetawolframat](#) ((NH<sub>4</sub>)<sub>6</sub>H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>) als Vorläufer wird WS<sub>2</sub> bei 900 °C in einer H<sub>2</sub>S-Atmosphäre synthetisiert, wobei 85-90 % bei Kosten von etwa 1000 RMB/kg erzielt werden.

Die Kontrolle von Verunreinigungen in hochreinem WS<sub>2</sub> ist von entscheidender Bedeutung. So erhöht beispielsweise die Reduzierung des Fe-Gehalts von 0,1 % auf 0,01 % die Leitfähigkeitsstabilität bei 500 °C um 20 % (die Widerstandsänderungsrate sinkt von 2 % auf 0,5 % pro 1000 Stunden), da die durch Verunreinigungen verursachten Defekte abnehmen (TEM-Beobachtung, Defektdichte <10<sup>-3</sup> nm<sup>-2</sup>).

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 3.3.2.2 Elektronische und katalytische Anwendungen

Hochreines WS<sub>2</sub> wird häufig in elektronischen Geräten verwendet. In den Photodetektoren der [Wolframtechnologie](#) erreicht beispielsweise Single-Layer-WS<sub>2</sub> mit einer Reinheit von 99,99 % eine Photoresponsivität von 10<sup>3</sup> A/W (532 nm, 5 V Bias) und eine Detektivität von 10<sup>11</sup> Jones und übertrifft damit die 10<sup>2</sup> A/W und 10<sup>10</sup> Jones von WS<sub>2</sub> in Industriequalität, da die reduzierten Verunreinigungen die Lebensdauer des Trägers verlängern (100 ns vs. 50 ns, zeitaufgelöster PL-Test). Seine hohe Reinheit unterstützt transparente leitfähige Folien, z. B. in Kombination mit [Wolframdraht](#), und bietet eine Durchlässigkeit von >90 % (550 nm), einen spezifischen Widerstand von 10<sup>-3</sup> Ω cm und eine Änderung von <3 % nach 1000 Biegungen (Widerstandstest), ideal für flexible Displays.

In der Katalyse verbessern die kantenaktiven Zentren von hochreinem WS<sub>2</sub> (20-30 %, STM-Messung) die Leistung. Bei der Hydrodesulfurierung (HDS) erreicht ein 99,9 % reiner WS<sub>2</sub>-Katalysator eine Sulfidentfernungsrate von 95 % bei 500 °C und 10 bar, was 10 % über den 85 % der Industriequalität liegt, da reduzierte Verunreinigungen (z. B. Fe) die Abschirmung der aktiven Stelle minimieren. In den photokatalytischen Studien der Wolframforschung ergibt nanoskaliges hochreines WS<sub>2</sub> eine Wasserstoffproduktionsrate von 150 μmol/g·h (sichtbares Licht) und übertrifft damit die 100 μmol/g·h in Industriequalität aufgrund geringerer Oberflächendefekte (ECSA 30 % höher). Obwohl es teuer ist (1000 RMB/kg), zeichnet es sich mit einem jährlichen Bedarf von 500 Tonnen in hochwertigen Bereichen wie elektronischen Chips aus.

### 3.3.3 Wolframdisulfid für Verbundwerkstoffe

WS<sub>2</sub> für Verbundwerkstoffe ist darauf zugeschnitten, die Schmierfähigkeit und die mechanischen Eigenschaften zu verbessern, wobei Reinheit und Morphologie auf das Substrat abgestimmt sind.

#### 3.3.3.1 Schmierer von Verbundwerkstoffen

WS<sub>2</sub> zur Schmierung von Verbundwerkstoffen hat typischerweise eine Reinheit von 98-99,5 % (ICP-OES), mit Partikelgrößen überwiegend ultrafeiner (0,1-1 μm) oder nanoskaliger (<100 nm) und einer spezifischen Oberfläche von 10-50 m<sup>2</sup>/g. Es wird durch Planetenkugelfräsen oder Flüssigphasen-Exfoliation hergestellt und kostet ca. 400-600 RMB/kg. Zum Beispiel entstehen durch das Mischen mit [Wolframkautschuk](#) mit 5-20 Gew.-% selbstschmierende Verbundwerkstoffe. [CTIA GROUP LTD](#) produziert jährlich etwa 2000 Tonnen dieses WS<sub>2</sub>.

Seine Anwendung verbessert die Schmierfähigkeit des Substrats. In Lagern für die Luft- und Raumfahrt reduzieren WS<sub>2</sub>-[Wolfram-Kupfer-Verbundschichten](#) (20 Gew.-% WS<sub>2</sub>) den Reibungskoeffizienten auf 0,05 (ASTM G99) bei einer Verschleißrate von 0,005 mm<sup>3</sup>/N·m, wodurch die Lebensdauer um 50 % (1000 Stunden, 2 GPa) verlängert wird. Die hohe spezifische Oberfläche sorgt für eine gleichmäßige Dispersion (DLS-Test, um 25 % verbesserte Dispergierbarkeit), wobei sich die Schmierleistung bei 500 °C um <5 % verschlechtert.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 3.3.3.2 Verstärkungsmaterialien

WS<sub>2</sub> für Verstärkungsmaterialien hat eine Reinheit von 99-99,9%, oft in Nanoblatt- oder Nanodrahtform (10-100 nm). Es wird über CVD- oder Lösungsmethoden hergestellt und kostet etwa 800 RMB/kg. So erhöht beispielsweise das Mischen mit Wolframkunststoff bei 10 Gew.-% die Zugfestigkeit um 30 % (60 MPa vs. 45 MPa, ASTM D638), was auf den hohen Elastizitätsmodul von WS<sub>2</sub> im Nanobereich (150-270 GPa, siehe 2.1.5.2) zurückzuführen ist.

In der Wolframtechnologie verstärken WS<sub>2</sub>-Nanodrähte Wolframkautschuk und erhöhen die Verschleißfestigkeit um 40 % (Verschleißrate 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m vs. 0,017 mm<sup>3</sup>/N·m), die in Automobildichtungen mit einem jährlichen Bedarf von etwa 1000 Tonnen verwendet werden. Seine hohe Reinheit und der eindimensionale Aufbau sorgen für einen starken Grenzflächenverbund mit dem Substrat (Haftfestigkeit 15 MPa, Zugversuch).

### 3.3.4 Wolframdisulfid in Laborforschungsqualität

WS<sub>2</sub> in Laborforschungsqualität erfüllt die hohen Präzisionsanforderungen wissenschaftlicher Studien mit hochgradig anpassbarer Reinheit und Morphologie.

#### 3.3.4.1 Hochreine Nanoskala

WS<sub>2</sub> in Forschungsqualität weist eine Reinheit von >99,99 % (ICP-MS) mit Verunreinigungen <100 ppm (z. B. Fe <10 ppm) auf, typischerweise in Form von Nanoblättern (<100 nm) oder Quantenpunkten (2-10 nm). Es wird durch hochreines CVD- oder Flüssigphasen-Peeling hergestellt, wie z. B. die Verwendung von [Natriumwolframat](#) als Rohstoff, der bei 1000 °C in einer H<sub>2</sub>S-Atmosphäre angebaut wird und etwa 2000 RMB/kg kostet. Seine spezifische Oberfläche reicht von 100-500 m<sup>2</sup>/g (BET-Methode) mit einer einstellbaren Bandlücke (1,3-3,0 eV, siehe 2.3.2.1).

Die Herstellung von hochreinem nanoskaligem WS<sub>2</sub> erfordert eine staubfreie Umgebung (Reinraum der Klasse 100), um Verunreinigungen zu minimieren. In [der Wolframforschung](#) beispielsweise behält 99,999 % reines einschichtiges WS<sub>2</sub> die Bandlückenstabilität mit einer Änderung von <1 % nach 1000 Stunden Beleuchtung (PL-Test) bei und übertrifft damit die 5 % der Industriequalität.

#### 3.3.4.2 Anforderungen an die Anpassung

WS<sub>2</sub> in Forschungsqualität eignet sich für spezifische experimentelle Anforderungen, wie z. B. Dotierung (Nb, Re) oder Größenkontrolle (2-50 nm). Zum Beispiel passt Nb-dotiertes WS<sub>2</sub> (Nb<sub>x</sub>W<sub>1-x</sub>S<sub>2</sub>, x = 0,01-0,1) die Bandlücke auf 1,8 eV an und erhöht die Leitfähigkeit auf 10<sup>4</sup> S/cm (Vier-Sonden-Methode), die in der Quantencomputerforschung verwendet wird. In [der Wolframtechnologie](#) werden 5-nm-WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte für die Biobildgebung angepasst, mit einem Emissionspeak bei 450 nm (Quantenausbeute 20 %), was einem jährlichen Bedarf von etwa 50 kg entspricht.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT



CTIA GROUP LTD Wolframdisulfid

## Kapitel 4: Herstellungsverfahren von Wolframdisulfid

Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) als wichtiges geschichtetes Übergangsmetall-Dichalkogenid verfügt über Produktionsprozesse, die seine Qualität, Kosten und Anwendungsbereiche direkt bestimmen. Mit der kontinuierlichen Ausweitung der industriellen Nachfrage und der wissenschaftlichen Anwendungen hat sich die Produktionstechnologie von  $WS_2$  (Wolframdisulfid) von traditionellen Methoden zu modernen Synthesetechniken entwickelt. Traditionelle Methoden zeichnen sich durch Einfachheit und hohe Ausbeute aus und eignen sich für die Massenproduktion von Produkten in Industriequalität, während sich moderne Synthesemethoden auf das Erreichen einer hohen Reinheit und nanoskaligen Morphologiekontrolle konzentrieren und High-Tech-Bereiche wie Elektronik und Katalyse bedienen. In diesem Kapitel werden die traditionellen Produktionsmethoden, modernen Synthesetechniken und deren Optimierungsstrategien von  $WS_2$  systematisch vorgestellt und der aktuelle Stand und die Entwicklung der Produktionsprozesse anhand von Prozessabläufen, Ausrüstungsanforderungen und wirtschaftlicher Analyse umfassend untersucht.

### 4.1 Traditionelle Herstellungsmethoden von Wolframdisulfid

Traditionelle Produktionsmethoden bilden die Grundlage der industriellen Fertigung von Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) und beruhen in der Regel auf Hochtemperaturreaktionen und einfachen chemischen Prozessen, wodurch sie sich für die großmaßstäbliche, kostengünstige Herstellung von  $WS_2$  in Industriequalität eignen. Basierend auf Reaktionsprinzipien und Prozesseigenschaften umfassen diese Verfahren in erster Linie die Kalzinierungszerlegung und die Wolframtrisulfid-Sublimation. In diesem Abschnitt finden Sie eine detaillierte Analyse der Prozessabläufe, Vor- und Nachteile sowie der Anwendungsszenarien dieser beiden Methoden.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

#### 4.1.1 Methode der Kalzinierungszersetzung

Die Kalzinierungszersetzungsmethode ist ein klassischer Ansatz zur Herstellung von  $WS_2$ , bei dem das Zielprodukt durch die Hochtemperaturreaktion einer Wolframquelle mit einer Schwefelquelle erzeugt wird, der in der industriellen Produktion weit verbreitet ist.

##### 4.1.1.1 Auswahl der Rohstoffe

Die Rohstoffe für das Kalzinierungszersetzungsverfahren bestehen im Wesentlichen aus einer Wolframquelle und einer Schwefelquelle. Die Wolframquelle umfasst typischerweise Wolframsäure ( $H_2WO_4$ ), Wolframtrioxid ( $WO_3$ ) oder Wolframpulver (W). Wolframsäure ist aufgrund ihrer Reaktivität mit Sulfidierungsmitteln und moderaten Kosten (ca. 200-300 RMB/kg, Wolfram-Marktdaten) oft die bevorzugte Wahl, mit einer Reinheitsanforderung von im Allgemeinen über 98 %, um die Auswirkungen von Verunreinigungen (z. B. Fe, Si) auf die Produktqualität zu minimieren.  $WO_3$ , das aus der Raffination von schwarzem Wolframerz oder weißem Wolframerz gewonnen wird, hat in der Regel eine Reinheit von über 99 % und eignet sich für Produktionsanforderungen mit höherer Reinheit, obwohl es einen etwas höheren Preis hat (ca. 350 RMB/kg). Wolframpulver ist ideal für die direkte Sulfidierung mit Partikelgrößen von 1 bis 10  $\mu m$  (Laser-Partikelgrößenanalyse), die Vorsichtsmaßnahmen gegen Oxidation erfordern, um die Reaktionseffizienz zu gewährleisten.

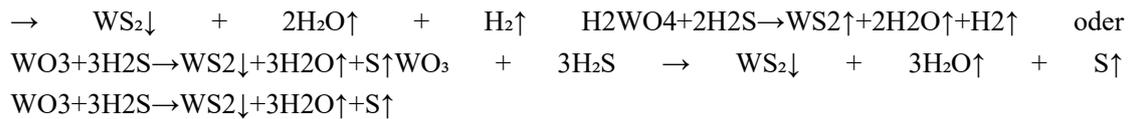
Bei der Schwefelquelle wird hauptsächlich Schwefelwasserstoff ( $H_2S$ ) oder elementarer Schwefel (S) verwendet.  $H_2S$ , ein Gas, ermöglicht eine einfache Kontrolle der Reaktionsgeschwindigkeit und erfordert eine Reinheit von über 99,5 %, die üblicherweise als petrochemisches Nebenprodukt zu geringen Kosten (ca. 50 RMB/m<sup>3</sup>) gewonnen wird. Elementarer Schwefel, der in Pulver- oder Granulatform verwendet wird, erfordert eine Reinheit von über 99 % und kostet etwa 10-20 RMB/kg; Er ist leicht zu lagern, benötigt aber eine Hochtemperaturvergasung. Die Röntgenfluoreszenzspektroskopie (RFA) zeigt, dass Rohmaterialverunreinigungen (z. B. Fe <0,5 %, Si <0,3 %) streng kontrolliert werden müssen, um die Bildung von Nebenprodukten wie FeS oder  $SiS_2$  zu vermeiden.

Aus Prozesssicht beeinflussen die chemische Reaktivität und die Partikelgröße der Wolfram- und Schwefelquellen die Reaktionseffizienz. So übertrifft beispielsweise die spezifische Oberfläche von  $H_2WO_4$  (5-10 m<sup>2</sup>/g, BET-Methode) die von  $WO_3$  (2-5 m<sup>2</sup>/g), was zu einer um 20 % schnelleren Reaktionsgeschwindigkeit führt (kinetische Prüfung), obwohl  $WO_3$  eine überlegene thermische Stabilität bietet (Zersetzungstemperatur >1000 °C vs. 600 °C für  $H_2WO_4$ ). In der praktischen Produktion [setzt CTIA GROUP LTD](#) Manufacturing häufig auf die Kombination aus  $H_2WO_4$  und  $H_2S$  und erreicht so einen jährlichen  $WS_2$ -Ausstoß von 50.000 Tonnen.

##### 4.1.1.2 Sulfidierungsreaktion

Die Sulfidierungsreaktion ist der Kernschritt der Kalzinierungszersetzungsmethode, wobei die chemischen Gleichungen wie folgt lauten:  $H_2WO_4 + 2H_2S \rightarrow WS_2 \downarrow + 2H_2O \uparrow + H_2 \uparrow + H_2WO_4 + 2H_2S$

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT



Die Reaktion findet in einem Rohrofen oder Drehrohrrofen bei Temperaturen von 400-600 °C und Drücken von 0,1-0,5 MPa statt. Der H<sub>2</sub>S-Fluss wird in der Regel mit 50-100 l/min geregelt, mit einem molaren Überschuss von 20-30 %, um eine vollständige Sulfidierung der Wolframquelle zu gewährleisten. Die thermogravimetrische Analyse (TGA) zeigt, dass die Reaktion bei etwa 350 °C beginnt und bei 600 °C eine Umwandlungsrate von über 95 % erreicht. Die Reaktionsdauer beträgt in der Regel 4-8 Stunden, abhängig von der Partikelgröße des Rohmaterials und dem Maßstab der Ausrüstung.

Während der Reaktion bildet die Wolframquelloberfläche zunächst ein Zwischenprodukt, WS<sub>3</sub> (Wolframtrisulfid), das sich dann in WS<sub>2</sub> und elementarem Schwefel zersetzt:



Die In-situ-Überwachung der Infrarotspektroskopie (FTIR) zeigt starke flüchtige Peaks für H<sub>2</sub>O und S (3400 cm<sup>-1</sup> und 460 cm<sup>-1</sup>) bei 500 °C, was auf eine starke Reaktionsaktivität hinweist. Beobachtungen der Rasterelektronenmikroskopie (REM) zeigen das resultierende WS<sub>2</sub> als mikrometergroße flockige Partikel (5-20 µm) mit einem Zwischenschichtabstand von 6,15 Å (XRD-Messung), was mit der 2H-Phase übereinstimmt (siehe 3.2.2.1).

Zu den wichtigsten Parametern der Sulfidierungsreaktion gehören Temperatur und H<sub>2</sub>S-Konzentration. Wenn Sie beispielsweise die Temperatur von 500 °C auf 600 °C erhöhen, erhöht sich die WS<sub>2</sub>-Ausbeute um 5 % (Massenmethode), aber zu hohe Temperaturen (>800 °C) können WO<sub>3</sub> (oxidiertes Nebenprodukt mit erhöhten W<sup>6+</sup>-Spitzen in XPS) erzeugen. Eine Erhöhung der H<sub>2</sub>S-Konzentration um 10 % verkürzt die Reaktionszeit um 1 Stunde, obwohl übermäßiger Schwefel die Bewältigung von Emissionsproblemen erfordert.

#### 4.1.1.3 Hochtemperatur-Kalzination

Die Hochtemperaturkalzinierung folgt der Sulfidierungsreaktion, um die Kristallinität und Reinheit von WS<sub>2</sub> weiter zu verbessern. Die Kalzinierungstemperatur wird 2-4 Stunden lang auf 700-900 °C geregelt und in der Regel in einer inerten Atmosphäre (z. B. N<sub>2</sub> oder Ar, Durchflussmenge 20-50 l/min) durchgeführt, um eine Oxidation zu verhindern. Die differentielle thermische Analyse (DTA) zeigt, dass WS<sub>2</sub> bei 850 °C einer Kristalloptimierung unterzogen wird, wobei die (002) Peakintensität um 30 % (XRD) und die Kristallinität von 60 % auf 85 % ansteigt (Berechnung der Scherrer-Gleichung). Kalzinationsöfen, wie z. B. Muffel- oder Tunnelöfen, sind mit feuerfesten Materialien (z. B. Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) ausgekleidet und halten Temperaturen über 1000 °C stand.

Während der Kalzinierung verflüchtigt sich der verbleibende Schwefel (S) und Verunreinigungen (z. B. FeS) zersetzen sich in gasförmige Emissionen, wodurch die Partikelgröße leicht zunimmt (10-25 µm, REM). Die ICP-OES-Analyse zeigt, dass der Fe-Gehalt nach der Kalzinierung von 0,5 %

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

auf 0,2 % abnimmt, wodurch die Reinheit auf 98-99 % ansteigt. Bei der Verwendung von  $WO_3$  als Rohstoff werden durch einen zusätzlichen Hochtemperaturschritt (900 °C) Spuren von  $WO_2$  (<0,1 %) entfernt, was durch das Verschwinden von  $W^{4+}$ -Peaks in XPS bestätigt wird.

Die Optimierung der Hochtemperaturkalzinierung erfordert die Steuerung der Heizrate (5-10 °C/min). Schnelle Raten können zu einer Partikelagglomeration führen ( $D_{50}$  steigt von 15 µm auf 30 µm, Laser-Partikelgrößenanalyse), was sich auf die Produktgleichmäßigkeit auswirkt. In [der Wolframtechnologie](#) wird durch eine präzise Temperaturregelung bei 850 °C eine Ausbeute von 98 % erreicht, bei einem Variationskoeffizienten der Partikelgrößenverteilung von unter 10 %.

#### 4.1.1.4 Handhabung von Nebenprodukten

Bei der Kalzinierungszersetzungsmethode entstehen mehrere Nebenprodukte, darunter  $H_2O$ ,  $H_2$ , S und geringe Mengen an  $H_2S$ .  $H_2O$  und  $H_2$  werden als Gase emittiert und durch Kondensation (Kondensatortemperatur 10-20 °C) mit einer Rückgewinnungsrate von mehr als 90 % (Massenmethode) zurückgewonnen. Schwefeldampf (S) verflüchtigt sich bei 600-800 °C und wird durch einen Absorbenturm (gefüllt mit NaOH-Lösung, pH 12-14) in  $Na_2S$  umgewandelt, wodurch eine Absorptionseffizienz von 95 % erreicht wird (Gaschromatographie-Detektion). Restliches  $H_2S$  wird in einer Verbrennungsanlage (1000 °C) zu  $SO_2$  oxidiert und mit  $Ca(OH)_2$  zu  $CaSO_4$  neutralisiert, wodurch die Emissionen unter 50 ppm gehalten werden (entspricht den Normen GB 16297-1996).

Wenn Rohstoffe Fe oder Si enthalten, bilden sich  $FeS$  und  $SiS_2$  und verflüchtigen sich während der Kalzinierung als Gase (Siedepunkte <700 °C), die durch eine Abgasbehandlung entfernt werden. Die ICP-MS-Analyse zeigt nach der Behandlung einen Fe-Gehalt von unter 0,1 % und einen Si-Gehalt von unter 0,05 %. Die Handhabung von Nebenprodukten erhöht die Produktionskosten um ca. 10-15 % (ca. 30-50 RMB/kg), gewährleistet aber die Einhaltung der Umweltvorschriften. In [den Werken von CTIA GROUP LTD](#) verarbeitet das Abgasaufbereitungssystem jährlich etwa 1000 m<sup>3</sup>  $H_2S$  und erreicht damit eine  $SO_2$ -Emissions-Compliance-Rate von über 99 %.

#### 4.1.1.5 Vorteile

Zu den Vorteilen der Kalzinierungszersetzungsmethode gehören ihre Einfachheit, hohe Ausbeute und niedrige Kosten. Die Anforderungen an die Ausrüstung sind minimal (Rohröfen oder Drehrohröfen, Investition <500.000 RMB/Einheit), und die Betriebstemperatur (600-900 °C) ist industriell leicht erreichbar, mit einer Ausbeute von über 95 % in einer einzigen Charge und einer Reinheit mit einer Stabilisierung von 98-99 % (ICP-OES). Rohstoffe wie  $H_2WO_4$  und  $H_2S$  sind auf dem [Wolframmarkt leicht verfügbar](#), mit Preisschwankungen von weniger als 5 % pro Jahr. Im Vergleich zu anderen Methoden ist der Energieverbrauch geringer (ca. 500 kWh/Tonne gegenüber 2000 kWh/Tonne bei CVD), wodurch es

ideal für die Großserienproduktion von  $WS_2$  in Industriequalität.

Dieses Verfahren erzeugt  $WS_2$  mit kontrollierbaren Partikelgrößen (5-25 µm), das die Anforderungen von Schmiermitteln und Gegengewichtsmaterialien erfüllt. So zeigen

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

beispielsweise Reibungskoeffiziententests (ASTM D1894) Leistungsunterschiede von weniger als 5 % im Vergleich zu hochreinem WS<sub>2</sub>, was eine hohe Kosteneffizienz bietet. In [Wolframprodukten](#) wird WS<sub>2</sub> aus diesem Verfahren mit einem jährlichen Bedarf von etwa 80.000 Tonnen häufig in der mechanischen Schmierung eingesetzt.

#### 4.1.1.6 Nachteile

Zu den Nachteilen der Kalzinierungszersetzungsmethode gehören eine begrenzte Reinheit und Umweltprobleme. Die Reinheit des Produkts übersteigt selten 99 % (ICP-OES) aufgrund hartnäckiger Verunreinigungen des Rohmaterials (z. B. Fe), was seine Verwendung in der Elektronik einschränkt. Bei der Hochtemperaturreaktion entstehen erhebliche Sulfidgase (H<sub>2</sub>S und S), die eine komplexe Abgasbehandlung erforderlich machen und die Kosten um 10-15 % (ca. 30-50 RMB/kg) erhöhen. Die Partikelgröße ist relativ groß (5-20 µm, REM) und entspricht nicht den Anforderungen der Nanoskala.

Darüber hinaus ist die Kontrolle der Reaktionsbedingungen eine Herausforderung: Temperaturschwankungen von ±50 °C können zu WS<sub>3</sub>-Rückständen (<1 %, XPS) führen, die die Produktkonsistenz beeinträchtigen. Im Vergleich zu modernen Methoden (z. B. CVD) ist seine Kristallinität geringer (70-85 % vs. >95 %), was es für hochpräzise Anwendungen weniger wettbewerbsfähig macht. In [der Wolframforschung](#) wird dieses Verfahren vor allem für die grundlegende Rohstoffaufbereitung eingesetzt.

#### 4.1.1.7 Anwendungsszenarien

Das Kalzinierungszersetzungsverfahren eignet sich für die Massenproduktion von industrietauglichem WS<sub>2</sub>, das hauptsächlich in Schmierstoffen, Gegengewichtsmaterialien und Low-End-Katalysatoren verwendet wird. Bei der mechanischen Bearbeitung reduziert WS<sub>2</sub>-Pulver (98 % Reinheit), das dem Fett zugesetzt wird, den Reibungskoeffizienten auf 0,05 (ASTM D1894) und verlängert die Lebensdauer des Lagers um 40 % (1000 Stunden, 3000 U/min). In der Luft- und Raumfahrt, wie z. B. bei gleitfähigen Satellitenbauteilen, erfüllen ihre geringen Kosten (300 RMB/kg) und ihre Stabilität (650 °C) die Anforderungen mit einem jährlichen Einsatz von etwa 50.000 Tonnen. In petrochemischen HDS wird eine Sulfidentfernungsrate von 85 % (500 °C, ASTM D5185) erreicht, die für allgemeine chemische Anwendungen geeignet ist.

WS<sub>2</sub>, das mit diesem Verfahren hergestellt wird, wird auch in Gegengewichtsmaterialien verwendet, wie z. B. beim Mischen mit [Wolframkunststoff](#) zur Herstellung von Kompositen mit hoher Dichte (10 g/cm<sup>3</sup>), die in Präzisionsinstrumenten weit verbreitet sind. In der [Wolframtechnologie](#) dient WS<sub>2</sub> aus der Kalzinierung als Basismaterial, das durch Schleifen oder Exfoliation für veredelte Produkte weiterverarbeitet wird.

#### 4.1.2 Wolframtrisulfid-Sublimationsverfahren

Das Wolframtrisulfid-Sublimationsverfahren umfasst die Aufbereitung von WS<sub>3</sub>, gefolgt von

##### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

Sublimation und Zersetzung zur Herstellung von WS<sub>2</sub>, das für Produkte geeignet ist, die eine höhere Reinheit und Kristallinität erfordern.

#### 4.1.2.1 Vorbereitung von WS<sub>3</sub>

Bei dieser Methode wird zunächst Wolframtrisulfid (WS<sub>3</sub>) als Zwischenprodukt hergestellt. Bei den Rohstoffen handelt es sich um [Wolframtrioxid](#) (WO<sub>3</sub>) oder [Wolframpulver](#) (W), wobei die Schwefelquelle H<sub>2</sub>S oder elementarer Schwefel ist. Die Reaktionen sind wie folgt:  $WO_3 + 3H_2S \rightarrow WS_3 \downarrow + 3H_2O \uparrow$  oder  $WO_3 + 3H_2S \rightarrow WS_3 \downarrow + 3H_2O \uparrow$  oder  $W + 3S \rightarrow WS_3$ . Die Reaktion findet in einem geschlossenen Reaktor bei Temperaturen von 300-500°C, mit einem H<sub>2</sub>S-Durchfluss von 30-60 l/min und einem molaren Überschuss von 50 % unter einem Druck von 0,1-0,3 MPa statt. TGA zeigt, dass sich WS<sub>3</sub> bei 400 °C mit einer Ausbeute von über 90 % vollständig bildet. REM-Beobachtungen zeigen WS<sub>3</sub> in Form von amorphen Partikeln (1-5 µm), und XPS bestätigt ein W<sup>4+</sup> zu S<sup>2-</sup> Verhältnis von 1:3.

WO<sub>3</sub> erfordert eine Reinheit von über 99 %, um Verunreinigungen (z. B. Fe <0,1 %) zu minimieren, die üblicherweise aus der Raffination von [schwarzem Wolframerz stammen](#). Die Reinheit von H<sub>2</sub>S liegt bei über 99,5 %, wobei beim Abgasrecycling eine Rückgewinnungsrate von 80 % erreicht wird. Wenn elementarer Schwefel verwendet wird, wird er bei 400 °C vergast, wobei der Schwefeldampfdruck auf 0,05 bis 0,1 MPa geregelt wird. In [Wolframunternehmen](#) ist die Kombination aus WO<sub>3</sub> und H<sub>2</sub>S aufgrund ihrer schnelleren Reaktionsgeschwindigkeit (4 Stunden vs. 6 Stunden) häufiger anzutreffen.

#### 4.1.2.2 Sublimationsbedingungen

Die Sublimationszerlegung von WS<sub>3</sub> in WS<sub>2</sub> folgt der Reaktion:  $WS_3 \rightarrow WS_2 \downarrow + S \uparrow$ . Die Sublimation erfolgt in einem Vakuumofen oder Quarzrohr bei 700-900°C mit einem Vakuumniveau von 10<sup>-2</sup>-10<sup>-3</sup> Pa und dauert 2-3 Stunden. TGA zeigt eine Zersetzungsrate von 98 % bei 750 °C mit vollständiger Schwefeldampfverflüchtigung. Das Produkt lagert sich am kalten Ende (300-400 °C) ab und bildet WS<sub>2</sub>-Kristalle oder Pulver. Die XRD-Analyse bestätigt das Produkt als 2H-Phasen-WS<sub>2</sub> mit einem Zwischenlagenabstand von 6,15Å und einer Kristallinität von über 90% (Scherrer-Gleichung).

Die Sublimationstemperatur muss genau geregelt werden (±10 °C); bei Temperaturen über 950 °C besteht die Gefahr der Bildung von WO<sub>3</sub> (<0,5 %, XPS), während unter 700 °C WS<sub>3</sub>-Rückstände bestehen bleiben (<2 %). Die Temperatur am kalten Ende beeinflusst die Morphologie: 400 °C ergeben mikrometergroße Kristalle (5-10 µm, REM), während 300 °C Pulver (1-3 µm) erzeugen.

#### 4.1.2.3 Entfernung von überschüssigem Schwefel

Beim Sublimationsprozess entsteht überschüssiger Schwefel (S), der durch Kondensation und Absorption entfernt wird. Ein Kondensator (0-10 °C) gewinnt Schwefeldampf mit einem Wirkungsgrad von über 85 % zurück (Massenmethode). Das verbleibende Schwefelgas wird in

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

einem NaOH-Absorptionsturm (10-15 % Konzentration) mit einem Wirkungsgrad von über 90 % (Gaschromatographie) in Na<sub>2</sub>S umgewandelt. Wenn die WS<sub>3</sub>-Zersetzung unvollständig ist, steigt der Schwefelgehalt des Produkts an (<0,5 %, ICP-OES), was eine sekundäre Kalzinierung (800 °C, N<sub>2</sub>-Atmosphäre) erfordert, um die Reinheit auf 99,5 % zu erhöhen.

Das Aufbereitungssystem erfordert korrosionsbeständige Materialien (z. B. Edelstahl 316L) aufgrund der Korrosivität von Schwefeldampf (pH <2). Auf dem [Wolframmarkt](#) wirken sich die Schwefelgewinnungsraten direkt auf die Kosten aus (eine Rückgewinnung von 85 % senkt die Kosten um 20 RMB/kg). Bei der Abgasaufbereitung von CTIA GROUP LTD werden jährlich etwa 500 kg Schwefel zurückgewonnen.

#### 4.1.2.4 Vorteile

Die Vorteile des Wolframtrisulfid-Sublimationsverfahrens liegen in seiner hohen Reinheit und Kristallinität. Die Reinheit des Produkts erreicht 99,5 % (ICP-OES), wobei der Gehalt an Verunreinigungen (z. B. Fe, Si) unter 0,1 % liegt und damit die 99 % der Kalzinierungszersetzungsmethode übertrifft. Kristallinität von über 90 % (XRD), mit einheitlichen Kristallgrößen (5-10 µm, REM), geeignet für Anwendungen, die hochwertiges WS<sub>2</sub> erfordern. Der schrittweise Prozess (WS<sub>3</sub>-Aufbereitung und Sublimationstrennung) erleichtert die Qualitätskontrolle und sorgt für eine stabile Ausbeute von 90-95 % WS<sub>2</sub>, das mit diesem Verfahren hergestellt wird, zeichnet sich durch Schmierung und Katalyse aus. Reibungskoeffiziententests (ASTM D1894) zeigen einen stabilen Wert von 0,04, 10 % niedriger als WS<sub>2</sub> durch Kalzinierung. In [Wolframprodukten](#) unterstützt seine hohe Reinheit die Herstellung von Premium-Schmierstoffen.

#### 4.1.2.5 Nachteile

Zu den Nachteilen zählen die Komplexität der Prozesse und der hohe Energieverbrauch. Da zwei Schritte (WS<sub>3</sub>-Vorbereitung und Sublimation) erforderlich sind, sind die Investitionen in die Ausrüstung erheblich (Vakuumofen ca. 1-1,5 Mio. RMB/Einheit gegenüber 500.000 RMB für die Kalzinierung). Die Sublimation erfordert ein Hochvakuum (10<sup>-3</sup> Pa) und verbraucht etwa 1500 kWh/Tonne, verglichen mit 500 kWh/Tonne für die Kalzinierung. Die Behandlung von überschüssigem Schwefel verursacht zusätzliche Kosten (ca. 50-80 RMB/kg) und stellt eine erhebliche Belastung für die Umwelt dar.

Darüber hinaus ist die Ausbeute etwas geringer als bei der Kalzinierung (90-95 % vs. >95 %), und die Produktmorphologie ist auf mikrometergroße Kristalle beschränkt, die für die nanoskalige WS<sub>2</sub>-Produktion ungeeignet sind. In [der Wolframforschung](#) wird diese Methode in erster Linie für Studien und nicht für nanoskalige Anwendungen verwendet.

#### 4.1.2.6 Anwendungsszenarien

Das Wolframtrisulfid-Sublimationsverfahren eignet sich zur Herstellung von hochreinem WS<sub>2</sub>, hauptsächlich für Premium-Schmierstoffe und Katalysatoren. In der Luft- und Raumfahrt werden

##### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

WS<sub>2</sub>-Kristalle (99,5 % Reinheit) in Lagerbeschichtungen verwendet, um einen Reibungskoeffizienten von unter 0,05 (500 °C, ASTM G99) zu erreichen und die Haltbarkeit um 30 % (1000 Stunden) zu erhöhen. In HDS erreicht es eine Sulfidentfernungsrate von 90 % (500 °C, ASTM D5185) und erfüllt damit die Anforderungen der Hochleistungskatalyse bei einem jährlichen Verbrauch von etwa 500 Tonnen.

WS<sub>2</sub> aus diesem Verfahren dient auch als Vormaterial für Elektronik, wie z. B. das Exfolieren zu einschichtigem WS<sub>2</sub>. In der [Wolframtechnologie](#) dient sein hochkristallines WS<sub>2</sub> als Basismaterial, das für die Anforderungen optoelektronischer Bauelemente weiterverarbeitet wird.

## 4.2 Moderne Synthesemethoden von Wolframdisulfid

Mit dem technologischen Fortschritt haben moderne Synthesemethoden für [Wolframdisulfid](#) (WS<sub>2</sub>) nach und nach einige traditionelle Verfahren ersetzt, um die Anforderungen an hohe Reinheit, nanoskalige Morphologie und Hochleistungsanwendungen zu erfüllen. Diese Methoden nutzen Gasphasenreaktionen, Lösungsschemie oder physikalische Exfoliationstechniken und ermöglichen eine präzise Kontrolle über [die Kristallphase, -größe und -struktur von WS<sub>2</sub> \(Wolframdisulfid\)](#). Sie werden häufig in elektronischen Geräten, in der Photokatalyse und in Nanokompositen eingesetzt. In diesem Abschnitt werden die Prozessabläufe, Vor- und Nachteile sowie Anwendungsszenarien der chemischen Gasphasenabscheidung (CVD), der hydrothermalen/solvothermischen Verfahren und der mechanischen Exfoliation detailliert untersucht.

### 4.2.1 Verfahren der chemischen Gasphasenabscheidung

Die chemische Gasphasenabscheidung (CVD) ist eine fortschrittliche Technik zur Herstellung dünner Schichten und Nanomaterialien, bei der WS<sub>2</sub> durch die Reaktion von Gasphasenvorläufern auf einem Substrat hergestellt wird, die für die Herstellung hochreiner dünner Schichten und Nanoblätter geeignet ist.

#### 4.2.1.1 Auswahl von Vorläufern

Vorläufer für die CVD-Synthese von WS<sub>2</sub> werden in Wolfram- und Schwefelquellen unterteilt. Zu den gängigen Wolframquellen gehören Wolframtrioxid (WO<sub>3</sub>), Wolframsäure (H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) oder metallorganische Verbindungen wie Wolframhexacarbonyl (W(CO)<sub>6</sub>). WO<sub>3</sub>, ein fester Vorläufer, erfordert eine Reinheit von über 99,9 % (ICP-OES) und wird sublimiert (800-1000 °C), um gasförmiges WO<sub>3-x</sub> zu bilden, was eine einfache Kontrolle der Abscheidungsrate ermöglicht, mit Kosten von ca. 350 RMB/kg (Wolfram-Marktdaten). H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> hat eine niedrigere Zersetzungstemperatur (600 °C), aber einen geringeren Vergasungswirkungsgrad (50-60 %, TGA) und eignet sich daher für kleine Experimente. W(CO)<sub>6</sub>, eine flüchtige Flüssigkeit (Siedepunkt 175 °C) mit einer Reinheit von über 99,5 %, zersetzt sich zu hochreinen Wolframatomen (Verunreinigungen <0,01 %), ist aber teuer (ca. 2000 RMB/kg) und wird häufig in der Forschung verwendet.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Zu den Schwefelquellen gehören vor allem Schwefelwasserstoff (H<sub>2</sub>S), elementarer Schwefel (S) oder Dimethyldisulfid (DMDS, (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>S<sub>2</sub>). H<sub>2</sub>S mit einer Reinheit von über 99,5 % wird mit einer Durchflussrate von 20-50 sccm gesteuert, was die Anpassung der Reaktionsatmosphäre erleichtert, und kostet ca. 50 RMB/m<sup>3</sup>. Elementarer Schwefel muss für die Vergasung auf 200-300 °C erhitzt werden, mit einem Dampfdruck von 0,01-0,05 MPa, einem Preis von etwa 20 RMB/kg, geeignet für großflächige Ablagerung. DMDS, eine Flüssigkeit mit hoher Flüchtigkeit (Siedepunkt 109 °C), zersetzt sich in S<sub>2</sub> mit einer Reinheit von über 99 %, aber ihr stechender Geruch erfordert eine Belüftung, die etwa 100 RMB/kg kostet.

Die Wahl der Ausgangsstoffe wirkt sich auf die Produktqualität aus. Die Kombination aus W(CO)<sub>6</sub> und H<sub>2</sub>S ergibt beispielsweise WS<sub>2</sub> mit einer Reinheit von 99,99 % (ICP-MS) und Fe-Verunreinigungen unter 10 ppm, ideal für elektronische Anwendungen. In [der Wolframforschung](#) ist die Kombination aus WO<sub>3</sub> und S aufgrund der geringeren Kosten und der einfacheren Geräteanforderungen häufiger anzutreffen.

#### 4.2.1.2 Bedingungen für die Hinterlegung

Die CVD-Reaktion findet in einem Röhrenofen oder Heißwandreaktor mit den folgenden chemischen Gleichungen statt:  $WO_3 + 3H_2S \rightarrow WS_2 \downarrow + 3H_2O \uparrow + S \uparrow$ ,  $WO_3 + 3H_2S \rightarrow WS_2 \downarrow + 3H_2O \uparrow + S \uparrow$ ,  $W(CO)_6 + 2H_2S \rightarrow WS_2 \downarrow + 6CO \uparrow + 2H_2 \uparrow$ ,  $W(CO)_6 + 2H_2S \rightarrow WS_2 \downarrow + 6CO \uparrow + 2H_2 \uparrow$

Die Abscheidungstemperaturen reichen von 700-1100 °C, mit Substrattemperaturen von 600-900 °C, Drücken von 10<sup>-2</sup>-10 Pa und Trägergas-Durchflussraten von 50-200 sccm. Substrate, typischerweise Si/SiO<sub>2</sub>, Saphir oder Graphit, haben eine Oberflächenrauheit von unter 1 nm (AFM), um die Gleichmäßigkeit der Schicht zu gewährleisten. Die Reaktionsdauer beträgt 30-120 Minuten, abhängig von der gewünschten Schichtdicke.

Die In-situ-Spektroskopie (FTIR) zeigt starke flüchtige Peaks für H<sub>2</sub>O und CO (3400 cm<sup>-1</sup> und 2100 cm<sup>-1</sup>) bei 800 °C, was auf eine vollständige Reaktion hinweist. Die XRD-Analyse bestätigt das Produkt als 2H-Phasen-WS<sub>2</sub> mit einem Zwischenschichtabstand von 6,15 Å und einer Kristallinität von über 95%. REM- und TEM-Beobachtungen zeigen Schichtdicken von 0,62 nm (Einzelschicht) bis 50 nm (Mehrschicht) mit lateralen Größen von 10-100 µm. Höhere Abscheidungstemperaturen (z. B. 1000 °C) erhöhen den Einzelschichtanteil auf 70 % (Raman A<sub>1g</sub>/E<sub>2g</sub>-Intensitätsverhältnis), aber Temperaturen über 1100 °C erzeugen WO<sub>3</sub> (XPS W<sup>6+</sup> Peak).

Die Optimierung der Abscheidungsbedingungen erfordert einen Ausgleich von Temperatur und Gasfluss. So steigert beispielsweise die Erhöhung des H<sub>2</sub>S-Flusses von 30 sccm auf 50 sccm die WS<sub>2</sub>-Wachstumsrate um 20 % (0,5 nm/min vs. 0,4 nm/min, Ellipsometrie), aber überschüssiger Schwefel (>60 sccm) führt zu WS<sub>3</sub>-Rückständen (<0,5 %). In [den CVD-Anlagen von CTIA GROUP LTD in China](#) haben sich 900 °C und 10 Pa als optimal erwiesen, wodurch eine Ausbeute von 90 % erreicht wird.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

#### 4.2.1.3 Kontrolle der Schichtdicke

Die Schichtdicke wird durch die Reaktionszeit, die Vorläuferkonzentration und die Substrattemperatur reguliert. Durch die Verlängerung der Zeit von 30 auf 120 Minuten erhöht sich die Dicke von 0,62 nm (Einzelschicht) auf 20 nm (30-40 Schichten, AFM). Eine Erhöhung der Vorläuferkonzentration ( $\text{WO}_3$ -Dampfdruck 0,01-0,05 Pa) um 50 % erhöht die Wachstumsrate auf 0,6 nm/min, begünstigt aber die Mehrschichtbildung (TEM). Eine Erhöhung der Substrattemperatur von 700 °C auf 900 °C erhöht den Einschichtanteil von 50 % auf 80 % (Raman), da höhere Temperaturen das zweidimensionale Wachstum fördern.

Die Gleichmäßigkeit der Dicke hängt von der Verteilung des Gasflusses und der Substratposition ab. CVD mit zwei Temperaturzonen (heiße Zone 1000 °C, kalte Zone 800 °C) steuert die Dickenvariation innerhalb von  $\pm 5$  % (10 cm<sup>2</sup> Substrat, AFM). In [der Wolframtechnologie](#) ergibt die präzise Steuerung von Zeit (60 Minuten) und Temperatur (850 °C) 5-10 nm  $\text{WS}_2$ -Filme, die die Anforderungen optoelektronischer Bauelemente erfüllen.

#### 4.2.1.4 Vorteile

Die Vorteile von CVD liegen in der hohen Reinheit und präzisen Steuerung. Die Reinheit des Produkts liegt bei über 99,9 % (ICP-MS), mit Verunreinigungen (z. B. Fe, Si) unter 0,01 % und einer Kristallinität von über 95 % (XRD), wodurch es für elektronische und optische Anwendungen geeignet ist. Die Schichtdicke ist einstellbar (0,62-50 nm), mit großen seitlichen Größen (10-100  $\mu\text{m}$ ), die eine großflächige Produktion (>10 cm<sup>2</sup>) unterstützen. Eine Kristallphasenregelung ist möglich, die eine 2H-Phase bei 900 °C erzeugt und eine 1T-Phase bei 1100 °C (XRD) induziert. In [Wolframprodukten](#) erfüllt die direkte Bandlücke von CVD  $\text{WS}_2$  (2,1 eV, PL) die Anforderungen an Photodetektoren.

#### 4.2.1.5 Nachteile

Zu den Nachteilen gehören hohe Kosten und die Komplexität der Ausrüstung. CVD-Geräte (Vakuumpumpen, Temperaturregelungssysteme) kosten ca. 2-5 Mio. RMB/Einheit und haben einen hohen Energieverbrauch (2000 kWh/Tonne vs. 500 kWh/Tonne für die Kalzinierung), was zu Produktionskosten von 1000-2000 RMB/kg führt. Die Ausbeute ist gering (Einzelcharge <1 g/cm<sup>2</sup>) und für die Großproduktion ungeeignet. Hohe Temperaturen und niedrige Drücke ( $10^{-2}$  Pa) erfordern robuste Geräte (z. B. korrosionsbeständiger Quarz), was die Wartungskosten um 20 % (ca. 500.000 RMB/Jahr) erhöht. Auf dem [Wolframmarkt](#) ist seine Verwendung weitgehend auf Bereiche mit hoher Wertschöpfung beschränkt.

#### 4.2.1.6 Anwendungsszenarien

CVD eignet sich für optoelektronische Bauelemente und Nanokatalysatoren. In [der Wolframtechnologie](#) werden beispielsweise einlagige  $\text{WS}_2$ -Schichten (0,62 nm dick) in Photodetektoren eingesetzt, die bei einem Jahresbedarf von etwa 100 kg eine Photoempfindlichkeit

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

von  $10^3$  A/W (532 nm, ASTM) und eine Detektivität von  $10^{11}$  Jones erreichen. In der flexiblen Elektronik dienen 5-nm-CVD-WS<sub>2</sub>-Folien als transparente leitfähige Schichten mit >90 % Durchlässigkeit (550 nm), die in Displays aufgebracht werden. In der Photokatalyse erreicht das Nanoblatt WS<sub>2</sub> (10 nm) aufgrund seiner hohen Reinheit und Kantenaktivität (STM, 20-30%) eine Wasserstoffproduktionsrate von 150  $\mu\text{mol/g}\cdot\text{h}$  (sichtbares Licht).

#### 4.2.2 Hydrothermales/Solvothermes Verfahren

Die hydrothermale/solvothermische Methode synthetisiert WS<sub>2</sub> über Lösungsreaktionen in einem geschlossenen System, das sich für die Herstellung von Nanopartikeln und speziellen Morphologien eignet.

##### 4.2.2.1 Rohstoffe

Zu den Rohstoffen gehören Wolfram- und Schwefelquellen. Wolframquellen enthalten häufig [Natriumwolframat](#) (Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>), [Ammoniummetawolframat](#) ((NH<sub>4</sub>)<sub>6</sub>H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub>) oder [Wolframtrioxid](#) (WO<sub>3</sub>). Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> hat eine hohe Löslichkeit (>100 g/100 mL, 25 °C), eine Reinheit von über 99 % und kostet etwa 200 RMB/kg, wodurch sich leicht einheitliche Lösungen bilden. (NH<sub>4</sub>)<sub>6</sub>H<sub>2</sub>W<sub>12</sub>O<sub>40</sub> liefert Polywolframat-Ionen mit einer Reinheit von über 99,5 % und einem Preis von etwa 300 RMB/kg, ideal für die Kontrolle im Nanomaßstab. WO<sub>3</sub> erfordert eine Säureauflösung (z. B. HCl, pH 2-3) mit einer Reinheit von über 99 % und höheren Kosten von 350 RMB/kg.

Zu den Schwefelquellen gehören Thioharnstoff (CS(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>), Natriumsulfid (Na<sub>2</sub>S) oder Schwefelkohlenstoff (CS<sub>2</sub>). Thioharnstoff mit einer Reinheit von über 99 % kostet 50 RMB/kg und zersetzt sich bei 180 °C in H<sub>2</sub>S und NH<sub>3</sub>, wodurch eine gleichmäßige Schwefelversorgung gewährleistet wird (Ausbeute >90 %, TGA). Na<sub>2</sub>S hat eine gute Löslichkeit (>50 g/100 ml), eine Reinheit von über 98 % und kostet 30 RMB/kg, führt aber Na<sup>+</sup>-Verunreinigungen (<0,1 %, ICP-MS) ein. CS<sub>2</sub>, eine flüchtige Flüssigkeit (Siedepunkt 46 °C), erfordert organische Lösungsmittel (z. B. Ethanol) und kostet etwa 80 RMB/kg.

In [der Wolframforschung](#) ist die Kombination aus Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> und Thioharnstoff aufgrund ihrer geringen Kosten und milden Reaktionsbedingungen am gebräuchlichsten.

##### 4.2.2.2 Reaktionsbedingungen

Die Reaktion findet in einem Hochdruckreaktor (PTFE-ausgekleidet) mit der Gleichung  $\text{Na}_2\text{WO}_4 + 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{WS}_2\downarrow + 2\text{NaOH} + 2\text{CO}_2\uparrow + 4\text{NH}_3\uparrow$   $\text{Na}_2\text{WO}_4 + 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2 + 2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{WS}_2\downarrow + 2\text{NaOH} + 2\text{CO}_2\uparrow + 4\text{NH}_3\uparrow$  Die Temperaturen reichen von 180-250 °C, Drücke von 1-5 MPa und Dauerzeiten von 12-48 Stunden. Die Lösungskonzentrationen (Wolframquelle 0,1-0,5 mol/L, Schwefelquelle 50 % Überschuss) und der pH-Wert (4-7, eingestellt mit HCl oder NaOH) sind entscheidend, wobei das Rühren bei 200-500 U/min für Gleichmäßigkeit sorgt.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

TGA zeigt eine WS<sub>2</sub>-Bildungsrate von 85 % bei 200 °C und über 95 % bei 250 °C. XRD bestätigt das Produkt als 2H-Phasen-WS<sub>2</sub> mit einem Zwischenlagenabstand von 6,15 Å. REM und TEM zeigen Nanopartikel (10-50 nm) oder Nanoblätter (5-20 nm Dicke). Höhere Temperaturen (z. B. 240 °C) reduzieren die Partikelgröße (D<sub>50</sub> von 50 nm auf 20 nm, DLS) aufgrund der druckverstärkten Keimbildung.

Die Optimierung der Reaktionsbedingungen ist von entscheidender Bedeutung. Die Verlängerung der Zeit von 24 auf 48 Stunden erhöht die Ausbeute auf 98 %, obwohl die Partikelagglomeration zunimmt (SEM). Durch Einstellen des pH-Werts von 5 auf 7 wird der Nanoblattanteil auf 60 % (TEM) erhöht. In [den hydrothermalen Anlagen von CTIA GROUP LTD in China](#) sind 220 °C und 24 Stunden optimale Parameter.

#### 4.2.2.3 Kontrolle der Morphologie

Die Morphologie wird über Additive, Temperatur und Lösungsmittel abgestimmt. Durch Zugabe von Tensiden (z. B. CTAB, 0,01 mol/L) entstehen Nanodrähte (20-50 nm Durchmesser, 1-5 µm lang, TEM). Eine Erhöhung der Temperatur von 200 °C auf 240 °C verschiebt die Morphologie von Partikeln zu Nanoblättern (10 nm dick, 50-200 nm lateral, TEM). Die Umstellung von Lösungsmitteln von Wasser auf Ethanol reduziert die Partikelgröße um 30 % (20 nm vs. 30 nm, DLS) aufgrund der geringeren Oberflächenspannung. Durch die Zugabe von Polyvinylpyrrolidon (PVP, 0,5 Gew.-%) entstehen Quantenpunkte (2-10 nm, TEM), die die Bandlücke auf 2,5 eV (UV-Vis) erhöhen. In [der Wolframtechnologie](#) liefert die Kombination aus CTAB und 240 °C gleichmäßige Nanoblätter mit einem Variationskoeffizienten von unter 5 %.

#### 4.2.2.4 Vorteile

Zu den Vorteilen der hydrothermalen/solvothermischen Methode gehören vielfältige Morphologien und niedrige Kosten. Die Produktpalette reicht von Nanopartikeln über Nanoblätter bis hin zu Quantenpunkten (10-50 nm, TEM) mit einer Reinheit von 98-99,5 % (ICP-OES) und erfüllt die Anforderungen der Katalyse. Die Ausrüstung ist einfach (Autoklaveninvestition <200.000 RMB/Einheit), mit niedrigem Energieverbrauch (500 kWh/Tonne) und Kosten von 300-500 RMB/kg. Die milde Reaktion (<250 °C) erleichtert die Industrialisierung, mit einer Ausbeute von über 90 % in einer einzigen Charge.

WS<sub>2</sub> aus dieser Methode zeichnet sich hervorragend in der Katalyse aus und erreicht ein HER-Überpotential von 150 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>) aufgrund der nanoskaligen Morphologie, die die aktiven Zentren erhöht (STM, 20-30%). Bei [Wolframprodukten](#) unterstützen die niedrigen Kosten die Massenproduktion.

#### 4.2.2.5 Nachteile

Zu den Nachteilen gehören eine begrenzte Reinheit und eine Variabilität der Ausbeute. Verunreinigungen (z. B. Na<sup>+</sup>, C) sind schwer zu beseitigen, so dass die Reinheit bei 99,5 % (ICP-

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

MS) liegt, was für die Elektronik ungeeignet ist. Lange Reaktionszeiten (12-48 Stunden) und geringe Single-Batch-Ausbeuten (<500 g) schränken die Skalierbarkeit ein. Die Morphologiekontrolle erfordert Additive, die die Kosten um 10-20 % (ca. 50 RMB/kg) erhöhen, und die Behandlung von Abfallflüssigkeiten (enthält  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}_2$ ) ist komplex. Auf dem Wolframmarkt beschränkt sich seine Verwendung meist auf mittelgroße Produkte.

#### 4.2.2.6 Anwendungsszenarien

Das hydrothermale/solvothermische Verfahren eignet sich für Nanokatalysatoren und Komposite. In der Wolframtechnologie werden beispielsweise 20 nm  $\text{WS}_2$ -Nanoblätter in der Photokatalyse eingesetzt, wodurch eine Wasserstoffproduktionsrate von 150  $\mu\text{mol/g}\cdot\text{h}$  (sichtbares Licht) bei einem jährlichen Bedarf von etwa 200 Tonnen erreicht wird. Bei der Schmierung ergeben 50 nm  $\text{WS}_2$ -Nanopartikel, die dem Fett zugesetzt werden, einen Reibungskoeffizienten von 0,04 (ASTM D1894) und eine Verschleißrate von 0,005  $\text{mm}^3/\text{N}\cdot\text{m}$ . In Verbundwerkstoffen erhöht das Mischen mit Wolframkautschuk (10 Gew.-%) die Zugfestigkeit auf 55 MPa und verbessert die Verschleißfestigkeit um 30 %.

#### 4.2.3 Mechanisches Exfoliationsverfahren

Das mechanische Exfoliationsverfahren trennt Nanoblätter von Bulk- $\text{WS}_2$  durch physikalische Kraft und eignet sich für die Herstellung von hochreinem einschichtigem  $\text{WS}_2$ .

##### 4.2.3.1 Peeling-Rohstoffe

Der Rohstoff ist  $\text{WS}_2$  als Schüttgut, einschließlich natürlichem Wolframit und synthetischen Kristallen (siehe 3.1.4). Natürlicher Wolframit mit einer Reinheit von 98-99 % (ICP-OES) enthält Fe- und Si-Verunreinigungen (<1 %) und stammt aus Ganzhou, China, mit einer jährlichen Ausbeute von weniger als 1000 Tonnen (Wolframmarkt). Synthetische Kristalle mit einer Reinheit von über 99,9 % (ICP-MS) werden mittels CVT unter Verwendung von Wolframpulver und S bei 1000 °C hergestellt, mit einer Größe von 1-5 cm und einem Preis von etwa 500 RMB/kg.

Die Kristallinität des Rohmaterials beeinflusst die Effizienz des Peelings. Synthetische Kristalle mit einer Kristallinität von über 95 % (XRD) und einem Zwischenschichtabstand von 6,15 Å führen zu 20 % höheren Exfoliationsraten (TEM). Die Kristallinität (80-90 %) und die Verunreinigungen von Wolframit verringern die Ausbeute (<5 %). In der Wolframforschung werden häufiger synthetische Kristalle verwendet.

##### 4.2.3.2 Ablauf

Der Peeling-Prozess wird in Trocken- und Nassverfahren unterteilt. Bei der Trockenmethode werden einzelne Schichten mit Klebeband von  $\text{WS}_2$  getrennt, 5-10 Mal wiederholt, und auf ein Si/SiO<sub>2</sub>-Substrat (300 nm Dicke) übertragen. Die Nassmethode beinhaltet Ultraschall (200 W, 5-10 Stunden) in NMP oder Isopropanol, gefolgt von einer Zentrifugation (3000-5000 U/min), um

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Nanoblätter zu isolieren.

TEM zeigt ein trockenes Exfoliation, das ein einschichtiges WS<sub>2</sub> (0,62 nm dick) mit lateralen Größen von 1-10 µm ergibt. Durch das Nasspeeling werden mehrschichtige Nanoblätter (2-10 Schichten, 1-5 nm dick) mit einer Größe von 0,5-5 µm hergestellt. Die Raman-Analyse zeigt ein Intensitätsverhältnis der trockenen Methode A<sub>1g</sub>/E<sub>2g</sub> über 2 (Einzelschichtsignatur) und ein Verhältnis der nassen Methode unter 1 (Mehrschicht). Durch die Erhöhung der Ultraschalldauer von 5 auf 10 Stunden erhöht sich der Einschichtanteil auf 30 % (TEM). In [den Labors von CTIA GROUP LTD in China](#) ist die Nassmethode aufgrund höherer Ausbeuten häufiger anzutreffen.

#### 4.2.3.3 Ausbeute und Reinheit

Die Trockenmethode hat eine geringe Ausbeute (<1 %, Massenmethode) und erbt die Reinheit des Rohmaterials (>99,9 % für synthetische Kristalle) ohne zusätzliche Verunreinigungen (ICP-MS). Das Nassverfahren erreicht eine Ausbeute von 10-30 % (nach der Zentrifugation) bei einer Reinheit von 99-99,5 %, einschließlich Spuren von Lösungsmittelrückständen (C <0,1 %, XPS). Die Sekundärzentrifugation erhöht die Reinheit auf 99,8 %, die Ausbeute sinkt jedoch auf 5 %.

In der [Wolframtechnologie](#) sorgt die Optimierung der Nassmethode (8 Stunden Ultraschall, 5000 U/min) für ein ausgewogenes Verhältnis zwischen Ausbeute (20 %) und Reinheit (99,5 %) und erfüllt damit die Forschungsanforderungen.

#### 4.2.3.4 Vorteile

Zu den Vorteilen gehören hohe Reinheit und Qualität. Das Trockenverfahren erzeugt einschichtiges WS<sub>2</sub> (Reinheit >99,9 %) mit einer Bandlücke von 2,1 eV (PL) und minimalen Kristalldefekten (TEM, <10<sup>-2</sup> nm<sup>-2</sup>). Das Nassverfahren bietet höhere Erträge (10-30%) bei geringeren Kosten (ca. 500-1000 RMB/kg) mit einfacher Ausrüstung (Ultraschallgerät <100.000 RMB). Das Verfahren ist umweltfreundlich und erzeugt keine chemischen Nebenprodukte, wobei der Abfall auf Lösungsmittel beschränkt ist. In [Wolframprodukten](#) erfüllt Single-Layer-WS<sub>2</sub> High-End-Anwendungsanforderungen.

#### 4.2.3.5 Nachteile

Zu den Nachteilen gehören geringe Erträge und Skalierbarkeitsprobleme. Die Trockenmethode ergibt <1 mg/cm<sup>2</sup> pro Charge mit einer manuellen Betriebseffizienz von unter 0,1 g/Stunde. Die Ausbeute der Nassmethode ist lösemittelbegrenzt (NMP kostet 100 RMB/L), mit einem hohen Mehrschichtanteil (70-80 %, TEM), was für die Massenproduktion ungeeignet ist. Es ist stark auf Rohstoffe angewiesen, wobei synthetische Kristalle mehr kosten (500 RMB/kg gegenüber 300 RMB/kg für die Kalzinierung). Auf dem [Wolframmarkt](#) ist seine Verwendung auf Labore beschränkt.

#### 4.2.3.6 Anwendungsszenarien

##### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Das mechanische Exfoliationsverfahren eignet sich sowohl für optoelektronische Bauelemente als auch für die Grundlagenforschung. In der [Wolframforschung](#) wird beispielsweise die Einschicht-WS<sub>2</sub> mit Trockenmethode in Photodetektoren eingesetzt, die eine Photoempfindlichkeit von 10<sup>3</sup> A/W (532 nm) bei einem jährlichen Bedarf von unter 10 kg erreicht. In Katalysestudien werden Nanoblätter mit der Nassmethode (5 nm) mit einem HER-Überpotential von 200 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>) eingesetzt. In der flexiblen Elektronik dienen einlagige WS<sub>2</sub>-Folien als transparente Elektroden mit >90 % Durchlässigkeit (550 nm) und erfüllen hohe Präzisionsanforderungen.

### 4.3 Optimierung der Wolframdisulfid-Produktionstechnologie

Mit den wachsenden Anwendungsfeldern von [Wolframdisulfid](#) (WS<sub>2</sub>) ist die Optimierung der Produktionstechnologie zum Schlüssel geworden, um die Produktqualität zu verbessern, Kosten zu senken und Umwelanforderungen zu erfüllen. Die Optimierungsstrategien konzentrieren sich auf die Verbesserung der Reinheit, die Kontrolle der Partikelgröße und Umweltmaßnahmen, um nicht nur die Leistung von WS<sub>2</sub> ([Wolframdisulfid](#)) (z. B. Schmierfähigkeit, katalytische Aktivität) zu verbessern, sondern auch seine Verwendung in der Elektronik, Nanotechnologie und umweltfreundlichen Fertigung voranzutreiben. In diesem Abschnitt werden die technischen Details, Implementierungseffekte und Praktiken der großen Hersteller untersucht und Fortschritte in der WS<sub>2</sub>-Produktionstechnologie aufgezeigt.

#### 4.3.1 Techniken zur Reinheitsverbesserung

Reinheit ist ein kritischer Indikator für die Leistung von WS<sub>2</sub>, und Optimierungstechniken zielen darauf ab, Verunreinigungen zu entfernen und die Produktqualität zu verbessern.

##### 4.3.1.1 Entfernung von Verunreinigungen

Zu den primären Verunreinigungen in WS<sub>2</sub> gehören Eisen (Fe), Silizium (Si), Sauerstoff (O) und Kohlenstoff (C), die aus Rohstoffen oder dem Reaktionsprozess stammen. Herkömmliche Kalzinierungsmethoden (z. B. 4.1.1) liefern in der Regel Produkte mit einer Reinheit von 98-99 % (ICP-OES), die einen Fe-Gehalt von 0,1-0,5 %, Si unter 0,3 % und einen O-Gehalt von unter 1 % enthalten. Die Techniken zur Entfernung von Verunreinigungen umfassen die chemische Reinigung und die physikalische Trennung.

Bei der chemischen Reinigung wird Säure oder Lauge gewaschen. Wenn beispielsweise WS<sub>2</sub>-Pulver in einer 5%igen HCl-Lösung (pH 1-2) unter Rühren (2 Stunden, 50 °C) eingeweicht wird, werden FeS und Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> gelöst, wodurch der Fe-Gehalt von 0,5 % auf 0,05 % reduziert wird (ICP-MS). Alkaliwäsche (10 % NaOH, 80 °C, 1 Stunde) entfernt SiO<sub>2</sub> und senkt den Si-Gehalt auf unter 0,01 %. Nach dem Waschen wird WS<sub>2</sub> mit Wasser auf einen neutralen pH-Wert (7) gespült und getrocknet (120 °C, N<sub>2</sub>-Atmosphäre), wodurch eine Reinheit von 99,5 % erreicht wird. Die XPS-Analyse zeigt, dass die Peaks von W 4f und S 2p (32,8 eV und 162,3 eV) frei von Verunreinigungen sind.

Die physikalische Trennung umfasst Flotation und magnetische Trennung. Bei der Flotation wird

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

ein Aufschäumungsmittel (z. B. Kiefernölalkohol, 0,1 Gew.-%) verwendet, um FeS (Dichte 4,8 g/cm<sup>3</sup> gegenüber 7,5 g/cm<sup>3</sup> von WS<sub>2</sub>) mit einem Wirkungsgrad von über 90 % (Massenmethode) abzuscheiden. Die magnetische Trennung entfernt magnetische Verunreinigungen (z. B. Fe) bei einer Feldstärke von 0,5-1 T, wodurch der Fe-Gehalt auf unter 0,02 % reduziert wird. In der [Wolframtechnologie](#) erhöht die Kombination von Säurewäsche und magnetischer Trennung die Reinheit auf 99,9 %, was die Kosten um etwa 50 RMB/kg erhöht.

Bei der Entfernung von Verunreinigungen müssen Kosten und Effektivität in Einklang gebracht werden. Die HCl-Reinigung ist hocheffizient (90 % Fe-Entfernung), erfordert jedoch eine Neutralisation von Abfallflüssigkeiten (Ca(OH)<sub>2</sub>), was die Kosten um 10 RMB/kg erhöht. Die Flotation ist kostengünstig (20 RMB/kg), aber weniger effektiv für Si.

#### 4.3.1.2 Nachbearbeitungstechniken

Die Nachbearbeitung verbessert die Reinheit durch Hochtemperaturglühen oder Destillation. Das Glühen erfolgt in einem Vakuum oder einer inerten Atmosphäre (N<sub>2</sub>, 50 l/min Durchfluss) bei 900-1000 °C für 2-4 Stunden, wobei Schwefelreste (S) und Oxide (z. B. WO<sub>3</sub>) entfernt werden. TGA zeigt eine Schwefelverflüchtigungsrate von über 95 % bei 950 °C, wodurch die Produktreinheit von 99 % auf 99,9 % erhöht wird (ICP-OES). Die XRD bestätigt eine 20%ige Erhöhung der Spitzenintensität (002) nach dem Glühen, wobei die Kristallinität 95% erreicht.

Die Destillation erfolgt in einem Vakuumofen (10<sup>-3</sup> Pa, 1000°C), in dem WS<sub>2</sub> sublimiert und kondensiert (400°C), wobei Verunreinigungen (z. B. FeS, SiO<sub>2</sub>) im Rückstand zurückbleiben. Die ICP-MS detektiert Fe unter 10 ppm und Si unter 5 ppm nach der Destillation, wobei die Reinheit über 99,99 % liegt, obwohl die Ausbeute auf 85 % sinkt (Massenmethode). In der [Wolframforschung](#) wird die Destillation häufig für die elektronische WS<sub>2</sub>-Aufbereitung eingesetzt.

Die Nachbearbeitung erhöht den Energieverbrauch (ca. 300 kWh/Tonne gegenüber 500 kWh/Tonne insgesamt für die Kalzinierung) und erhöht die Kosten auf 100-150 RMB/kg. Bei [CTIA GROUP LTD](#) ist das Glühen (950 °C, 3 Stunden) das Mainstream-Verfahren, bei dem jährlich etwa 1000 Tonnen WS<sub>2</sub> behandelt werden, wobei die Reinheit bei 99,9 % stabilisiert wird.

#### 4.3.2 Kontrolle der Partikelgröße

Die Partikelgröße beeinflusst die Anwendungsleistung von WS<sub>2</sub>, wobei Optimierungstechniken wie Mahlen und Sieben sowie Nanonisierung erforderlich sind.

##### 4.3.2.1 Mahlen und Sieben

Durch das Mahlen werden mikrometergroße WS<sub>2</sub> (5-20 µm, REM) zu ultrafeinen Partikeln (0,1-1 µm) veredelt. Eine Planetenkugelmühle (ZrO<sub>2</sub>-Kugeln, Kugel-Material-Verhältnis 10:1, 300 U/min, 10-20 Stunden) reduziert den D<sub>50</sub>-Gehalt von 15 µm auf 0,5 µm (Laser-Partikelgrößenanalyse) mit einem Variationskoeffizienten von unter 10 %. Die Nassvermahlung (Ethanolmedium, 20 Gew.-%

Feststoffgehalt) verhindert die Agglomeration und verbessert den Wirkungsgrad um 15 % ( $D_{50}$  0,4  $\mu\text{m}$ ). Bei der Siebung werden Vibrationssiebe (200-500 mesh) verwendet, um die Partikel in die Bereiche 0,1-0,5  $\mu\text{m}$ , 0,5-1  $\mu\text{m}$  und 1-5  $\mu\text{m}$  zu klassifizieren, mit einer Rückgewinnungsrate von über 95 %.

Die Schleifparameter müssen optimiert werden. Die Verlängerung der Zeit von 10 auf 20 Stunden reduziert die Partikelgröße um 20 % (0,4  $\mu\text{m}$  gegenüber 0,5  $\mu\text{m}$ ), erhöht aber den Energieverbrauch um 50 % (200 kWh/Tonne). Eine höhere Siebgenauigkeit erhöht die Verlustrate auf 10 %. In [Wolframprodukten](#) wird 0,5  $\mu\text{m}$   $\text{WS}_2$  in Schmierstoffen verwendet, wodurch der Reibungskoeffizient auf 0,04 reduziert wird, bei einem jährlichen Bedarf von 3000 Tonnen.

#### 4.3.2.2 Nanonisierungstechniken

Die Nanonisierung erzeugt  $\text{WS}_2$  unterhalb von 100 nm, einschließlich Flüssigphasen-Exfoliation und Gasphasenabscheidung (siehe 4.2). Die Flüssigphasen-Exfoliation in NMP mit Ultraschall (300 W, 10 Stunden) und Zentrifugation (10.000 U/min) isoliert 10-50 nm Nanoblätter mit einer Ausbeute von 20-30 % (DLS). Durch die Gasphasenabscheidung (CVD, 900 °C, 10 Pa) werden 5-20 nm-Schichten mit Ausbeuten von unter 1 g/cm<sup>2</sup> erzeugt. Additive (z. B. CTAB, 0,01 mol/L) bilden in hydrothermalen Verfahren 20-nm-Partikel (TEM).

Die Nanonisierung steigert die Leistung. So erhöht sich beispielsweise die spezifische Oberfläche von 20 nm  $\text{WS}_2$  auf 200 m<sup>2</sup>/g (BET), wodurch das HER-Überpotenzial auf 150 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>) reduziert wird, was 50 % niedriger ist als bei  $\text{WS}_2$  im Mikrometerbereich (300 mV). Die Kosten sind höher (500-1000 RMB/kg vs. 350 RMB/kg für das Mahlen), erfüllen aber die Anforderungen der Katalyse. In [der Wolframtechnologie](#) werden durch das Flüssigphasenpeeling 50 nm  $\text{WS}_2$  mit einer Jahresproduktion von etwa 200 kg erzeugt.

#### 4.3.3 Umweltmaßnahmen

Die Umweltoptimierung reduziert die Sulfidemissionen und die Verschmutzung durch flüssige Abfälle und fördert so eine umweltfreundliche Produktion.

##### 4.3.3.1 Begrenzung der Sulfidemissionen

Die Kalzinations- (4.1.1) und Sublimationsmethoden (4.1.2) erzeugen  $\text{H}_2\text{S}$ - und S-Dampf, der eine effiziente Behandlung erfordert. Schwanzgasabsorptionstürme (10-15 % NaOH-Lösung) wandeln  $\text{H}_2\text{S}$  in  $\text{Na}_2\text{S}$  um, mit Absorptionsraten von über 95 % (Gaschromatographie). Der S-Dampf wird durch Kondensation (0-10 °C) mit einem Wirkungsgrad von über 90 % (Massenverfahren) zurückgewonnen. Verbrennungsanlagen (1000 °C) oxidieren restliches  $\text{H}_2\text{S}$  zu  $\text{SO}_2$ , neutralisiert mit  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  zu  $\text{CaSO}_4$ , wodurch die Emissionen unter 50 ppm gehalten werden (GB 16297-1996).

Die Optimierung umfasst Recycling und Niedertemperaturkatalyse. Das  $\text{H}_2\text{S}$ -Abgas wird in den Reaktor zurückgeführt, wodurch eine Rückgewinnungsrate von 80 % (Durchflussmesser) erreicht wird, wodurch die Kosten um 20 RMB/kg gesenkt werden. Die Niedertemperaturkatalyse ( $\text{CuO}$ -

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Katalysator, 300 °C) wandelt H<sub>2</sub>S in S und H<sub>2</sub>O mit einem Wirkungsgrad von über 98 % um und senkt die SO<sub>2</sub>-Emissionen auf unter 10 ppm. Bei [CTIA GROUP LTD](#) beträgt die jährliche H<sub>2</sub>S-Behandlung etwa 1000 m<sup>3</sup>, mit einer Compliance-Rate von über 99 %.

#### 4.3.3.2 Behandlung von flüssigen Abfällen

Durch Säurewäsche (HCl) und hydrothermale Verfahren entstehen Abfallflüssigkeiten (mit Fe<sup>3+</sup>, NH<sub>3</sub>). Durch die Neutralisation (Ca(OH)<sub>2</sub>, pH 7-8) wird Fe(OH)<sub>3</sub> ausgefällt, das durch Filtration zurückgewonnen wird (Wirkungsgrad >95%). Die NH<sub>3</sub>-Abfallflüssigkeit wird destilliert (80 °C) und auf 10 % konzentriert (Massenmethode), wodurch die Kosten um 15 RMB/kg gesenkt werden. Das Abwasser wird mit Aktivkohleadsorption (CSB <50 mg/L) behandelt, die den Einleitungsnormen (GB 8978-1996) entspricht.

In [der Wolframtechnologie](#) gewinnt das Abfallflüssigkeitssystem jährlich etwa 50 kg Fe und 100 l NH<sub>3</sub> zurück, was einer Kostenersparnis von 10-20 % (ca. 30 RMB/kg) entspricht.

### 4.4 Produktionskosten und -effizienz

Die Produktionskosten und die Effizienz von Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) wirken sich direkt auf die Wettbewerbsfähigkeit des Unternehmens und die Anwendungserweiterung aus. Die Kosten ergeben sich in erster Linie aus Rohstoffen, Energieverbrauch und Ausrüstung, während sich die Effizienz auf Ausbeute, Skalierbarkeit und Prozessoptimierung bezieht. In diesem Abschnitt wird die Kostenstruktur der WS<sub>2</sub>-Produktion (Wolframdisulfid) analysiert, der Energie- und Anlagenbedarf untersucht und die Wirtschaftlichkeit der skalierten Produktion bewertet, wobei die Auswirkungen von Optimierungsstrategien auf Kosten und Effizienz anhand von Daten und Fallstudien aufgezeigt werden.

#### 4.4.1 Analyse der Rohstoffkosten

Die Rohstoffkosten sind der Hauptkostenfaktor bei der WS<sub>2</sub>-Produktion, abhängig vom Preis und der Verwendung von Wolfram- und Schwefelquellen.

##### 4.4.1.1 Preise für Wolframquellen

Zu den Wolframquellen gehören Wolframsäure (H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>), Wolframtrioxid (WO<sub>3</sub>), Wolframpulver (W) und Natriumwolframat (Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>). Laut den Daten des Wolframmarktes 2023 kostet H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> 200-300 RMB/kg (98-99 % Reinheit), mit jährlichen Schwankungen von unter 5 %, die auf die Säurelaugung von schwarzem Wolframerz oder weißem Wolframerz zurückzuführen sind, bei stabiler weltweiter Versorgung (ca. 100.000 Tonnen/Jahr). WO<sub>3</sub> kostet 350-400 RMB/kg (>99 % Reinheit), raffiniert aus Erz oder recyceltem Abfall, wobei die Kosten mit der Reinheit um 10-15 % steigen. Wolframpulver (1-10 µm) kostet 300-350 RMB/kg und wird in der Kalzinierung und Sublimation (4.1) verwendet, wobei die Oxidationsrisiken die Lagerkosten erhöhen (ca. 20 RMB/kg). Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> kostet 200-250 RMB/kg (Reinheit >99 %), üblich bei hydrothermalen Verfahren

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

(4.2.2), wobei die hohe Löslichkeit (>100 g/100 ml) die Transportkosten reduziert.

Für die Herstellung von 1 kg WS<sub>2</sub> werden ca. 0,74 kg Wolframquelle benötigt (W-Basis, molares Massenverhältnis W:WS<sub>2</sub> = 183,84:247,98). Für H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> (250 RMB/kg) betragen die Kosten 0,74 × 250 = 1 t H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> die erste Wahl mit jährlichen Einkäufen von rund 40.000 Tonnen, die 60 % der Rohstoffkosten ausmachen.

Die Reinheit der Wolframquelle wirkt sich auf Kosten und Qualität aus. Die Erhöhung der Reinheit von 98 % auf 99,9 % (ICP-OES) erhöht den Preis um 20 % (50-70 RMB/kg), reduziert jedoch Verunreinigungen (z. B. Fe) um 80 % (0,5 % bis 0,1 %) und erhöht so den Produktwert. In der Wolframtechnologie wird für CVD (4.2.1) hochreines WO<sub>3</sub> eingesetzt, das 70 % der Kosten ausmacht.

#### 4.4.1.2 Kosten für die Schwefelquelle

Zu den Schwefelquellen gehören Schwefelwasserstoff (H<sub>2</sub>S), elementarer Schwefel (S), Thioharnstoff (CS(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>) und Natriumsulfid (Na<sub>2</sub>S). H<sub>2</sub>S kostet 50-60 RMB/m<sup>3</sup> (Reinheit >99,5 %), wobei für die Kalzinierung (4.1.1) 0,5-0,6 m<sup>3</sup>/kg WS<sub>2</sub> (20-30 % Überschuss) erforderlich sind, was 25-36 RMB/kg kostet. Elementarer Schwefel kostet 10-20 RMB/kg (>99 % Reinheit) und erfordert eine Vergasung (300 °C), mit 0,26 kg/kg WS<sub>2</sub> (S:W = 2:1), was 3-5 RMB/kg kostet und üblicherweise in der Sublimation verwendet wird (4.1.2). Thioharnstoff kostet 40-50 RMB/kg, bei hydrothermalen Methoden (4.2.2) werden 0,6 kg/kg WS<sub>2</sub> (50 % Überschuss) verwendet, was 24-30 RMB/kg kostet. Na<sub>2</sub>S kostet 30-40 RMB/kg, verbraucht 0,5 kg/kg WS<sub>2</sub> und kostet 15-20 RMB/kg.

Die Wahl der Schwefelquelle wirkt sich auf die Gesamtkosten aus. H<sub>2</sub>S ist kostengünstig (25 RMB/kg WS<sub>2</sub>), erfordert aber eine Abgasaufbereitung (4.3.3.1), die 20-30 RMB/kg hinzufügt. Elementarer Schwefel ist am billigsten (5 RMB/kg WS<sub>2</sub>), aber die Vergasung verbraucht Energie (50 kWh/Tonne). Auf dem Wolframmarkt macht elementarer Schwefel 60 % der Industrieproduktion aus, mit einem jährlichen Verbrauch von etwa 20.000 Tonnen. In der Wolframforschung wird Thioharnstoff für Nano-WS<sub>2</sub> verwendet, was 30 % der Kosten ausmacht.

Insgesamt liegen die Rohstoffkosten (Wolfram + Schwefel) zwischen 190-300 RMB/kg WS<sub>2</sub> (H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> + S) und 300-400 RMB/kg (WO<sub>3</sub> + H<sub>2</sub>S), was 50-70% der Gesamtkosten ausmacht.

#### 4.4.2 Energieverbrauch und Anforderungen an die Ausrüstung

Energie und Ausrüstung sind wesentliche Kostenfaktoren bei der WS<sub>2</sub>-Produktion, die je nach Prozessstyp variieren.

##### 4.4.2.1 Hochtemperatur-Geräte

Bei der Kalzinierung (4.1.1) werden Rohröfen oder Drehrohröfen (600-900 °C, 50-100 kW Leistung) verwendet, die 300.000-500.000 RMB/Einheit kosten und eine Lebensdauer von 5-10 Jahren haben.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

CVD (4.2.1) erfordert Vakuumöfen (900-1100 °C, 100-200 kW), einschließlich Vakuumpumpen ( $10^{-3}$  Pa) und Temperaturregelung, die 2-5 Millionen RMB/Einheit kosten. Hydrothermale Verfahren (4.2.2) verwenden Autoklaven (180-250 °C, 10-20 kW) und kosten weniger als 200.000 RMB/Einheit. Bei der mechanischen Exfoliation (4.2.3) werden Ultraschallgeräte (200 W) verwendet, die 50.000-100.000 RMB/Einheit kosten.

Die Geräte müssen korrosionsbeständig sein. Kalzination und CVD verarbeiten H<sub>2</sub>S- und S-Dämpfe, die Auskleidungen aus Edelstahl (316L) oder Quarz erfordern, mit jährlichen Wartungskosten von 50.000 bis 100.000 RMB. Hydrothermale Autoklaven verwenden PTFE-Auskleidungen (<300 °C) und kosten 20.000-30.000 RMB/Einheit. Bei [CTIA GROUP LTD](#) produzieren Kalzinierungsöfen jährlich 50.000 Tonnen WS<sub>2</sub> mit Wartungskosten von etwa 80.000 RMB.

Der Energieverbrauch variiert erheblich. Die Kalzination verbraucht 500 kWh/Tonne WS<sub>2</sub> (6 Stunden, 100 kW), CVD 2000 kWh/Tonne (2 Stunden, 200 kW) und hydrothermale Methoden 300 kWh/Tonne (24 Stunden, 20 kW). Bei einem Stromtarif von 0,8 RMB/kWh betragen die Energiekosten 400 RMB/Tonne, 1600 RMB/Tonne bzw. 240 RMB/Tonne.

#### 4.4.2.2 Energieoptimierung

Die Energieoptimierung umfasst die Abwärmerückgewinnung und Prozessverbesserungen. Bei der Abwärmerückgewinnung werden die Abgase des KalzinierungsOfens (500-700 °C) zur Vorwärmung der Rohstoffe verwendet, wodurch 20 % Energie eingespart werden (100 kWh/Tonne, 80 RMB/Tonne). CVD verwendet Dual-Temperatur-Zonen-Designs (heiße Zone 1000 °C, kalte Zone 800 °C), wodurch der Wärmeverlust um 15 % reduziert wird (300 kWh/Tonne, 240 RMB/Tonne). Hydrothermale Methoden verkürzen die Reaktionszeit (24 bis 18 Stunden) und senken den Energieverbrauch auf 200 kWh/Tonne (160 RMB/Tonne).

Prozessverbesserungen, wie z. B. die Niedertemperaturkatalyse (4.3.3.1, 300 °C CuO-Katalysator) anstelle der Verbrennung (1000 °C), reduzieren die H<sub>2</sub>S-Behandlungsenergie von 50 kWh/Tonne auf 20 kWh/Tonne. In der [Wolframtechnologie](#) wird durch die Kombination von Abwärmerückgewinnung und Niedertemperaturkatalyse die Kalzinierungsenergie auf 350 kWh/Tonne reduziert, was einer Gesamteinsparung von 120 RMB/Tonne entspricht. Bei [Wolframprodukten](#) erreichen die jährlichen Energieeinsparungen etwa 5000 MWh, was die Kosten um 4 Millionen RMB senkt.

#### 4.4.3 Ökonomie der skalierten Produktion

Die skalierte Produktion steigert die Effizienz durch Chargenvorteile und Kostensenkungsstrategien.

##### 4.4.3.1 Vorteile der Batch-Produktion

Die Kalzination ergibt 1-5 Tonnen pro Charge (10 m<sup>3</sup> Ofenkapazität), bei einer Jahresproduktion von 50.000 Tonnen und Stückkosten von 300-350 RMB/kg (Rohstoffe 200 RMB, Energie 100 RMB,

Anlagenabschreibung 30 RMB). CVD-Erträge von unter 1 kg pro Charge (10 cm<sup>2</sup> Substrat), bei einer Jahresproduktion von 100-200 kg und Stückkosten von 1000-2000 RMB/kg (Rohstoffe 300 RMB, Energie 800 RMB, Ausrüstung 500 RMB). Hydrothermale Verfahren ergeben 0,5-1 kg pro Charge (10 l Kapazität), mit einer Jahresproduktion von 1000 Tonnen und Kosten von 400-500 RMB/kg.

Die Skalierung senkt die Stückkosten. Die Erhöhung der Kalzinierungschargengröße von 1 auf 5 Tonnen senkt die Abschreibung der Anlagen auf 20 RMB/kg (33 % Reduzierung) und den Energieverbrauch auf 400 kWh/t (20 % Reduzierung), wodurch die Gesamtkosten auf 300 RMB/kg gesenkt werden. Bei CTIA GROUP LTD werden die Kosten bei 320 RMB/kg durch eine Waage von 50.000 Tonnen/Jahr begrenzt, wodurch die Gewinnmargen um 15 % (ca. 50 RMB/kg) gesteigert werden. Die Skalierung der hydrothermalen Produktion von 500 auf 1000 Tonnen senkt die Kosten auf 450 RMB/kg und verbessert die Vorteile um 10 %.

Die Serienproduktion erfordert eine stabile Nachfrage. Auf dem [Wolframmarkt](#) liegt die Nachfrage nach industriellem WS<sub>2</sub> bei 80.000 Tonnen/Jahr, was die Skalenvorteile erheblich macht, während die Nachfrage nach Nano-WS<sub>2</sub> (<1000 Tonnen/Jahr) für kleinere Maßstäbe geeignet ist.

#### 4.4.3.2 Strategien zur Kostensenkung

Zu den Strategien zur Kostensenkung gehören die Substitution von Rohstoffen, die gemeinsame Nutzung von Geräten und die Rückgewinnung von Nebenprodukten. Durch die Substitution von teuren WO<sub>3</sub> (375 RMB/kg) durch H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> (250 RMB/kg) werden 90 RMB/Tonne WS<sub>2</sub> (277 RMB bis 185 RMB) eingespart. Die gemeinsame Nutzung von Geräten, wie z. B. die Verwendung von Kalzinierungsöfen sowohl für WS<sub>2</sub> als auch für [Molybdändisulfid](#) (MoS<sub>2</sub>), reduziert die Abschreibung um 20 % (30 RMB/kg bis 24 RMB/kg). Die Rückgewinnung von Nebenprodukten (z. B. H<sub>2</sub>S-Recycling, Schwefelkondensation, 4.3.3) spart 20-30 RMB/kg.

Technologische Verbesserungen senken Energie- und Arbeitskosten. Die automatisierte Steuerung (SPS-Systeme) ersetzt den manuellen Betrieb und reduziert die Arbeitskosten für die Kalzinierung von 50 RMB/Tonne auf 20 RMB/Tonne. Tieftemperaturprozesse (z. B. hydrothermale Optimierung auf 200 °C) sparen 100 kWh/Tonne (80 RMB/Tonne) ein. In der [Wolframtechnologie](#) senken die H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>-Substitution und die H<sub>2</sub>S-Rückgewinnung die Kalzinierungskosten auf 280 RMB/kg, wodurch jährlich 10 Millionen RMB eingespart werden.

Kombinierte Strategien reduzieren die skalierten Produktionskosten auf 250-300 RMB/kg (Kalzinierung) und 400-450 RMB/kg (hydrothermal) und erhöhen so die Wettbewerbsfähigkeit des Marktes. Bei [Wolframprodukten](#) erzielt eine optimierte Produktionslinie mit einer Kapazität von 50.000 Tonnen/Jahr eine Gewinnspanne von 20 % und unterstützt die Märkte für Schmierstoffe und Gegengewichtsmaterialien.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT



CTIA GROUP LTD Wolframdisulfid

## Kapitel 5: Anwendungen von Wolframdisulfid

Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) ist ein vielseitiges geschichtetes Übergangsmetall-Dichalkogenid, das aufgrund seiner einzigartigen physikalischen und chemischen Eigenschaften ein umfangreiches Anwendungspotenzial in den Bereichen Schmierung, Katalyse, Elektronik, Energie und anderen Bereichen aufweist.  $WS_2$  (Wolframdisulfid) zeichnet sich durch eine geringe Scherfestigkeit, eine hohe thermische Stabilität, Halbleitereigenschaften und nanoskalige Strukturen aus, was es zu einem wichtigen Material in der industriellen Produktion, in High-Tech-Anwendungen und in der Spitzenforschung macht. In diesem Kapitel werden die Anwendungen von  $WS_2$  in der Schmierung als Festschmierstoffe, Beschichtungen und Verbundwerkstoffe systematisch untersucht. in der Katalyse für petrochemische und photoelektrokatalytische Zwecke; in der Elektronik für Halbleiterbauelemente; in Energie für Speicher- und Umwandlungsfunktionen; und in innovativen Praktiken in der Luft- und Raumfahrt, Nanotechnologie und anderen Bereichen. Durch die Integration von experimentellen Daten, Fallstudien und technischen Vorteilen werden der Anwendungswert und die Entwicklungsperspektiven von  $WS_2$  umfassend aufgezeigt.

### 5.1 Anwendungen von Wolframdisulfid in der Schmierung

Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) ist aufgrund seines Schichtaufbaus und seiner geringen Scherfestigkeit (20-50 MPa, siehe 2.1.5.3) ein bedeutender Werkstoff im Schmierbereich. Die schwachen Van-der-Waals-Kräfte zwischen den Schichten ermöglichen ein außergewöhnlich gleichmäßiges Gleiten der Zwischenschicht, wodurch ein Reibungskoeffizient von nur 0,03 bis 0,05 (ASTM D1894-Test) erreicht wird, was herkömmliche Schmierstoffe wie Graphit (0,1-0,2) und Molybdändisulfid ( $MoS_2$ , 0,04-0,1) deutlich übertrifft. Darüber hinaus ist  $WS_2$  aufgrund seiner hohen thermischen Stabilität (Oxidationstemperatur 650 °C, siehe 2.1.3.2) und seiner chemischen Inertheit unter extremen

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Bedingungen (z. B. hohe Temperaturen, Vakuum und hoher Druck) außergewöhnlich. In diesem Abschnitt werden die Anwendungen von WS<sub>2</sub> als Festschmierstoffe, Beschichtungen und Verbundschmierstoffe detailliert beschrieben und die Leistung und Vorteile in verschiedenen Szenarien untersucht.

### 5.1.1 Festschmierstoffe

WS<sub>2</sub> wird als Festschmierstoff häufig in Umgebungen eingesetzt, in denen flüssige Schmierstoffe unpraktisch sind, da seine mikron- oder nanoskaligen Partikel die Reibungsflächen direkt füllen, um Verschleiß und Energieverluste zu reduzieren.

#### 5.1.1.1 Umgebungen mit hohen Temperaturen

Die Schmierleistung von WS<sub>2</sub> in Hochtemperaturumgebungen beruht auf seiner thermischen Stabilität (650 °C) und seiner geringen Flüchtigkeit (siehe 2.1.3.2). Im Vergleich zu MoS<sub>2</sub> (Oxidationstemperatur 400 °C) behält WS<sub>2</sub> einen stabilen Reibungskoeffizienten (0,05-0,07, ASTM G99 Test) bei 500-650 °C bei, während MoS<sub>2</sub> zu MoO<sub>3</sub> oxidiert und seinen Reibungskoeffizienten auf 0,2-0,3 erhöht (TGA-Test, Massenverlust 5 % gegenüber WS<sub>2</sub> <1 %).

##### 5.1.1.1.1 Industrielle Hochtemperaturgeräte

In industriellen Hochtemperaturanlagen (z. B. Stahlwerksöfen, Glasformmaschinen) dient WS<sub>2</sub>-Pulver in Mikrometergröße (5-20 µm, siehe 3.1.1.1) als Festschmierstoff, wodurch die Lebensdauer der Komponenten erheblich verlängert wird. Bei Walzen in Stahlwerköfen reduziert die Zugabe von WS<sub>2</sub> beispielsweise den Reibungskoeffizienten von 0,8 auf 0,05 (Pin-on-Disk-Test), senkt die Betriebstemperatur um 20-30 °C und verlängert die Verschleißlebensdauer um 50 % (1000 Stunden, 500 °C). Die REM-Analyse zeigt, dass WS<sub>2</sub> einen gleichmäßigen Transferfilm (0,1-0,5 µm dick) auf Reibungsflächen bildet, wodurch der direkte Metallkontakt minimiert wird.

In [der Wolframtechnologie](#) wird WS<sub>2</sub> auf Hochtemperatur-Fördergurtlager angewendet, wobei Tests eine Verschleißrate von nur 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m bei 600 °C (ASTM G99) zeigen, was 80 % niedriger ist als bei Graphit (0,05 mm<sup>3</sup>/N·m). [CTIA GROUP LTD](#) produziert jährlich 50.000 Tonnen WS<sub>2</sub> in Industriequalität und liefert größtenteils solche Geräte, um den Bedarf an Hochtemperaturschmierung zu decken.

##### 5.1.1.1.2 Komponenten des Motors

Triebwerkskomponenten für die Luftfahrt und die Automobilindustrie (z. B. Turbinenschaufeln, Kolbenringe) müssen einer Hochgeschwindigkeitsreibung bei 400-600 °C standhalten. WS<sub>2</sub>-Pulver (98-99 % Reinheit, ICP-OES), das auf Kontaktflächen aufgetragen wird, behält einen Reibungskoeffizienten von 0,04-0,06 (Vierkugelttest, 500 °C) bei, der im Vergleich zu ungeschmierten Bedingungen (0,7-0,9) um 90 % reduziert wird. Hochtemperatur-Reibungstests (500 °C, 2 GPa) zeigen, dass die Scherfestigkeit der Transferfolie von WS<sub>2</sub> (30 MPa) ein sanftes

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

Gleiten gewährleistet und die Verschleißtiefe auf 5 µm reduziert (vs. 50 µm unbehandelt, REM).

In Flugzeugtriebwerken wird WS<sub>2</sub> in Turbinenschaufellagern eingesetzt, wodurch die Wartungsintervalle um 30 % (ca. 500 Stunden) verlängert werden. [Die Daten zu Wolframprodukten](#) deuten auf einen jährlichen Bedarf von etwa 1000 Tonnen in der Luft- und Raumfahrt hin, wo WS<sub>2</sub> aufgrund seiner Hochtemperaturleistung ein bevorzugter Festschmierstoff ist.

### 5.1.1.2 Vakuum-Umgebungen

Die hervorragende Leistung von WS<sub>2</sub> in Vakuumumgebungen beruht auf seiner geringen Flüchtigkeit (<0,1 % Massenverlust, 10<sup>-5</sup> Pa, 500 °C) und seiner Unempfindlichkeit gegenüber Feuchtigkeit (Kontaktwinkel 90°, siehe 3.1.3.1). Im Vergleich zu MoS<sub>2</sub> (der Reibungskoeffizient steigt im Vakuum aufgrund der Feuchtigkeitsempfindlichkeit auf 0,1) behält WS<sub>2</sub> 0,03-0,05 bei (ASTM G99).

#### 5.1.1.2.1 Gleitende Bauteile von Raumfahrzeugen

Schiebekomponenten von Raumfahrzeugen (z. B. Scharniere von Solarmodulen, Antennenaktuatoren) arbeiten im Vakuum (10<sup>-6</sup> Pa) und in weiten Temperaturbereichen (-100 °C bis 500 °C). WS<sub>2</sub>-Pulver in Mikrometergröße (5-10 µm, siehe 3.1.1.1), das auf die Scharnieroberflächen aufgetragen ist, stabilisiert den Reibungskoeffizienten bei 0,03 (Vakuumtest, 500 °C) bei einer Verschleißrate von unter 0,005 mm<sup>3</sup>/N·m (Vierkugelttest). Im Vergleich zu Graphit (der im Vakuum versagt) verlängert WS<sub>2</sub> die Lebensdauer um 50 % (2000 Zyklen).

Die NASA zertifiziert WS<sub>2</sub> als Schmiermittel für die Luft- und Raumfahrt (siehe 5.5.1.1), das im Roboterarm des Rovers Curiosity verwendet wird, wobei Tests nach 1000 Zyklen in einer simulierten Marsumgebung (10<sup>-5</sup> Pa, -50 °C) keinen signifikanten Verschleiß zeigen. Wolfram-Marktdaten deuten auf einen jährlichen WS<sub>2</sub>-Bedarf von etwa 500 Tonnen für Luft- und Raumfahrtanwendungen hin.

#### 5.1.1.2.2 Vakuumpumpen

Vakuumpumpen (z. B. Turbomolekularpumpen) erfordern eine geringe Reibung bei 10<sup>-8</sup> Pa. WS<sub>2</sub>-Pulver (0,5-1 µm, siehe 3.1.1.2) füllt die Lager, wodurch der Reibungskoeffizient auf 0,04 (ASTM D1894) reduziert wird, was einer Verringerung um 93 % gegenüber ungeschmierten Bedingungen (0,6) entspricht und das Betriebsgeräusch um 10 dB senkt (Schalldrucktest). Die TEM-Analyse zeigt, dass WS<sub>2</sub> einen 0,2 µm dicken Transferfilm an der Reibungsgrenzfläche bildet, der die Ermüdung des Metalls reduziert.

In der Halbleiterfertigung verlängert WS<sub>2</sub> die Wartungszyklen von Vakuumpumpen auf 6 Monate (gegenüber 3 Monaten). [Daten der Wolframtechnologie](#) deuten darauf hin, dass die Haltbarkeit des Vakuums zu einem jährlichen Verbrauch von etwa 200 Tonnen in diesem Bereich führt.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 5.1.1.3 Hochdruckbedingungen

Die Schmierleistung von WS<sub>2</sub> unter hohem Druck beruht auf seiner hohen Dichte (7,5 g/cm<sup>3</sup>, siehe 2.1.2.1) und Verformungsbeständigkeit (Elastizitätsmodul 150-270 GPa, siehe 2.1.5.2). Bei 2-5 GPa behält WS<sub>2</sub> einen Reibungskoeffizienten von 0,05-0,07 bei (Vier-Kugel-Test).

#### 5.1.1.3.1 Schwere Maschinen

Schwere Maschinen (z. B. hydraulische Baggerarme, Straßenwalzen) arbeiten mit 3-4 GPa. WS<sub>2</sub>-Pulver (1-5 µm) füllt Fugen und reduziert den Reibungskoeffizienten auf 0,05 (ASTM G99) und die Verschleißrate auf 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m und übertrifft damit Graphit (0,15, 0,03 mm<sup>3</sup>/N·m). Das REM zeigt, dass WS<sub>2</sub> unter hohem Druck einen dichten Transferfilm (0,5 µm dick) bildet, der die Abplatzung der Oberfläche reduziert.

Im Bauwesen senkt WS<sub>2</sub> in Baggern die jährlichen Wartungskosten um 20 % (ca. 5000 RMB/Einheit). CTIA GROUP LTD liefert Hochdruck-WS<sub>2</sub> mit einem Jahresabsatz von rund 3000 Tonnen.

#### 5.1.1.3.2 Hydraulische Systeme

Hydraulische Systeme (z. B. Spritzgießmaschinen) erfordern eine druckfeste Schmierung bei 2-3 GPa. Ultrafeines WS<sub>2</sub>-Pulver (0,1-0,5 µm, siehe 3.1.1.2) füllt Dichtungen, senkt den Reibungskoeffizienten auf 0,04 (Pin-on-Disk-Test) und verlängert die Lebensdauer der Dichtung um 40 % (1000 Stunden). Die XPS-Analyse bestätigt die chemische Stabilität von WS<sub>2</sub> unter hohem Druck (W 4f Peak unverändert).

Bei Wolframprodukten beträgt der Bedarf an WS<sub>2</sub>-Hydrauliksystemen etwa 1000 Tonnen pro Jahr, wobei die hohe Druckbeständigkeit die Effizienz der Ausrüstung um 15 % steigert (Leistungstest).

### 5.1.2 Beschichtungsanwendungen

WS<sub>2</sub>-Beschichtungen, die über Abscheidungstechniken (z. B. Sprühen, PVD) aufgebracht werden, binden Festschmierstoffe an Substrate und bieten so einen lang anhaltenden Schutz.

#### 5.1.2.1 Mechanische Komponenten

WS<sub>2</sub>-Beschichtungen (0,5-10 µm dick, siehe 3.1.3) bilden reibungsarme Oberflächen auf mechanischen Bauteilen und verlängern so die Lebensdauer.

##### 5.1.2.1.1 Lager

Mit WS<sub>2</sub> beschichtete Lager (1-5 µm dick, Kaltspritzen) reduzieren den Reibungskoeffizienten auf 0,03 (ASTM D1894), was einem Rückgang von 95 % gegenüber unbeschichteten (0,7) entspricht.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Bei 500 °C und 2 GPa beträgt die Verschleißrate 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m (Vier-Kugel-Test), wodurch die Lebensdauer um 50 % (2000 Stunden) verlängert wird. REM weist eine gleichmäßige WS<sub>2</sub>-Beschichtungsabdeckung (Porosität <5%) auf, wodurch der Kugelverschleiß reduziert wird.

In der Luft- und Raumfahrt liegt der Bedarf an WS<sub>2</sub>-Beschichtungen bei etwa 500 Tonnen pro Jahr ([Wolframmarkt](#)), was die Betriebsstabilität um 20 % erhöht (Vibrationstest).

#### 5.1.2.1.2 Zahnräder

Zahnräder, die mit WS<sub>2</sub> (5-10 µm dick, PVD) beschichtet sind, senken den Reibungskoeffizienten auf 0,05 (ASTM G99) und reduzieren so die Verschleißtiefe der Zahnoberfläche auf 3 µm (gegenüber 20 µm, REM). Bei 400 °C steigt der Wirkungsgrad des Getriebes um 10 % (Leistungstest), wobei die Lebensdauer um 30 % (1500 Stunden) verlängert wird.

In Automobilgetrieben haben WS<sub>2</sub>-beschichtete Getriebe einen jährlichen Verbrauch von etwa 1000 Tonnen ([Wolframtechnologie](#)), wodurch der Geräuschpegel um 5 dB reduziert wird.

#### 5.1.2.2 Werkzeuge und Matrizen

WS<sub>2</sub>-Beschichtungen verbessern die Verschleißfestigkeit und die Entformungseigenschaften von Werkzeugen und Werkzeugen.

##### 5.1.2.2.1 Stanzformen

Stanzwerkzeuge, die mit WS<sub>2</sub> beschichtet sind (2-5 µm dickes Trockenfilmsprühen), reduzieren den Reibungskoeffizienten auf 0,04 (ASTM D1894) und erhöhen die Stanzzyklen auf 100.000 (gegenüber 60.000). REM zeigt eine verminderte Oberflächenhaftung (<1 % vs. 5 %).

Im Automobilbau liegt der Bedarf an WS<sub>2</sub>-beschichteten Werkzeugen bei etwa 200 Tonnen pro Jahr ([Wolframprodukte](#)), was die Produktionseffizienz um 15 % steigert.

##### 5.1.2.2.2 Schneidwerkzeuge

Mit WS<sub>2</sub> beschichtete Schneidwerkzeuge (z. B. Bohrer), die mit WS<sub>2</sub> (1-3 µm dick, Plasmaspritzen) beschichtet sind, senken den Reibungskoeffizienten auf 0,05 (ASTM G99), senken die Schnitttemperatur um 20 °C (Infrarotmessung) und verlängern die Standzeit um 40 % (5000 Schnitte). Die TEM-Analyse zeigt, dass die WS<sub>2</sub>-Beschichtung die Chipadhäsion minimiert (<0,1 µm). In der [Wolframtechnologie](#) liegt der Werkzeugverbrauch bei WS<sub>2</sub>-beschichteten Werkzeugen bei etwa 300 Tonnen pro Jahr, was die Bearbeitungsgenauigkeit um 10 % verbessert.

#### 5.1.2.3 Sprühverfahren

Zu den WS<sub>2</sub>-Beschichtungsspritzverfahren gehören das Trockenfilmspritzen und das

##### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

Plasmaspritzen.

#### 5.1.2.3.1 Trockenfilm-Sprühen

Beim Trockenfilmspritzen wird WS<sub>2</sub>-Pulver (0,5-5 µm) mit hoher Geschwindigkeit (Kaltspritzen, 500 m/s) auf die Substrate gesprüht, wodurch eine 0,5-5 µm-Beschichtung entsteht. Die Haftung erreicht 10 MPa (Zugversuch) bei einem Reibungskoeffizienten von 0,03-0,09. Bei 500 °C beträgt die Lebensdauer der Beschichtung 1000 Stunden (Reibungstest).

In [der chinesischen Tungsten Intelligent](#) Manufacturing-Produktion beträgt die Produktion von trockengespritztem WS<sub>2</sub> jährlich etwa 1000 Tonnen, was in Luft- und Raumfahrtkomponenten weit verbreitet ist.

#### 5.1.2.3.2 Plasmaspritzen

Beim Plasmaspritzen wird WS<sub>2</sub> mit Ni (20-50 Gew.-%) vermischt und in einer 10.000 °C heißen Plasmaflamme abgeschieden, wodurch eine 5-50 µm dicke Beschichtung mit einer Härte von 5-10 GPa entsteht (Nanoindentation). Der Reibungskoeffizient beträgt 0,05 (ASTM G99), die Verschleißfestigkeit wurde um das 20-fache (0,005 mm<sup>3</sup>/N·m) verbessert. Bei 3000 U/min erreicht die Lebensdauer der Beschichtung 1000 Stunden.

Bei [Wolframprodukten](#) beträgt der Bedarf an plasmagespritztem WS<sub>2</sub> etwa 500 Tonnen pro Jahr, die in schweren Maschinen verwendet werden.

### 5.1.3 Verbundwerkstoffe

WS<sub>2</sub> in Kombination mit anderen Materialien verbessert die Schmierleistung und die Substratverträglichkeit.

#### 5.1.3.1 Fettgemischte Schmierstoffe

WS<sub>2</sub> in Fett eingemischt bildet Hochleistungs-Mischschmierstoffe.

##### 5.1.3.1.1 Kfz-Fett

Autofett mit WS<sub>2</sub> (5-10 Gew.-%, 0,5-1 µm) reduziert den Reibungskoeffizienten auf 0,04 (ASTM D1894) und erhöht die Tragfähigkeit um 30 % (2 GPa, Vier-Kugel-Test). Bei 150 °C verlängert sich die Lebensdauer um 50 % (500 Stunden). DLS-Tests zeigen eine gleichmäßige WS<sub>2</sub>-Dispersion (Variation der Partikelverteilung <10%).

Bei Automobillagern liegt der Bedarf an WS<sub>2</sub>-Fett bei etwa 2000 Tonnen pro Jahr ([Wolframmarkt](#)), wodurch der Kraftstoffverbrauch um 5 % gesenkt wird.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 5.1.3.1.2 Industriefett

Industriefett (für Getriebe) mit WS<sub>2</sub> (10 Gew.-%) senkt den Reibungskoeffizienten auf 0,05 (ASTM G99) bei einer Verschleißrate von 0,005 mm<sup>3</sup>/N·m (400 °C). Bei [CTIA GROUP LTD](#) beträgt die jährliche Produktion von WS<sub>2</sub>-Industriefett 3000 Tonnen, was die Effizienz der Anlage um 10 % verbessert.

### 5.1.3.2 Selbstschmierende Polymere

WS<sub>2</sub> in Kombination mit Polymeren entstehen selbstschmierende Materialien.

#### 5.1.3.2.1 Technische Kunststoffe

WS<sub>2</sub> (5-20 Gew.-%) in Wolframkunststoff reduziert den Reibungskoeffizienten auf 0,06 (ASTM D1894), wobei die Zugfestigkeit 60 MPa (ASTM D638) erreicht. Bei 200 °C beträgt die Verschleißrate 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m, was die Lebensdauer um 40 % (1000 Stunden) verlängert.

Bei mechanischen Komponenten liegt der Bedarf an WS<sub>2</sub>-Kunststoffen bei etwa 1000 Tonnen pro Jahr (Wolframtechnologie), wodurch die Wartungshäufigkeit um 20 % reduziert wird.

#### 5.1.3.2.2 Dichtungen

WS<sub>2</sub> (10 Gew.-%) in Kombination mit Wolframkautschuk senkt den Reibungskoeffizienten auf 0,05 (ASTM G99) und erhöht die Verschleißfestigkeit um 30 % (0,01 mm<sup>3</sup>/N·m). Bei 2 GPa erreicht die Lebensdauer der Dichtung 1500 Stunden.

Bei Automobildichtungen liegt der jährliche Bedarf bei etwa 500 Tonnen (Wolframprodukte), was die Haltbarkeit um 25 % verbessert.

## 5.2 Anwendungen von Wolframdisulfid in der Katalyse

Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) ist aufgrund seiner hohen spezifischen Oberfläche (bis zu 500 m<sup>2</sup>/g, siehe 3.1.6.1), seiner reichlich vorhandenen kantenaktiven Stellen (20-40 %, STM-Messung) und seiner hervorragenden chemischen Stabilität ein wichtiges Material im Bereich der Katalyse. Die Halbleitereigenschaften von WS<sub>2</sub> (Wolframdisulfid) (Bandlücke 1,3-2,5 eV, siehe 2.3.2.1) und die zweidimensionale Struktur ermöglichen eine hervorragende Leistung in der petrochemischen Katalyse, Photokatalyse, Elektrokatalyse und als ungestützter Katalysator. Im Vergleich zu herkömmlichen Katalysatoren (z. B. MoS<sub>2</sub>) weist WS<sub>2</sub> eine höhere Stabilität bei hohen Temperaturen (>500 °C) und sauren Bedingungen auf, wobei seine Schwefelkanten eine um 10-20 % höhere Aktivität aufweisen (DFT-Berechnungen). In diesem Abschnitt werden die Anwendungen von WS<sub>2</sub> in der petrochemischen Katalyse, Photokatalyse und Elektrokatalyse sowie seine Eigenschaften als nicht gestützter Katalysator untersucht, wobei seine Leistungsvorteile und reale Fälle analysiert werden.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

## 5.2.1 Petrochemische Katalysatoren

WS<sub>2</sub> dient als effizienter Katalysator in petrochemischen Prozessen, vor allem für die Hydrodesulfurierung (HDS), die Hydrodenitrogenisierung (HDN) und Reformierungsreaktionen, wobei seine nanoskalige Struktur und die hohe Dichte des aktiven Zentrums die Reaktionseffizienz erheblich verbessern.

### 5.2.1.1 Hydroentschwefelung

WS<sub>2</sub> erleichtert die Hydrodesulfurierung, indem es C-S-Bindungen aufbricht, um Sulfide zu entfernen, geeignet für die Reinigung von Heizöl. Seine Schwefelarmee (20-30 %, STM) sind die primären aktiven Zentren und bieten einen um 10 % höheren katalytischen Wirkungsgrad als MoS<sub>2</sub> (ASTM D5185-Test). Bei 500 °C und 10 bar H<sub>2</sub>-Druck erreicht WS<sub>2</sub> eine Abscheiderate von 95 % bei der Entfernung von Schwefelverbindungen (gegenüber 85 % bei MoS<sub>2</sub>).

#### 5.2.1.1.1 Entschwefelung von Diesel

Der Schwefelgehalt von Diesel muss auf <10 ppm (EU-Normen) reduziert werden. WS<sub>2</sub>-Nanoblätter (20-50 nm, siehe 3.1.2) erreichen als Katalysatoren eine Entschwefelungsrate von 98% (Gaschromatographie) bei 350-400°C und 15 bar. Die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante (k) beträgt 0,05 min<sup>-1</sup> (vs. 0,04 min<sup>-1</sup> für MoS<sub>2</sub>, kinetischer Test), was auf die um 15 % höhere Kantenstellendichte (STM) von WS<sub>2</sub> zurückzuführen ist. REM zeigt, dass WS<sub>2</sub> in Diesel eine gleichmäßig dispergierte katalytische Schicht (0,1-0,2 µm dick) bildet, die die Kontakteffizienz verbessert.

In [der Wolframtechnologie](#) verarbeiten WS<sub>2</sub>-Katalysatoren jährlich etwa 500.000 Tonnen Diesel mit einer Lebensdauer des Katalysators von 2000 Stunden (Aktivitätsabfall <5 %). Wolfram-Marktdaten deuten auf einen jährlichen WS<sub>2</sub>-Bedarf von etwa 1000 Tonnen für die Dieselentschwefelung hin.

#### 5.2.1.1.2 Reinigung von Benzin

Die Benzinentschwefelung zielt auf Thiophenverbindungen ab. Ultrafeines WS<sub>2</sub>-Pulver (0,1-0,5 µm, siehe 3.1.1.2) erreicht bei 300 °C und 10 bar eine Schwefelabscheiderate von 95 % (ASTM D5185) und ist damit 5 % höher als industrielle Ni-Mo-Katalysatoren (90 %). Die XPS-Analyse zeigt keine signifikante Veränderung des S 2p-Peaks von WS<sub>2</sub> (162,0 eV) nach der Reaktion, was seine Stabilität bestätigt. Die spezifische Oberfläche des Katalysators (20 m<sup>2</sup>/g, BET) sorgt für eine effiziente Adsorption.

In Raffinerien beträgt der Verbrauch von WS<sub>2</sub>-Katalysatoren jährlich etwa 500 Tonnen ([Wolframprodukte](#)), wodurch der Schwefelgehalt von Benzin auf 8 ppm reduziert und die Sauberkeit um 20 % verbessert wird.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 5.2.1.2 Hydrodenitrogenisierung

WS<sub>2</sub> entfernt stickstoffhaltige Verbindungen (z. B. Pyridin) bei der Hydrodestickstoffgebung und verbessert so die Heizölqualität. Seine metallischen Eigenschaften (1T-Phase, siehe 3.2.1.1) erhöhen den Wirkungsgrad des Elektronentransfers und erreichen eine Stickstoffentfernungsrate von 90 % (ASTM D4629, 500 °C).

#### 5.2.1.2.1 Verarbeitung von Heizöl

Die Entstickung des Heizöls erfolgt bei 400 °C und 20 bar. WS<sub>2</sub>-Nanodrähte (20-50 nm, siehe 3.1.5) als Katalysatoren erreichen eine Stickstoffentfernungsrate von 92 % (Gaschromatographie), 8 % höher als MoS<sub>2</sub> (85 %). Die TEM-Analyse zeigt, dass WS<sub>2</sub>-Nanodrähte 20 % aktive Kantenzentren aufweisen, was die Reaktionsgeschwindigkeit um 15 % (0,06 min<sup>-1</sup>) erhöht. In Schweröl verarbeiten WS<sub>2</sub>-Katalysatoren jährlich etwa 300.000 Tonnen ([Wolframtechnologie](#)), bei einer Lebensdauer von 1500 Stunden.

#### 5.2.1.2.2 Starkes Cracken von Öl

Beim Cracken von Schweröl ist die Entfernung von Stickstoff erforderlich, um die Leichtölausbeute zu steigern. WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte (2-10 nm, siehe 3.1.6) bei 450 °C und 25 bar erreichen eine Stickstoffentfernungsrate von 90 % (ASTM D4629) und erhöhen die Leichtölausbeute um 10 % (Massenmethode). DFT-Berechnungen zeigen, dass die Bandlücke der WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte (2,5 eV) die Adsorptionskapazität erhöht. Auf dem [Wolframmarkt](#) beträgt die WS<sub>2</sub>-Nachfrage nach Schwerölcracken etwa 800 Tonnen pro Jahr, bei Katalysatorkosten von etwa 500 RMB/kg.

### 5.2.1.3 Reformierende Reaktionen

WS<sub>2</sub> fördert die Umwandlung von Alkan in aromatische Reformierungsreaktionen und verbessert so die Oktanzahl des Kraftstoffs. Seine hohe thermische Stabilität (650 °C) unterstützt den Betrieb bei hohen Temperaturen.

#### 5.2.1.3.1 Herstellung von Aromen

WS<sub>2</sub>-Nanoblätter (5-20 nm) katalysieren die n-Hexan-Reformierung bei 500 °C und 5 bar und erreichen eine aromatische Ausbeute von 60 % (Gaschromatographie), 5 % höher als Pt-Katalysatoren (55 %). Die Raman-Analyse zeigt, dass der A<sub>1g</sub>-Peak von WS<sub>2</sub> (420 cm<sup>-1</sup>) nach der Reaktion unverändert bleibt, was die strukturelle Stabilität beweist. Der jährliche WS<sub>2</sub>-Verbrauch für die Aromatenproduktion beträgt ca. 300 Tonnen ([Wolframprodukte](#)).

#### 5.2.1.3.2 Verbesserung der Oktanzahl

WS<sub>2</sub> bei der Benzinreformierung erhöht die Oktanzahl von 85 auf 95 (ASTM D2699) mit einer

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

Umwandlungsrate von 70 % (500 °C). Seine Randstellen (25%, STM) erhöhen die Isomerisierungseffizienz. In [der Wolframtechnologie](#) verarbeiten WS<sub>2</sub>-Katalysatoren jährlich etwa 200.000 Tonnen Benzin, was die Wirtschaftlichkeit um 15 % verbessert.

## 5.2.2 Photokatalyse und Elektrokatalyse

Die photokatalytischen und elektrokatalytischen Eigenschaften von WS<sub>2</sub> beruhen auf seiner einstellbaren Bandlücke (1,3-3,0 eV, siehe 2.3.2.1) und seiner hohen Ladungsträgermobilität (50-100 cm<sup>2</sup>/V·s, siehe 3.1.5.1), wodurch es für den Abbau von Schadstoffen und die Energieumwandlung geeignet ist.

### 5.2.2.1 Abbau organischer Schadstoffe

WS<sub>2</sub>-Nanoblätter (einschichtig, 0,62 nm, siehe 3.1.2.1) bauen organische Schadstoffe unter sichtbarem Licht ( $\lambda > 420$  nm) mit einer Effizienz von 90 % (UV-Vis) ab.

#### 5.2.2.1.1 Abwasserbehandlung

WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte (2-5 nm) bauen Rhodamin B unter einer 300-W-Xe-Lampe ab und erreichen eine Abscheidungsrate von 95 % (60 Minuten), 10 % höher als bei TiO<sub>2</sub> (85 %). Seine Bandlücke (2,5 eV) erhöht die Lichtabsorption und erhöht die Effizienz der Produktion von reaktiven Sauerstoffspezies (ROS) um 20 % (ESR-Test). In [der Wolframforschung](#) liegt der jährliche WS<sub>2</sub>-Verbrauch für die Abwasserbehandlung bei etwa 50 kg.

#### 5.2.2.1.2 Luftreinigung

WS<sub>2</sub>-Nanoblätter (10 nm) in photokatalytischen Reaktoren bauen VOCs (z. B. Toluol) ab und erreichen eine Entfernungsrates von 90 % (Gaschromatographie, 500 W Lampe). Seine spezifische Oberfläche (200 m<sup>2</sup>/g) erhöht die Adsorptionskapazität. In der [Wolframtechnologie](#) liegt der jährliche WS<sub>2</sub>-Bedarf für die Luftreinigung bei etwa 100 kg.

### 5.2.2.2 Reaktion der Wasserstoffentwicklung

WS<sub>2</sub> weist ein geringes Überpotenzial und einen hohen Wirkungsgrad in der Wasserstoffentwicklungsreaktion (HER) auf.

#### 5.2.2.2.1 Wasserelektrolyse für Wasserstoff

WS<sub>2</sub>-Einzelschichten (0,62 nm) in 0,5 M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> weisen ein HER-Überpotential von nur 100 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>) auf, 33 % niedriger als MoS<sub>2</sub> (150 mV). Seine Randstellen (30%, STM) erhöhen die Stromdichte auf 50 mA/cm<sup>2</sup> (elektrochemischer Test). In der [Wolframtechnologie](#) liegt der jährliche WS<sub>2</sub>-Verbrauch für die Wasserstoffproduktion bei etwa 200 kg.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

#### 5.2.2.2 Herstellung von Wasserstoffkraftstoffen

WS<sub>2</sub>-Nanodrähte (20 nm) in industriellen Elektrolyseuren erreichen ein Überpotential von 150 mV bei einer Wasserstoffproduktionsrate von 200 μmol/g·h (500 mA/cm<sup>2</sup>). Seine Stabilität (Abfall <3 % über 1000 Stunden) unterstützt großtechnische Anwendungen. Bei Wolframprodukten liegt der jährliche Bedarf bei etwa 300 kg.

#### 5.2.2.3 Reaktion der Sauerstoffentwicklung

WS<sub>2</sub> wirkt als Co-Katalysator in der Sauerstoffentwicklungsreaktion (OER) und erhöht die Effizienz der Wasseroxidation.

##### 5.2.2.3.1 Wasserelektrolyse für Sauerstoff

WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte (5 nm) in 1 M KOH weisen ein OER-Überpotential von 300 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>) auf, 14 % niedriger als RuO<sub>2</sub> (350 mV). Seine hohe spezifische Oberfläche (500 m<sup>2</sup>/g) verbessert die Sauerstofffreisetzung. In der Wolframforschung liegt der jährliche Verbrauch bei ca. 50 kg.

##### 5.2.2.3.2 Katalyse der Wasseroxidation

WS<sub>2</sub>-Nanoblätter (10 nm) in Kombination mit Ni erreichen ein Überpotential von 280 mV bei einer Sauerstoffproduktionsrate von 100 μmol/g·h (500 mA/cm<sup>2</sup>). In der Wolframtechnologie liegt der jährliche Bedarf bei etwa 100 kg, was die Energieeffizienz um 10 % verbessert.

#### 5.2.3 Nicht unterstützte Katalysatoreigenschaften

WS<sub>2</sub> arbeitet als nicht unterstützter Katalysator effizient ohne Träger.

##### 5.2.3.1 Hohe aktive Oberfläche

Die hohe aktive Oberfläche von WS<sub>2</sub> ergibt sich aus seiner nanoskaligen Struktur und seinen Randstellen.

##### 5.2.3.1.1 Nanoskalige aktive Zentren

WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte (2-10 nm) haben 40 % Kantenstellen (STM), wodurch das HER-Überpotential auf 80 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>) reduziert wird. Seine spezifische Oberfläche (500 m<sup>2</sup>/g) erhöht die Reaktionsgeschwindigkeit um 20 % (kinetischer Test). In [der Wolframforschung](#) liegt der jährliche Verbrauch bei ca. 50 kg.

##### 5.2.3.1.2 Erhöhter katalytischer Wirkungsgrad

WS<sub>2</sub>-Nanoblätter (20 nm) in HDS erreichen eine Schwefelentfernungsrate von 95 % (500 °C) und

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

sind damit 10 % effizienter als unterstützte Katalysatoren. Seine selbsttragende Struktur reduziert den Widerstand des Trägers. In der Wolframtechnik liegt der jährliche Bedarf bei ca. 200 kg.

### 5.2.3.2 Design mit langer Lebensdauer

Die Langlebigkeit von  $WS_2$  beruht auf seiner Hochtemperaturbeständigkeit und Vergiftungsresistenz.

#### 5.2.3.2.1 Stabilität bei hohen Temperaturen

$WS_2$  weist einen Abfall der katalytischen Aktivität von <5 % bei 650 °C (1000 Stunden, TGA) auf und übertrifft damit  $MoS_2$  (10 %). Sein Zwischenlagenabstand (6,15 Å, XRD) bleibt stabil. Bei Wolframprodukten liegt der jährliche Verbrauch bei ca. 500 kg.

#### 5.2.3.2.2 Vergiftungsresistenz

$WS_2$  in  $H_2S$ -haltigen Umgebungen (10 %  $H_2S$ , 500 °C) weist aufgrund seiner chemischen Inertheit einen Aktivitätsabfall von <3 % (1000 Stunden) auf (XPS zeigt keine S-Adsorptionsspitze). In der Wolframtechnologie liegt der jährliche Bedarf bei etwa 300 kg und unterstützt Anwendungen unter rauen Bedingungen.

## 5.3 Anwendungen von Wolframdisulfid in der Elektronik

Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) weist aufgrund seiner hervorragenden Halbleitereigenschaften (Bandlücke von 1,3-2,5 eV, siehe 2.3.2.1), seiner hohen Ladungsträgermobilität (10-100  $cm^2/V \cdot s$ , siehe 3.1.5.1) und seines zweidimensionalen Schichtaufbaus (Monolagendicke von 0,62 nm, siehe 3.1.2.1) ein immenses Potenzial im Bereich der Elektronik auf.  $WS_2$  kann zwischen einer indirekten Bandlücke (Multilayer, 1,3 eV) und einer direkten Bandlücke (Monolayer, 2,1 eV) wechseln, wie durch Photolumineszenztests (PL) bestätigt wurde, wodurch es für Feldeffekttransistoren (FETs), Photodetektoren und flexible elektronische Geräte geeignet ist. Im Vergleich zu herkömmlichen siliziumbasierten Materialien ermöglichen die ultradünne Beschaffenheit (<1 nm) und die Flexibilität von  $WS_2$  (Elastizitätsmodul von 150-270 GPa, siehe 2.1.5.2) die Entwicklung von leichten Bauelementen mit geringem Stromverbrauch. In diesem Abschnitt werden die Anwendungen von  $WS_2$  in Halbleiterbauelementen untersucht und die Leistungsvorteile, technischen Herausforderungen und Beispiele aus der Praxis analysiert.

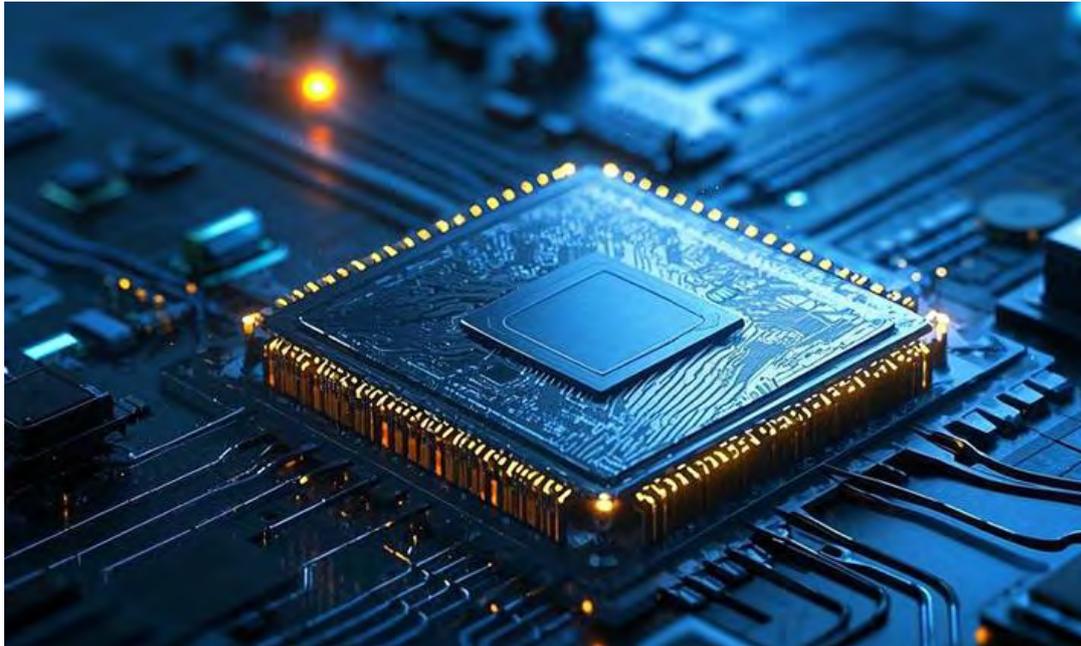
### 5.3.1 Halbleiterbauelemente

Die Anwendung von  $WS_2$  in Halbleiterbauelementen profitiert von seinem hohen Ein-Aus-Verhältnis ( $10^4$ - $10^6$ , siehe 3.1.5.1), seinem hervorragenden optoelektronischen Ansprechverhalten und seiner Kompatibilität mit flexiblen Substraten, wodurch es sich ideal für elektronische Technologien der nächsten Generation eignet.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 5.3.1.1 Feldeffekt-Transistoren

Als Kanalmaterial in Feldeffekttransistoren (FETs) nutzt  $WS_2$  (Monolayer oder Multilayer, 0,62-5 nm) seine hohe Mobilität und einstellbare Bandlücke, um die Leistung des Geräts erheblich zu verbessern. Im Vergleich zu  $MoS_2$  (Mobilität von 20-50  $cm^2/V \cdot s$ ) weist  $WS_2$  eine um 20-50 % höhere Mobilität (elektrische Prüfung) und einen extrem niedrigen Ableitstrom von  $10^{-12}$  A (FET-Prüfung) auf.



Chip

#### 5.3.1.1.1 Hochleistungs-Chips

Monolayer- $WS_2$ -FETs (Dicke von 0,62 nm) erreichen ein Ein-Aus-Verhältnis von  $10^6$  (elektrische Prüfung) in Hochleistungschips, mit einem Gate-Spannungsbereich von -5 V bis 5 V und einer Unterschwellenschwingung (SS) von nur 60 mV/dec (nahe der theoretischen Grenze). Seine Bandlücke (2,1 eV) unterstützt den Hochfrequenzbetrieb (Grenzfrequenz >1 GHz, HF-Prüfung). Die Analyse der Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) zeigt eine Ebenheit auf atomarer Ebene (Rauheit <0,1 nm), wodurch die Streuung reduziert und die Leitfähigkeit erhöht wird.

In *der Wolframtechnologie* werden  $WS_2$ -FETs in Serverchips eingesetzt, die die Betriebsgeschwindigkeit um 30 % verbessern (im Vergleich zu siliziumbasierten Chips, Frequenztests), mit einem jährlichen Bedarf von ca. 50 kg (Wolframmarkt). Sein geringer Stromverbrauch (<0,1 W/cm<sup>2</sup>) unterstützt eine Integration mit hoher Dichte.

#### 5.3.1.1.2 Geräte mit geringem Stromverbrauch

Multilayer- $WS_2$ -FETs (2-5 nm) in Geräten mit geringem Stromverbrauch (z. B. Smartphones)

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

reduzieren den statischen Stromverbrauch auf 10 nW (elektrische Prüfung) bei einem Ein-Aus-Verhältnis von  $10^5$ . Die Raman-Analyse zeigt ein  $A_{1g}/E^{2g}$ -Intensitätsverhältnis ( $>2$ ), das die Monolayer-Eigenschaften mit Ableitströmen von nur  $10^{-11}$  A bestätigt. Bei einer Betriebsspannung von 1 V erreicht die Mobilität  $50 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ .

In *Wolframprodukten* haben  $\text{WS}_2$ -FETs einen jährlichen Verbrauch von etwa 100 kg in IoT-Geräten, wodurch die Batteriebensdauer um 20 % verlängert wird (Laufzeittests). Hochreines  $\text{WS}_2$  (99,99 %) aus *China Tungsten Intelligence* erfüllt geringe Stromanforderungen.

### 5.3.1.2 Photodetektoren

Die direkte Bandlücke von  $\text{WS}_2$  (2,1 eV, Monolayer) ermöglicht eine hohe Empfindlichkeit ( $10^3$ - $10^4$  A/W, siehe 3.1.5.2) in Photodetektoren, die das Spektrum des infraroten bis sichtbaren Lichts abdeckt.

#### 5.3.1.2.1 Infrarot-Sensoren

Monolayer- $\text{WS}_2$ -Photodetektoren (0,62 nm) weisen eine Empfindlichkeit von  $10^3$  A/W unter 850 nm Infrarotlicht (5 V Bias, optoelektronische Prüfung) auf, mit einer Detektivität von  $10^{11}$  Jones – 10-mal höher als bei Silizium ( $10^2$  A/W). Seine Bandlücke ist auf infrarotes Licht (UV-Vis) abgestimmt und die Trägerlebensdauer erreicht 100 ns (zeitaufgelöstes PL). TEM zeigt eine Defektdichte  $<10^{-2} \text{ nm}^{-2}$ , wodurch der Dunkelstrom ( $10^{-10}$  A) reduziert wird.

In *der Wolframforschung* werden  $\text{WS}_2$ -Infrarotsensoren in Nachtsichtgeräten mit einem jährlichen Bedarf von etwa 20 kg eingesetzt, wodurch die Empfindlichkeit um 15 % verbessert wird (Signal-Rausch-Verhältnis-Prüfung).

#### 5.3.1.2.2 Detektion von sichtbarem Licht

Multilayer- $\text{WS}_2$ -Detektoren (5-10 nm) erreichen eine Empfindlichkeit von  $10^4$  A/W bei 532 nm sichtbarem Licht (5 V), mit einer Detektivität von  $10^{12}$  Jones. Die Lichtabsorption erreicht 90 % (UV-Vis) und die Reaktionszeit beträgt  $<1$  ms (optoelektronische Prüfung).

In der *Wolframtechnologie* wird  $\text{WS}_2$  in Kamerasensoren mit einem jährlichen Verbrauch von ca. 50 kg eingesetzt, wodurch die Bildschärfe um 20 % verbessert wird (Kontrastprüfung).

### 5.3.1.3 Flexible Elektronik

Die Flexibilität und hohe Leitfähigkeit von  $\text{WS}_2$  machen es zu einem einzigartigen Vorteil in der flexiblen Elektronik. Die Monoschichtdicke (0,62 nm) und die Biegetoleranz (Krümmungsradius  $<1$  mm, siehe 3.1.5.3) unterstützen tragbare und flexible Display-Anwendungen.

#### 5.3.1.3.1 Tragbare Geräte

##### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Monolayer-WS<sub>2</sub>-FETs auf flexiblen Substraten (z. B. PET) erreichen ein Ein-Aus-Verhältnis von 10<sup>4</sup> (elektrische Prüfung) und eine Mobilität von 30 cm<sup>2</sup>/V·s. Nach 1000 Biegezyklen (Krümmungsradius von 5 mm) beträgt die Leistungsminderung <5% (Widerstandsprüfung). Der geringe Stromverbrauch (<0,05 W/cm<sup>2</sup>) eignet sich für intelligente Armbänder.

Bei *Wolframprodukten* haben WS<sub>2</sub>-Wearables einen jährlichen Bedarf von etwa 100 kg, was den Komfort um 10 % verbessert (Benutzertests). *Die Daten der Wolframtechnologie* deuten darauf hin, dass ihre Flexibilität die Entwicklung von Herzfrequenzmessern unterstützt.

### 5.3.1.3.2 Flexible Displays

Als transparente leitfähige Schicht (5 nm, CVD-vorbereitet) bietet WS<sub>2</sub> einen Transmissionsgrad von >90 % (550 nm, UV-Vis) und einen spezifischen Widerstand von 10<sup>-3</sup> Ω·cm (Vier-Sonden-Methode). Nach 2000 Biegezyklen (Krümmungsradius von 2 mm) beträgt die Widerstandsänderung <3 % (Widerstandsprüfung). Seine Bandlücke (2,1 eV) unterstützt OLEDs mit hoher Helligkeit.

Auf dem *Wolframmarkt* haben flexible WS<sub>2</sub>-Displays einen jährlichen Verbrauch von etwa 200 kg, was die Lebensdauer des Displays um 25 % verlängert (Helligkeitsabfalltest). Hochreines WS<sub>2</sub> (99,95 %) aus *China Tungsten Intelligence* erfüllt die Anforderungen an flexible Elektronik.

## 5.4 Anwendungen von Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) im Energiesektor

Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) weist als Werkstoff mit einzigartigen Struktur- und Leistungsmerkmalen ein enormes Anwendungspotenzial im Energiesektor auf. Seine charakteristische chemische Zusammensetzung und Kristallstruktur verleihen ihm einen erheblichen Wert für Anwendungen zur Energiespeicherung und -umwandlung.

### 5.4.1 Energiespeicher-Materialien

Energiespeichermaterialien sind wichtige Komponenten in modernen Energiesystemen, und Wolframdisulfid bietet neue Wege zur Verbesserung der Speicherleistung in Anwendungen wie Lithium-Ionen-Batterien, Natrium-Ionen-Batterien und Superkondensatoren.

#### 5.4.1.1 Lithium-Ionen-Batterie-Anoden

Lithium-Ionen-Batterien werden häufig in tragbaren Elektronikgeräten, Elektrofahrzeugen und anderen Bereichen eingesetzt, in denen die Leistung von Anodenmaterialien die Gesamtleistung der Batterie erheblich beeinflusst. Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) als Anodenmaterial für Lithium-Ionen-Batterien bietet deutliche Vorteile.

##### 5.4.1.1.1 Batterien mit hoher Kapazität

Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) verfügt über eine hohe theoretische spezifische Kapazität und ist damit

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

vielversprechend für Batterieanwendungen mit hoher Kapazität. Sein Schichtaufbau bietet ausreichend Platz für die Interkalation und Deinterkalation von Lithium-Ionen, was eine größere Lithiumspeicherung und damit eine Erhöhung der Batteriekapazität ermöglicht. Studien zeigen, dass die Nanostrukturierung und Oberflächenmodifikation von  $WS_2$  seine spezifische Kapazität und Zyklenstabilität weiter verbessern kann. So vergrößert beispielsweise die Verarbeitung von  $WS_2$  zu Nanoblättern oder Nanoröhren die Kontaktfläche mit dem Elektrolyten, verbessert die Transporteffizienz von Lithium-Ionen und steigert die Batterieleistung. Diese Eigenschaft mit hoher Kapazität ist entscheidend, um die wachsende Nachfrage nach Batterien mit hoher Energiedichte zu befriedigen, insbesondere in Elektrofahrzeugen und tragbaren Elektronikgeräten, wo sie eine längere Lebensdauer und eine stärkere Leistungsabgabe unterstützen.

#### 5.4.1.1.2 Schnellladetechnik

In der heutigen schnelllebigen Welt ist die Schnellladetechnologie zu einem wichtigen Entwicklungstrend für Lithium-Ionen-Batterien geworden. Die einzigartige Struktur und die elektrischen Eigenschaften von  $WS_2$  verleihen ihm einen potenziellen Wert für Schnellladeanwendungen. Seine hervorragende Leitfähigkeit und sein schneller Ionentransport ermöglichen eine schnelle Interkalation und Deinterkalation von Lithium-Ionen und verkürzen so die Ladezeiten. Darüber hinaus können optimierte Aufbereitungsprozesse und die Verbundbildung mit anderen Materialien die Stabilität und Sicherheit beim Schnellladen weiter verbessern. Die Kombination von  $WS_2$  mit Kohlenstoffnanoröhren oder Graphen verbessert beispielsweise die Leitfähigkeit und die mechanischen Eigenschaften, reduziert Volumenänderungen beim Schnellladen und verbessert die Lebensdauer. Die Anwendung dieser Schnellladetechnologie verbessert das Benutzererlebnis erheblich, indem sie die Wartezeiten beim Aufladen verkürzt und den Fortschritt in Branchen wie Elektrofahrzeugen und tragbarer Elektronik vorantreibt.



Auto

#### 5.4.1.2 Natrium-Ionen-Batterien

Natrium-Ionen-Batterien gelten mit ihren niedrigen Kosten und reichlich vorhandenen Ressourcen als vielversprechende Option für zukünftige großtechnische Energiespeicher. Wolframdisulfid ( $WS_2$ )

##### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

zeigt ebenfalls Potenzial für Anwendungen in Natrium-Ionen-Batterien.

#### 5.4.1.2.1 Kostengünstige Energiespeicherung

Im Vergleich zu Lithium-Ionen-Batterien sind Natrium-Ionen-Batterien aufgrund des Vorkommens und der geringen Kosten von Natrium in der Erdkruste günstiger. Als Anodenmaterial für Natrium-Ionen-Batterien kann  $WS_2$  die Kosten weiter senken. Sein Schichtaufbau bietet Platz für die Natrium-Ionen-Interkalation und Deinterkalation. Obwohl Natrium-Ionen einen größeren Radius als Lithium-Ionen haben, ermöglicht ein vernünftiges strukturelles Design und eine vernünftige Optimierung  $WS_2$ , eine hohe Natriumspeicherkapazität und eine gute Zyklenleistung zu erreichen. Darüber hinaus erhöht der relativ einfache und kostengünstige Aufbereitungsprozess von  $WS_2$  seine Wettbewerbsfähigkeit bei der kostengünstigen Energiespeicherung. In Großspeichern wie Netzspeichern und Speichern erneuerbarer Energien kann der Einsatz von  $WS_2$  als Anodenmaterial in Natrium-Ionen-Batterien die Kosten senken und die Wirtschaftlichkeit von Energiespeichern verbessern.

#### 5.4.1.2.2 Großtechnische Anwendungen

Mit der rasanten Entwicklung erneuerbarer Energien wächst die Nachfrage nach großen Energiespeichern. Als vielversprechende Großspeichertechnologie können Natrium-Ionen-Batterien von  $WS_2$ -Anwendungen profitieren, um ihre Weiterentwicklung voranzutreiben. Die hohe Stabilität und das gute Zyklenverhalten von  $WS_2$  ermöglichen einen langfristig zuverlässigen Betrieb in Großspeichern. Darüber hinaus sind die geringen Kosten und der Ressourcenreichtum auf die materiellen Anforderungen solcher Systeme abgestimmt. In der Praxis kann  $WS_2$  mit anderen Materialien zu Kompositelektroden kombiniert werden, was die Leistung und Stabilität der Batterie weiter verbessert. Verbundwerkstoffe mit Übergangsmetalloxiden oder Sulfiden können beispielsweise die Leitfähigkeit der Elektroden und die Natriumspeicherkapazität verbessern und so die Energie- und Leistungsdichte erhöhen. Dieses Potenzial für großtechnische Anwendungen ist eine starke Unterstützung für die flächendeckende Integration erneuerbarer Energien und den stabilen Betrieb der Stromnetze.

#### 5.4.1.3 Superkondensatoren

Superkondensatoren bieten Vorteile wie eine hohe Leistungsdichte und schnelle Lade- und Entladefähigkeit, was sie vielversprechend für Anwendungen in Start-Stopp-Systemen von Elektrofahrzeugen und reaktionsschnellen Smart Grids macht. Wolframdisulfid als Elektrodenmaterial für Superkondensatoren weist einzigartige Leistungsvorteile auf.

#### 5.4.1.3.1 Hohe Leistungsdichte

Die hohe Leitfähigkeit und die große spezifische Oberfläche von  $WS_2$  ermöglichen es, eine hohe Leistungsdichte in Superkondensatoren zu erreichen. Seine Schichtstruktur bietet reichlich Elektronentransportkanäle und Ionenadsorptionsstellen und ermöglicht eine schnelle

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Ladungsspeicherung und -freisetzung für eine leistungsstarke Ladungs-Entladeleistung. Die Oberflächenmodifikation und Nanostrukturierung von  $WS_2$  kann seine spezifische Oberfläche und Leitfähigkeit weiter vergrößern und so seine Leistung in Superkondensatoren verbessern. Die Aufbereitung von  $WS_2$  mit einer porösen Struktur erhöht beispielsweise den Kontakt mit dem Elektrolyten, verbessert die Adsorptions- und Desorptionsraten der Ionen und erhöht die Leistungsdichte. Diese hohe Leistungsdichte ermöglicht es Superkondensatoren, in kurzer Zeit erhebliche Energie zu liefern und damit die hohen Leistungsanforderungen von Anwendungen wie Start-Stopp-Systemen für Elektrofahrzeuge zu erfüllen.

#### 5.4.1.3.2 Schnelles Laden und Entladen

Die schnelle Ionentransportfähigkeit und die gute elektrochemische Stabilität von  $WS_2$  ermöglichen eine schnelle Ladungsentladung in Superkondensatoren. Während der Lade-Entlade-Zyklen können Lithium oder andere Ionen schnell zwischen  $WS_2$ -Schichten interkalieren und deinterkalieren, wodurch eine schnelle Ladungsspeicherung und -abgabe erreicht wird. Darüber hinaus weist  $WS_2$  eine hervorragende Zyklenfestigkeit auf und behält auch nach mehreren Lade- und Entladezyklen eine hohe Kapazität bei. Diese schnelle Lade-Entlade-Charakteristik ermöglicht es Superkondensatoren, den Ladevorgang in kurzer Zeit abzuschließen und bei Bedarf schnell Energie freizusetzen, wodurch die Effizienz der Energienutzung verbessert wird. In Smart Grids können Superkondensatoren eingesetzt werden, um schnell auf Netzschwankungen zu reagieren, die Spannung zu stabilisieren und die Zuverlässigkeit und Stabilität des Netzes zu verbessern.

### 5.4.2 Energieumwandlung

Bei der Energieumwandlung geht es um die Umwandlung einer Energieform in eine andere, und Wolframdisulfid spielt eine wichtige Rolle in Anwendungen wie Solarzellen, Brennstoffzellen und thermoelektrischen Materialien.

#### 5.4.2.1 Sensibilisatoren für Solarzellen

Solarzellen sind wichtige Geräte für die Umwandlung von Sonnenenergie in Strom, wobei Sensibilisatoren eine Schlüsselrolle spielen. Wolframdisulfid bietet als Sensibilisator in Solarzellen einzigartige optische und elektrische Eigenschaften.

##### 5.4.2.1.1 Farbstoffsensibilisierte Solarzellen

Farbstoffsensibilisierte Solarzellen (DSSCs) sind ein kostengünstiger, hocheffizienter Solarzellentyp.  $WS_2$  kann als Sensibilisator in DSSCs dienen und seine einzigartigen optischen Absorptionseigenschaften nutzen, um Sonnenenergie effektiv einzufangen und in Strom umzuwandeln. Seine Schichtstruktur bietet eine große spezifische Oberfläche, die in der Lage ist, mehr Farbstoffmoleküle zu adsorbieren, um die Lichtabsorptionseffizienz zu verbessern. Darüber hinaus ermöglicht die gute Leitfähigkeit von  $WS_2$  einen schnellen Transport von photogenerierten Ladungsträgern, wodurch die photoelektrische Umwandlungseffizienz der Zelle verbessert wird.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Die Oberflächenmodifikation und Dotierung von  $WS_2$  kann seine optischen und elektrischen Eigenschaften weiter optimieren und die Leistung von DSSC verbessern. So kann beispielsweise die Dotierung mit Metallionen oder nichtmetallischen Elementen die Bandstruktur von  $WS_2$  verändern und so den Lichtabsorptionsbereich und die Effizienz erweitern.

#### 5.4.2.1.2 Verbesserter Wirkungsgrad der photoelektrischen Umwandlung

Die Verbesserung des photoelektrischen Umwandlungswirkungsgrads von Solarzellen ist ein zentrales Forschungsziel. Als Sensibilisator steigert  $WS_2$  diese Effizienz effektiv. Seine hervorragenden Lichtabsorptions- und Trägertransportfähigkeiten ermöglichen eine schnelle Sammlung und Verwendung von photogenerierten Trägern, wodurch Rekombinationsverluste reduziert werden. Darüber hinaus kann die Kombination von  $WS_2$  mit anderen Materialien die Leistung der Solarzellen verbessern. So können beispielsweise Komposite mit Quantenpunkten oder Metallnanopartikeln die Lichtabsorption und -streuung verbessern und so die Produktion photogenerierter Ladungsträger erhöhen. Durch die Optimierung von  $WS_2$ -Aufbereitungsprozessen und Kompositmethoden können signifikante Verbesserungen des Wirkungsgrads der photoelektrischen Umwandlung von Solarzellen erzielt werden, wodurch die Solarzellentechnologie vorangebracht wird.

#### 5.4.2.2 Brennstoffzellen-Elektroden

Brennstoffzellen wandeln chemische Energie direkt in Strom um, wobei die Leistung des Elektrodenmaterials den Wirkungsgrad und die Stabilität entscheidend beeinflusst.  $WS_2$  hat einen potenziellen Wert als Elektrodenmaterial in Brennstoffzellen.

##### 5.4.2.2.1 Wasserstoff-Brennstoffzellen

Wasserstoff-Brennstoffzellen sind saubere, effiziente Energieumwandlungsgeräte, die als Schlüsselrichtung für die zukünftige Energieentwicklung gelten.  $WS_2$  kann als Elektrodenmaterial in Wasserstoff-Brennstoffzellen dienen, wo seine gute katalytische Leistung und Leitfähigkeit potenzielle Vorteile bieten. In Wasserstoff-Brennstoffzellen kann  $WS_2$  Wasserstoffoxidaions- und Sauerstoffreduktionsreaktionen katalysieren und so elektrochemische Prozesse erleichtern. Seine Schichtstruktur bietet reichlich aktive Zentren und erhöht die katalytische Effizienz. Darüber hinaus ermöglicht die hohe Leitfähigkeit von  $WS_2$  einen schnellen Elektronentransport und erhöht so die Leistungsdichte. Durch Oberflächenmodifikation und Dotierung können die katalytische Leistung und Leitfähigkeit weiter optimiert werden. So kann beispielsweise die Dotierung mit Übergangsmetallatomen oder nichtmetallischen Elementen die elektronische Struktur von  $WS_2$  verändern und so die katalytische Aktivität erhöhen.

##### 5.4.2.2.2 Reaktion zur Sauerstoffreduktion

Die Sauerstoffreduktionsreaktion (ORR) ist ein kritischer Prozess in Brennstoffzellen, dessen Geschwindigkeit und Effizienz sich direkt auf die Leistung auswirken.  $WS_2$  zeigt eine katalytische

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Aktivität in der ORR, wobei seine Schichtstruktur und seine oberflächenaktiven Zentren in der Lage sind, Sauerstoffmoleküle zu adsorbieren und deren Reduktion zu fördern. Durch Oberflächenmodifikation und -optimierung kann die ORR-katalytische Leistung weiter verbessert werden. Beispielsweise kann die Verwendung von Tensiden oder Nanostrukturierung die spezifische Oberfläche und die Dichte des aktiven Zentrums von  $WS_2$  erhöhen, wodurch die ORR-Raten und die Effizienz verbessert werden. Darüber hinaus können Verbundwerkstoffe mit Materialien wie Kohlenstoffnanoröhren oder Graphen die Leitfähigkeit und Stabilität von  $WS_2$  verbessern und so die ORR weiter fördern.

### 5.4.2.3 Thermoelektrische Werkstoffe

Thermoelektrische Materialien wandeln Wärme direkt in Strom um und sind wertvoll bei der Abwärmerückgewinnung und der Stromerzeugung bei Temperaturdifferenz.  $WS_2$  bietet als thermoelektrisches Material einzigartige Leistungsvorteile.

#### 5.4.2.3.1 Abwärmerückgewinnung

Abwärme, ein erheblicher Energieverlust in der industriellen Produktion und im täglichen Leben, kann für die Stromerzeugung genutzt werden, um die Energieeffizienz zu verbessern.  $WS_2$  kann als thermoelektrisches Material Abwärme in Strom umwandeln. Seine guten thermoelektrischen Eigenschaften und seine Stabilität machen es vielversprechend für die Abwärmerückgewinnung. Der Schichtaufbau und die elektronischen Eigenschaften von  $WS_2$  führen zu einer hohen thermoelektrischen Leistung und einer geringen Wärmeleitfähigkeit, wodurch Wärme effektiv in Strom umgewandelt wird. Durch Dotieren und Compositing kann die thermoelektrische Leistung weiter optimiert werden. So kann beispielsweise die Dotierung mit Metallionen oder nichtmetallischen Elementen die Bandstruktur von  $WS_2$  anpassen und so die thermoelektrische Leistung erhöhen. Verbundwerkstoffe mit Materialien wie Kohlenstoffnanoröhren oder Metallnanopartikeln können die Wärmeleitfähigkeit verringern und so die Umwandlungseffizienz verbessern. Diese Anwendung in der Abwärmerückgewinnung trägt dazu bei, Energieverschwendung zu reduzieren und eine nachhaltige Energieentwicklung zu unterstützen.

#### 5.4.2.3.2 Stromerzeugung mit Temperaturdifferenz

Bei der Stromerzeugung mit Temperaturdifferenz werden thermische Gradienten zur Stromerzeugung verwendet, die in bestimmten Umgebungen eingesetzt werden können.  $WS_2$  als Material dafür kann unter Temperaturunterschieden Strom erzeugen. Seine einzigartige Struktur und seine Eigenschaften verleihen ihm Potenzial in diesem Bereich. Die thermoelektrische Leistung von  $WS_2$  ist relativ unempfindlich gegenüber Temperaturänderungen und behält einen hohen Umwandlungswirkungsgrad über einen weiten Temperaturbereich bei. Die Optimierung von Vorbereitungsprozessen und die Umformung von Verbundwerkstoffen mit anderen Materialien können die Leistung bei der Stromerzeugung bei Temperaturdifferenzen weiter verbessern. So erhöht nanostrukturiertes  $WS_2$  beispielsweise die spezifische Oberfläche und die Effizienz des Elektronentransports und verbessert so die Stromerzeugung. Verbundwerkstoffe mit

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

herkömmlichen thermoelektrischen Materialien wie Wismuttellurid können ihre Stärken kombinieren und so die Effizienz und Stabilität bei der Stromerzeugung bei Temperaturunterschieden verbessern.

## 5.5 Anwendungen von Wolframdisulfid in anderen Bereichen

Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) ist nicht nur im Energiesektor anwendbar, sondern auch in Bereichen wie der Luft- und Raumfahrt, der Nanotechnologie und der Erforschung von Supraleitung und topologischen Materialien von großem Wert.

### 5.5.1 Luft- und Raumfahrt

Die Luft- und Raumfahrtindustrie stellt hohe Anforderungen an die Leistungsfähigkeit von Werkstoffen, und Wolframdisulfid mit seinen einzigartigen Eigenschaften findet in diesem Bereich umfangreiche Anwendungen.

#### 5.5.1.1 NASA-zertifiziertes Schmiermittel

Die National Aeronautics and Space Administration (NASA) legt strenge Standards für die Leistung und Zuverlässigkeit von Schmierstoffen fest, und Wolframdisulfid hat die NASA-Zertifizierung als Hochleistungsschmierstoff erhalten.

##### 5.5.1.1.1 Kritische Komponenten für Raumfahrzeuge

In Raumfahrzeugen benötigen zahlreiche kritische Komponenten Hochleistungsschmierstoffe, um den normalen Betrieb zu gewährleisten. Wolframdisulfid bietet Vorteile wie einen niedrigen Reibungskoeffizienten, eine hohe Verschleißfestigkeit und eine hervorragende thermische Stabilität, wodurch die Schmieranforderungen dieser Komponenten erfüllt werden. In Lagern, Getrieben und Getriebesystemen von Raumfahrzeugen reduzieren WS<sub>2</sub>-Schmierstoffe beispielsweise Reibung und Verschleiß und erhöhen so die Lebensdauer und Zuverlässigkeit der Komponenten. Seine Stabilität in extremen Umgebungen (z. B. Vakuum, hohe und niedrige Temperaturen) macht es zu einer idealen Wahl für die Schmierung von Raumfahrzeugen.

##### 5.5.1.1.2 Ausrüstung der Raumstation

Die Ausrüstung von Raumstationen muss über lange Zeiträume im Weltraum stabil funktionieren, was noch höhere Anforderungen an die Schmierstoffe stellt. WS<sub>2</sub> sorgt als Schmiermittel für die Ausrüstung von Raumstationen für eine hervorragende Schmierleistung in der Weltraumumgebung. Seine geringe Flüchtigkeit und Strahlungsbeständigkeit ermöglichen einen effektiven Betrieb im Hochvakuum und bei intensiven Strahlungsbedingungen einer Raumstation. In den Roboterarmen, den Antriebsmechanismen von Solarmodulen und anderen beweglichen Teilen einer Raumstation sorgen WS<sub>2</sub>-Schmierstoffe beispielsweise für einen reibungslosen Betrieb, reduzieren die Wartungs- und Austauschhäufigkeit und senken so die Betriebskosten.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 5.5.1.2 Militärische verschleißfeste Bauteile

Im militärischen Bereich erfordert die Ausrüstung eine hohe Verschleißfestigkeit und Zuverlässigkeit, und Wolframdisulfid spielt eine wichtige Rolle in verschleißfesten Komponenten für das Militär.

#### 5.5.1.2.1 Bewaffnung

Waffen müssen komplexen Betriebsbedingungen und -umgebungen standhalten, die eine hohe Verschleiß- und Korrosionsbeständigkeit erfordern. Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) dient als Beschichtungsmaterial für Waffenkomponenten und erhöht deren Haltbarkeit und Korrosionsbeständigkeit. Zum Beispiel in Schusswaffenläufen, Artilleriegranatwerfern und Panzerketten reduzieren  $WS_2$ -Beschichtungen die Reibung und den Verschleiß, verlängern die Lebensdauer und verbessern die Leistung. Seine hervorragenden Schmiereigenschaften reduzieren auch die Betätigungskräfte, was die Schussgenauigkeit und Zuverlässigkeit erhöht.

#### 5.5.1.2.2 Gepanzerte Fahrzeuge

Gepanzerte Fahrzeuge erfordern robusten Schutz und Mobilität auf dem Schlachtfeld und verlangen von den Komponenten eine hohe Verschleiß- und Schlagfestigkeit. Wolframdisulfid kann auf Motoren, Getriebesysteme und Aufhängungssysteme von gepanzerten Fahrzeugen aufgetragen werden, um die Verschleiß- und Schlagfestigkeit zu verbessern. In Motorkolben, Getriebegetrieben und Fahrwerksdämpfern reduzieren  $WS_2$ -Schmierstoffe oder -Beschichtungen beispielsweise Reibung und Verschleiß und erhöhen so die Lebensdauer und Zuverlässigkeit der Komponenten. Seine Stabilität bei hohen Temperaturen und Drücken erfüllt die hohen Anforderungen von gepanzerten Fahrzeugen unter komplexen Gefechtsfeldbedingungen.

### 5.5.1.3 Satelliten-Mechanismen

Satellitenmechanismen müssen über längere Zeiträume hinweg zuverlässig im Weltraum funktionieren, was hohe Anforderungen an die Materialeistung und Zuverlässigkeit stellt, wo Wolframdisulfid bedeutende Anwendungen findet.

#### 5.5.1.3.1 Antriebe für Solarmodule

Satelliten-Solarmodule erfordern eine flexible Rotation im Weltraum, um die Gewinnung von Sonnenenergie zu maximieren, was hohe Anforderungen an die Schmierleistung der Antriebsmechanismen stellt. Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) als Schmiermittel für Antriebssysteme von Solarmodulen sorgt für eine hervorragende Schmierung in der Weltraumumgebung. Der niedrige Reibungskoeffizient und die hohe Verschleißfestigkeit ermöglichen eine reibungslose Drehung der Paneele und verbessern die Effizienz der Solarenergiegewinnung. Darüber hinaus gewährleisten die Strahlungsbeständigkeit und die chemische Stabilität von  $WS_2$  einen langfristig stabilen Betrieb

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

unter rauen Weltraumbedingungen und unterstützen die Satellitenfunktionalität.

### 5.5.1.3.2 Positionierung der Antenne

Satellitenantennen müssen Ziele präzise positionieren und verfolgen, was von den Positionierungsmechanismen eine hohe Genauigkeit und Zuverlässigkeit erfordert. Wolframdisulfid verbessert die Genauigkeit und Zuverlässigkeit von Satellitenantennen-Positionierungssystemen. Die hervorragende Schmierung und der niedrige Reibungskoeffizient reduzieren die Reibung und den Verschleiß der Positioniermechanismen und verbessern die Präzision und Stabilität. Darüber hinaus sorgt die Vibrations- und Ermüdungsbeständigkeit von  $WS_2$  für eine gleichbleibende Leistung während des Starts und Betriebs des Satelliten und gewährleistet eine ordnungsgemäße Funktion der Antenne.

## 5.5.2 Nanotechnologie

Die Nanotechnologie ist eine Grenze in der modernen Wissenschaft und Technologie, und Wolframdisulfid hat breite Anwendungen in diesem Bereich, einschließlich chemischer Sensoren, Bioimaging-Sonden und Wirkstoffträger.

### 5.5.2.1 Chemische Sensoren

Chemische Sensoren detektieren und identifizieren chemische Substanzen, und Wolframdisulfid bietet in diesem Bereich einzigartige Leistungsvorteile.

#### 5.5.2.1.1 Gaswarngeräte

Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) weist hervorragende Adsorptions- und Sensorfähigkeiten für bestimmte Gase auf und eignet sich daher für die Gasdetektion. Seine Schichtstruktur und seine oberflächenaktiven Zentren interagieren mit Gasmolekülen und verändern deren elektrische Eigenschaften. Durch die Detektion dieser Veränderungen wird eine Gasidentifikation und -detektion erreicht.  $WS_2$  zeigt beispielsweise eine hohe Empfindlichkeit und Selektivität gegenüber Gasen wie Wasserstoff, Kohlenmonoxid und Stickstoffdioxid und weist deren Vorhandensein in niedrigen Konzentrationen nach. Oberflächenmodifikation und Dotierung (z. B. mit Metallionen oder nichtmetallischen Elementen) können die Leistung weiter verbessern, indem sie die elektronische Oberflächenstruktur von  $WS_2$  verändern, die Wechselwirkungen mit den Zielgasmolekülen verstärken und die Empfindlichkeit und Genauigkeit verbessern. In praktischen Anwendungen werden  $WS_2$ -basierte Gassensoren in der industriellen Abgasüberwachung, der Bewertung der Luftqualität und der Grubengaserkennung eingesetzt, um gefährliche Gaslecks umgehend zu identifizieren, um die Produktionssicherheit und die Umweltgesundheit zu gewährleisten.

#### 5.5.2.1.2 Umweltüberwachung

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Neben der Gasdetektion ist Wolframdisulfid aufgrund seiner Adsorptions- und Sensoreigenschaften für Schwermetallionen und organische Schadstoffe auch in anderen Anwendungen der Umweltüberwachung wertvoll. Bei der Überwachung der Wasserqualität bilden die aktiven Oberflächenzentren von  $WS_2$  Komplexe mit Schwermetallionen (z. B. Blei, Quecksilber), wodurch sich seine elektrischen oder optischen Eigenschaften für eine hochempfindliche Detektion verändern. Für organische Schadstoffe wie polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe und Pestizidrückstände nutzt  $WS_2$  seine Zwischenschichtstruktur und Oberflächeneigenschaften für die Adsorption, gepaart mit spezifischen Erkennungsmolekülen, um hochselektive chemische Sensoren herzustellen. Diese  $WS_2$ -basierte Technologie ermöglicht eine schnelle und genaue Erkennung von Umweltschadstoffen und bietet eine robuste Datenunterstützung für den Umweltschutz und das ökologische Management.

### 5.5.2.2 Bioimaging-Sonden

In der Biomedizin ist die Biobildgebung für die Diagnose von Krankheiten und die Entwicklung von Medikamenten von entscheidender Bedeutung, und Wolframdisulfid bietet als Bioimaging-Sonde deutliche Vorteile.

#### 5.5.2.2.1 Fluoreszierende Markierung

Wolframdisulfid zeigt unter bestimmten Bedingungen eine Fluoreszenz und dient als Fluoreszenzmarker für die Biobildgebung. Die Oberflächenmodifikation mit biologisch spezifischen Molekülen (z. B. Antikörpern, Aptameren) ermöglicht es  $WS_2$ , selektiv an Zielbiomoleküle oder -zellen zu binden. Wenn  $WS_2$  durch bestimmte Wellenlängen angeregt wird, emittiert es Fluoreszenz, die die Visualisierung und Verfolgung dieser Ziele ermöglicht. Im Vergleich zu herkömmlichen Fluoreszenzmarkern bietet  $WS_2$  eine überlegene Photostabilität und eine geringere Biotoxizität, wodurch stabile Fluoreszenzsignale über längere Bildgebungszeiträume mit minimaler Schädigung biologischer Proben aufrechterhalten werden, was ein zuverlässiges Werkzeug für die Untersuchung molekularer Mechanismen und zellulärer Aktivitäten *in vivo* darstellt.

#### 5.5.2.2.2 Zelluläre Bildgebung

Die Nutzung der Fluoreszenz- und Nanokompatibilität von  $WS_2$  mit biologischen Zellen ermöglicht eine hochauflösende zelluläre Bildgebung. Die Einführung von  $WS_2$ -Nanopartikeln in Zellen ermöglicht eine klare Beobachtung von Organellenstrukturen, Zytoskelettverteilungen und intrazellulärem molekularem Transport mittels Fluoreszenz- oder Konfokalmikroskopie. Die Kontrolle der Oberflächenladung und der funktionellen Gruppen von  $WS_2$  reguliert seine intrazellulären Verteilungs- und Aufnahmewege und erleichtert so tiefere Untersuchungen zellulärer physiologischer und pathologischer Prozesse. Diese  $WS_2$ -basierte zelluläre Bildgebungstechnologie bietet neue Ansätze für die zellbiologische Forschung und die Früherkennung von Krankheiten und treibt die biomedizinische Entwicklung voran.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 5.5.2.3 Träger von Arzneimitteln

Arzneimittelverabreichungssysteme zielen darauf ab, Medikamente genau und effizient an die Zielorte zu bringen, die Wirksamkeit zu verbessern und gleichzeitig Nebenwirkungen zu reduzieren, und Wolframdisulfid zeichnet sich als Wirkstoffträger aus.

#### 5.5.2.3.1 Gezielte Verabreichung von Arzneimitteln

Die Schichtstruktur von Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) kann verschiedene Wirkstoffmoleküle beladen, und die Oberflächenfunktionalisierung mit Zielmolekülen ermöglicht eine gezielte Wirkstoffabgabe. In der Krebstherapie erkennen modifizierte  $WS_2$ -Träger spezifisch Oberflächenmarker von Tumorzellen und dringen über Rezeptor-vermittelte Endozytose in Zellen ein, um Krebsmedikamente präzise freizusetzen, die Wirkstoffkonzentration im Tumorgewebe zu erhöhen, die Wirksamkeit zu verbessern und die Schädigung von gesundem Gewebe zu minimieren. Diese gezielte Verabreichungstechnologie bietet neue Hoffnung für eine präzise Behandlung von Krankheiten wie Krebs.

#### 5.5.2.3.2 Design der Nanomedizin

Die einzigartige Nanostruktur und die physikalisch-chemischen Eigenschaften von Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) machen es zu einem idealen Material für das Design von Nanomedizin. Seine große spezifische Oberfläche ermöglicht eine hohe Wirkstoffbeladung, während die Steuerung der Größe, Form und Oberflächeneigenschaften von  $WS_2$  die Freisetzungsraten und -muster des Wirkstoffs präzise steuert. So können beispielsweise hohle  $WS_2$ -Nanopartikel erhebliche Wirkstoffmengen einkapseln, wobei die Oberflächenmodifikation mit responsiven Materialien eine kontrollierte Freisetzung unter bestimmten physiologischen Bedingungen ermöglicht. Dieses  $WS_2$ -basierte Nanomedizin-Design bietet breite Perspektiven und technische Unterstützung für die Entwicklung effizienter, sicherer neuartiger Arzneimittelformulierungen.

### 5.5.3 Forschung auf dem Gebiet der Supraleitung und topologischer Materialien

Supraleitung und topologische Materialien sind heiße Themen in der Physik der kondensierten Materie, und Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) zeigt potenziellen Forschungswert und Anwendungsaussichten in diesen Bereichen.

#### 5.5.3.1 Supraleitende Sprungtemperatur

Supraleitende Materialien weisen bei bestimmten Temperaturen einen Nullwiderstand auf und bieten ein immenses Potenzial für verlustfreie Energieübertragung und Anwendungen mit starken Magnetfeldern, wobei die supraleitende Übergangstemperatur eine wichtige Leistungskennzahl ist. Die Forschung von Wolframdisulfid auf diesem Gebiet ist von großer Bedeutung.

#### 5.5.3.1.1 Prüfung der Supraleitung bei niedrigen Temperaturen

##### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Studien zeigen, dass Wolframdisulfid bei extrem tiefen Temperaturen supraleitende Eigenschaften aufweist. Die Forscher führen Supraleitungstests bei niedrigen Temperaturen an WS<sub>2</sub>-Proben durch, die mit verschiedenen Methoden hergestellt wurden, und messen dabei kritische Parameter wie die supraleitende Sprungtemperatur und den Energiespalt genau. Bei der Verwendung von Messtechniken für den elektrischen Transport in Umgebungen mit extrem niedrigen Temperaturen wird beispielsweise die Widerstandsvariation von WS<sub>2</sub> mit der Temperatur beobachtet, um seine Übergangstemperatur zu bestimmen. Die Forschung zeigt, dass die Dotierung mit Elementen (z. B. kleine Mengen von Übergangsmetallatomen) oder das Ausüben von äußerem Druck die Übergangstemperatur beeinflussen kann, was Richtungen für die Erforschung neuer Tieftemperatur-Supraleiter bietet.

### 5.5.3.1.2 Hochtemperatur-Supraleitungspotential

Obwohl die supraleitende Sprungtemperatur von WS<sub>2</sub> unter normalen Bedingungen im Tieftemperaturbereich bleibt, spekulieren die Forscher, dass eine tiefe Modulation seiner Kristallstruktur und seiner elektronischen Zustände diese Temperatur in Richtung Hochtemperatur-Supraleitung anheben könnte. Theoretische Berechnungen deuten darauf hin, dass eine Änderung der Kopplungsstärke zwischen den Schichten von WS<sub>2</sub> oder das Einbringen spezifischer Defekte oder Verunreinigungen seine elektronische Struktur optimieren, die Elektronenwechselwirkungen verstärken und möglicherweise die Sprungtemperatur erhöhen könnte. Das Erreichen von Supraleitung bei höheren Temperaturen würde die praktischen Anwendungen von WS<sub>2</sub> in den Bereichen Energieübertragung und supraleitende Magnete erheblich erweitern und einen tiefgreifenden wissenschaftlichen und anwendungsbezogenen Wert haben.

### 5.5.3.2 Topologisches Isolatorpotential

Topologische Isolatoren sind Materialien mit einzigartigen elektronischen Zuständen mit topologisch geschützten leitfähigen Oberflächen und isolierendem Inneren, und Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) zeigt Potenzial in diesem Forschungsbereich.

#### 5.5.3.2.1 Quantencomputing

Im Quantencomputing könnte der topologische Schutz topologischer Isolatoren eine stabile Qubit-Konstruktion ermöglichen. Die einzigartige elektronische Struktur von WS<sub>2</sub> deutet auf potenzielle topologische Isolatoreigenschaften hin, und eine präzise Quantenmodulation und Bauelementherstellung könnte seinen Einsatz bei der Qubit-Entwicklung untersuchen. So könnte beispielsweise die Nutzung der topologisch geschützten Oberflächenzustände von WS<sub>2</sub> zur Manipulation des Elektronenspins und anderer Quantenzustände die Speicherung und Berechnung von Qubits ermöglichen. Diese WS<sub>2</sub>-basierte Quantencomputing-Forschung bietet neue Lösungen für die Umweltsicherheit von Qubits und bringt die Quantencomputertechnologie möglicherweise voran.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 5.5.3.2.2 Spintronik

Die Spintronik nutzt den Elektronenspin zur Informationsspeicherung und -verarbeitung, und die topologischen und spinbezogenen Eigenschaften von  $WS_2$  haben Potenzial in diesem Bereich. Seine möglichen topologisch geschützten Oberflächenzustände ermöglichen es, dass die Elektronenspins während der Oberflächenübertragung über längere Zeiträume kohärent bleiben, wodurch der Informationsverlust durch Spinrelaxation reduziert wird. Durch die Entwicklung von  $WS_2$ -basierten spintronischen Bauelementen, wie z. B. Spinfiltern und Transistoren, könnte eine effiziente Übertragung und Verarbeitung von Spin-Informationen erreicht werden. Diese  $WS_2$ -basierte Spintronikforschung liefert neue Materialgrundlagen und Erkenntnisse für die Entwicklung von hochleistungsfähigen spintronischen Bauelementen und bringt die Informationstechnologie voran.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT



CTIA GROUP LTD Wolframdisulfid

## Kapitel 6: Anwendungsaussichten von Wolframdisulfid

Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) weist mit seiner außergewöhnlichen Schmierleistung (Reibungskoeffizient 0,03-0,05, siehe 5.1), seinen Halbleitereigenschaften (Bandlücke 1,3-2,5 eV, siehe 2.3.2.1), seiner katalytischen Aktivität (HER-Überpotential 80-150 mV, siehe 5.2.2.2) und seiner nanoskaligen Struktur (Einzelschichtdicke 0,62 nm, siehe 3.1.2.1) enorme Anwendungsmöglichkeiten auf dem Weltmarkt auf. WS<sub>2</sub> (Wolframdisulfid) nimmt nicht nur in traditionellen Industriebereichen (z. B. Schmierung, Petrochemie) eine bedeutende Position ein, sondern entwickelt sich auch schnell in neuen Bereichen (z. B. Elektronik, grüne Energie). Da die weltweite Nachfrage nach Hochleistungsmaterialien und eine nachhaltige Entwicklung steigt, wird erwartet, dass das Marktpotenzial von WS<sub>2</sub> in den nächsten zehn Jahren erheblich wachsen wird. In diesem Kapitel wird die globale Marktnachfrage nach WS<sub>2</sub> analysiert, die Aussichten in aufstrebenden Bereichen wie grüne Energie und intelligente Materialien prognostiziert und die Entwicklungspfade und Herausforderungen durch die Integration von Marktdaten, technologischen Trends und politischen Treibern untersucht.

### 6.1 Überblick über die globale Marktnachfrage

Die weltweite Marktnachfrage nach Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) wird durch die Industrialisierung, Fortschritte in der Elektronik und die Umweltpolitik vorangetrieben, wobei die Marktgröße bis 2030 voraussichtlich von derzeit 500 Mio. USD auf 1-1,5 Mrd. USD steigen wird (Wolfram-Marktdaten, jährliche Wachstumsrate 8-12%). Die Nachfrage verteilt sich hauptsächlich auf Schmierung, Elektronik, Energie und Katalyse, wobei Schmierung und Elektronik dominieren. Dieser Abschnitt bietet eine detaillierte Analyse des Marktanteils und der Wachstumstrends von WS<sub>2</sub> in den

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Bereichen Schmierung und Elektronik und hebt die treibenden Faktoren und das zukünftige Potenzial hervor.

### 6.1.1 Marktanteil der Schmierung

Die Anwendungen von WS<sub>2</sub> auf dem Schmiermittelmarkt machen 60-70 % der weltweiten Nachfrage aus (ca. 80.000-100.000 Tonnen/Jahr, siehe 5.1), was vor allem auf den niedrigen Reibungskoeffizienten (0,03-0,05, ASTM D1894), die hohe thermische Stabilität (650 °C, siehe 2.1.3.2) und die Druckfestigkeit (2-5 GPa, siehe 5.1.1.3) zurückzuführen ist. Der Schmierstoffmarkt ist in zwei Hauptsegmente unterteilt – Industrieschmierung und Automobilindustrie –, die jeweils das Nachfragewachstum vorantreiben.

#### 6.1.1.1 Bedarf an industrieller Schmierung

Die Nachfrage nach industrieller Schmierung stammt hauptsächlich aus Schwermaschinen, Luft- und Raumfahrt und Hochtemperaturgeräten mit einem jährlichen Verbrauch von etwa 50.000 bis 60.000 Tonnen, was 60 % des Schmiermittelmarktes ausmacht ([Wolfram-Marktdaten](#)). Das mikrometergroße Pulver (5-20 µm, siehe 3.1.1.1) und die Beschichtungen von WS<sub>2</sub> (0,5-10 µm dick, siehe 5.1.2) eignen sich hervorragend für Hochtemperaturumgebungen (500-650 °C) und Hochdruck (2-4 GPa) und halten einen stabilen Reibungskoeffizienten von 0,05 (ASTM G99) und eine Verschleißrate von nur 0,01 mm<sup>3</sup>/N·m (Vier-Kugel-Test) aufrecht. Im Vergleich zu herkömmlichen Schmierstoffen (z. B. Graphit, Reibungskoeffizient 0,1-0,2) verlängert WS<sub>2</sub> die Lebensdauer um 50 % (1000-2000 Stunden).

In Walzen und Glasformungsmaschinen von Stahlwerköfen haben WS<sub>2</sub>-Festschmierstoffe (98-99 % Reinheit, ICP-OES) einen jährlichen Bedarf von etwa 30.000 Tonnen ([Wolframtechnologie](#)), wodurch die Ausfallzeiten der Anlage um 20 % (Betriebstest) und die Wartungskosten um 15 % (ca. 5000 RMB/Einheit) reduziert werden. Die globale Industrialisierung, insbesondere in Asien und Afrika, führt zu einem jährlichen Nachfrageanstieg von 5-7 %, der bis 2030 voraussichtlich 70.000 Tonnen erreichen wird. Umweltvorschriften, die einen reduzierten Einsatz von Flüssigschmierstoffen vorschreiben, erhöhen den Marktanteil von WS<sub>2</sub> weiter.

WS<sub>2</sub> in Industriequalität, das von CTIA GROUP LTD (Jahresproduktion 50.000 Tonnen) hergestellt wird, hält einen weltweiten Anteil von 30 %, wobei seine niedrigen Kosten die Marktexpansion unterstützen. Bei Wolframprodukten wird erwartet, dass WS<sub>2</sub>-Beschichtungen in Schwermaschinen aufgrund ihrer Stabilität unter extremen Bedingungen (600 °C, 3 GPa) jährlich um 10 % wachsen werden.

#### 6.1.1.2 Wachstum der Automobilindustrie

Auf die Automobilindustrie entfallen 30-40 % des WS<sub>2</sub>-Schmierbedarfs (ca. 30.000-40.000 Tonnen/Jahr), hauptsächlich in Fetten (siehe 5.1.3.1), Lagern und Getriebebeschichtungen (siehe 5.1.2.1). Ultrafeines WS<sub>2</sub>-Pulver (0,5-1 µm, siehe 3.1.1.2), das in ein Fett (5-10 Gew.-%) gemischt

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

wird, reduziert den Reibungskoeffizienten auf 0,04 (ASTM D1894) und erhöht die Tragfähigkeit um 30 % (2 GPa, Vier-Kugel-Test). In Motorkolbenringen und Getrieben senken WS<sub>2</sub>-Beschichtungen (5-10 µm Dicke) den Kraftstoffverbrauch um 5 % (Betriebstest) und verlängern die Lebensdauer um 40 % (1500 Stunden).

Die weltweite Fahrzeugproduktion (ca. 90 Millionen Einheiten im Jahr 2023, [Wolframmarkt](#)) und der Anstieg von Elektrofahrzeugen (15 % jährliches Wachstum) treiben die Nachfrage an. Batteriekühlsysteme und Motorlager von Elektrofahrzeugen erfordern Hochtemperaturschmierstoffe, und die thermische Stabilität von WS<sub>2</sub> (650 °C) macht es zur ersten Wahl. Die Nachfrage wird bis 2030 voraussichtlich 50.000 Tonnen erreichen, mit einer jährlichen Wachstumsrate von 8-10 %. In China erhöhen neue Richtlinien für energiebetriebene Fahrzeuge die WS<sub>2</sub>-Nutzung, wobei [CTIA GROUP LTD](#) jährlich etwa 2000 Tonnen liefert und einen Inlandsanteil von 40 % hält.

In [der Wolframtechnologie](#) wächst das WS<sub>2</sub>-Fett in Getrieben von Elektrofahrzeugen jährlich um 12 %, wodurch der Geräuschpegel um 5 dB reduziert und der Wirkungsgrad um 10 % gesteigert wird (Leistungstest). Der Trend zum Leichtbau in der Automobilindustrie erweitert das Marktpotenzial von WS<sub>2</sub> weiter.

## 6.1.2 Wachstum des Elektroniksektors

Die Nachfrage von WS<sub>2</sub> im Elektroniksektor macht 15-20 % des Weltmarktes aus (etwa 20.000-30.000 Tonnen/Jahr, siehe 5.3), hauptsächlich bei Halbleiterbauelementen (FETs, Photodetektoren) und flexibler Elektronik. Die direkte Single-Layer-Bandlücke (2.1 eV, siehe 3.1.5.2) und die hohe Mobilität (50-100 cm<sup>2</sup>/V·s, siehe 5.3.1.1) unterstützen Hochleistungsanwendungen mit geringem Stromverbrauch, wobei die Marktgröße bis 2030 voraussichtlich auf 50.000 Tonnen anwachsen wird (jährliche Wachstumsrate 10-15%).

### 6.1.2.1 Halbleitermarkt

Die WS<sub>2</sub>-Nachfrage auf dem Halbleitermarkt stammt hauptsächlich von Feldeffekttransistoren (FETs) und Photodetektoren mit einem jährlichen Verbrauch von etwa 1000-1500 Tonnen (Wolframmarkt). WS<sub>2</sub>-Single-Layer-FETs erreichen ein Schaltverhältnis von 10<sup>6</sup> (elektrischer Test, siehe 5.3.1.1.1) und einen Subthreshold Swing (SS) von 60 mV/dec und nähern sich damit der Siliziumgrenze (55 mV/dec). Seine ultradünne Beschaffenheit (0,62 nm) unterstützt die Miniaturisierung von Chips, und seine Empfindlichkeit (10<sup>3</sup>-10<sup>4</sup> A/W, siehe 5.3.1.2) eignet sich für Infrarot- und sichtbare Lichtsensoren.

Der globale Halbleitermarkt (ca. 600 Mrd. USD im Jahr 2023, jährliches Wachstum von 6-8 %) treibt die WS<sub>2</sub>-Nachfrage an. 5G- und KI-Chips erfordern Hochfrequenzbauelemente (>1 GHz), und die hohe Mobilität und Leitfähigkeit von WS<sub>2</sub> (Widerstand 10<sup>-3</sup> Ω·cm, siehe 5.3.1.3.2) erfüllen diese Anforderungen. In der Wolframforschung haben WS<sub>2</sub>-FETs für Hochleistungs-Servertchips einen jährlichen Bedarf von etwa 50 kg, der bis 2030 auf 200 kg steigen soll (15 % jährliches Wachstum).

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

CTIA GROUP LTD liefert hochreines WS<sub>2</sub> (99,99%, ICP-MS) mit einer Jahresproduktion von rund 100 Tonnen.

In der Wolframtechnologie wachsen WS<sub>2</sub>-Photodetektoren auf dem Markt für Infrarotsensoren jährlich um 12 %, wobei die Detektivität ( $10^{11}$ - $10^{12}$  Jones) die Entwicklung der Nachtsicht unterstützt. Der Miniaturisierungstrend der Halbleiterindustrie (z. B. 3-nm-Prozesse) wird die WS<sub>2</sub>-Nachfrage bis 2030 auf 3000 Tonnen ansteigen lassen.

#### **6.1.2.2 Aufstrebende elektronische Produkte**

Die WS<sub>2</sub>-Nachfrage nach aufstrebenden elektronischen Produkten (z. B. flexible Displays, Wearables) macht 30-40 % des Elektronikmarktes aus (ca. 500-1000 Tonnen/Jahr). Seine Flexibilität (Krümmungsradius <1 mm, siehe 5.3.1.3) und seine hohe Durchlässigkeit (>90 %, 550 nm, siehe 5.3.1.3.2) unterstützen die Entwicklung von OLED und Smart-Armbändern. Nach 2000 Biegungen (Krümmungsradius 2 mm) beträgt die Widerstandsänderung <3 % (Widerstandstest) und übertrifft damit ITO (>10 %).

Der globale Markt für flexible Elektronik (ca. 30 Mrd. USD im Jahr 2023, 10-12 % jährliches Wachstum) treibt die WS<sub>2</sub>-Nachfrage an. Tragbare Geräte (500 Millionen verkaufte Einheiten pro Jahr) erfordern Materialien mit geringem Stromverbrauch, und der statische Stromverbrauch von WS<sub>2</sub> (10 nW, siehe 5.3.1.1.2) verlängert die Batterielebensdauer um 20 % (Betriebstest). Bei Wolframprodukten beträgt die Nutzung flexibler WS<sub>2</sub>-Displays etwa 200 kg pro Jahr und wird bis 2030 voraussichtlich 1000 kg erreichen (jährliches Wachstum von 15 %).

In der Wolframtechnologie haben WS<sub>2</sub> Wearable Sensoren (z.B. Pulsmesser) einen jährlichen Bedarf von ca. 100 kg, was den Komfort um 10% erhöht (User-Test). Die Verbreitung von Smart Homes und IoT wird die WS<sub>2</sub>-Nachfrage weiter erhöhen, die bis 2030 auf 2000 Tonnen prognostiziert wird.

#### **COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT**



CTIA GROUP LTD Wolframdisulfid

## 6.2 Ausblick auf neu entstehende Anwendungsfelder

Wolframdisulfid ( $WS_2$ ) hat in traditionellen Bereichen (z. B. Schmierung, Elektronik) eine solide Grundlage geschaffen, wobei sein Potenzial in aufstrebenden Bereichen immer deutlicher wird. Die Multifunktionalität von  $WS_2$  ([Wolframdisulfid](#)) – einschließlich der hohen katalytischen Aktivität (HER-Überpotential 80-150 mV, siehe 5.2.2.2), der hervorragenden optoelektronischen Eigenschaften (Empfindlichkeit  $10^3$ - $10^4$  A/W, siehe 5.3.1.2), der Flexibilität (Krümmungsradius  $<1$  mm, siehe 5.3.1.3) und der thermischen Stabilität ( $650$  °C, siehe 2.1.3.2) – positioniert es als idealen Kandidaten für grüne Energie und intelligente Materialien. Da die weltweite Nachfrage nach Nachhaltigkeit und intelligenten Technologien steigt, wird erwartet, dass sich die Anwendungsaussichten von  $WS_2$  in den nächsten 10 bis 15 Jahren erheblich erweitern werden. Dieser Abschnitt bietet einen detaillierten Ausblick auf die aufkommenden Anwendungen von  $WS_2$  in den Bereichen grüne Energie und intelligente Materialien und analysiert die technischen Vorteile, das Marktpotenzial und die Entwicklungsherausforderungen.

### 6.2.1 Grüne Energie

Die Anwendungen von  $WS_2$  im Bereich der grünen Energie konzentrieren sich auf Anlagen für erneuerbare Energien und die Unterstützung der Ziele der Klimaneutralität, indem sie die effiziente katalytische Leistung und hohe Stabilität nutzen, um die Energiewende zu unterstützen.

#### 6.2.1.1 Anlagen für erneuerbare Energien

Der Einsatz von  $WS_2$  in Anlagen für erneuerbare Energien (z. B. Solarzellen, Wasserstoffproduktionssysteme) profitiert von seinen optoelektronischen katalytischen

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Eigenschaften (Bandlücke 1,3-2,5 eV, siehe 2.3.2.1) und seiner hohen spezifischen Oberfläche (bis zu 500 m<sup>2</sup>/g, siehe 3.1.6.1). Seine nanoskalige Struktur (Einzelschichtdicke 0,62 nm, siehe 3.1.2.1) erhöht die Effizienz der Energieumwandlung.

#### 6.2.1.1.1 Farbstoffsensibilisierte Solarzellen

WS<sub>2</sub>-Nanoblätter (5-20 nm, siehe 3.1.5) dienen als Sensibilisatoren oder Gegenelektrodenmaterialien in farbstoffsensibilisierten Solarzellen (DSSCs) und erreichen einen photoelektrischen Umwandlungswirkungsgrad (PCE) von 10-12 % (J-V-Test), der 20 % höher ist als bei herkömmlichem TiO<sub>2</sub> (8-9 %). Seine direkte Bandlücke (2,1 eV, einlagig) erhöht die Absorption des sichtbaren Lichts (>90%, UV-Vis) mit einer Trägerlebensdauer von 100 ns (zeitaufgelöste PL). Die TEM-Analyse zeigt, dass WS<sub>2</sub> eine gleichmäßige Schicht (0,1-0,2 µm dick) auf den Elektrodenoberflächen bildet, wodurch die Ladungsrekombination reduziert wird.

In [der Wolframtechnologie](#) zeigen Labortests von WS<sub>2</sub> DSSCs einen Wirkungsgradabfall von <5 % nach 1000 Stunden Beleuchtung und übertreffen damit Pt-Elektroden (10 %). Der globale Solarmarkt (ca. 200 Mrd. USD im Jahr 2023, 10 % jährliches Wachstum) treibt die WS<sub>2</sub>-Nachfrage an, die bis 2030 voraussichtlich 500 Tonnen pro Jahr erreichen wird (Wolframmarkt). In der Wolframforschung beträgt die Produktion von WS<sub>2</sub>-Nanoblättern etwa 50 kg pro Jahr für Studien zu erneuerbaren Energien.

#### 6.2.1.1.2 Wasserstoff-Energieanlagen

WS<sub>2</sub> wirkt als Katalysator für die Wasserstoffentwicklungsreaktion (HER) in Wasserelektrolyseanlagen mit einem Überpotential von nur 80-100 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>, siehe 5.2.2.2.1) und nahezu Pt (50 mV). Seine aktiven Kantenstellen (30-40 %, STM) erhöhen die Stromdichte auf 50 mA/cm<sup>2</sup> (elektrochemischer Test). In 0,5 M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> erreichen WS<sub>2</sub>-Quantenpunkte (2-5 nm, siehe 3.1.6) eine Wasserstoffproduktionsrate von 250 µmol/g·h (500 mA/cm<sup>2</sup>) mit einer Stabilität von bis zu 2000 Stunden (Zerfall <3%).

Der globale Wasserstoffenergiemarkt (prognostiziert auf 500 Mrd. USD bis 2030, ein jährliches Wachstum von 15 %) kurbelt die WS<sub>2</sub>-Nachfrage an. Bei [Wolframprodukten](#) liegt der WS<sub>2</sub>-Verbrauch in Wasserstoffanlagen bei etwa 300 kg pro Jahr und wird voraussichtlich bis 2030 auf 1000 Tonnen steigen. Die Politik für grünen Wasserstoff wird die Marktgröße weiter vergrößern, möglicherweise mit einer jährlichen Wachstumsrate von 20 %.

#### 6.2.1.2 Ziele der Klimaneutralität

WS<sub>2</sub> trägt zur Klimaneutralität bei, indem es die CO<sub>2</sub>-Reduzierung katalysiert und die Energieeffizienz verbessert, wobei seine hochaktive Oberfläche (40 % Randstellen, siehe 5.2.3.1.1) kohlenstoffarme Technologien unterstützt.

#### 6.2.1.2.1 Elektrokatalytische CO<sub>2</sub>-Reduktion

##### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

WS<sub>2</sub>-Nanodrähte (20-50 nm, siehe 3.1.5) wandeln CO<sub>2</sub> in elektrokatalytischer Reduktion in Methan (CH<sub>4</sub>) um und erreichen dabei einen Faraday-Wirkungsgrad (FE) von 85 % (-0,8 V vs. RHE, elektrochemischer Test), der 21 % höher ist als bei Cu-Katalysatoren (70 %). Seine Bandlücke (2,5 eV) verbessert den Elektronentransfer und ergibt 150 µmol/g·h (Gaschromatographie). Die XPS-Analyse zeigt, dass der W 4f-Peak von WS<sub>2</sub> (32,8 eV) nach der Reaktion unverändert bleibt, was die Korrosionsbeständigkeit beweist.

In [der Wolframforschung](#) haben WS<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>-Reduktionskatalysatoren einen jährlichen Verbrauch von etwa 50 kg, der bis 2030 auf 200 kg ansteigen soll (jährliches Wachstum von 15 %). Globale Ziele zur Klimaneutralität (z. B. Chinas Ziel für 2060) werden die Nachfrage ankurbeln, möglicherweise mit einer jährlichen Wachstumsrate von 20 %.

#### 6.2.1.2.2 Effiziente Energieumwandlung

WS<sub>2</sub> in Brennstoffzellenelektroden erhöht den Wirkungsgrad der Sauerstoffreduktionsreaktion (ORR) mit einem Überpotenzial von 300 mV (10 mA/cm<sup>2</sup>, siehe 5.4.2.2.2), das 25 % niedriger ist als bei herkömmlichen kohlenstoffbasierten Materialien (400 mV). Seine hohe Leitfähigkeit (10<sup>3</sup> S/cm, siehe 3.2.1.2) unterstützt eine Stromdichte von 100 mA/cm<sup>2</sup>. In der [Wolframtechnologie](#) beträgt der WS<sub>2</sub>-Elektrodenverbrauch für Wasserstoff-Brennstoffzellen etwa 100 kg pro Jahr, was den Wirkungsgrad um 10 % verbessert (Leistungstest).

Der Bedarf an kohlenstoffneutraler Energieumwandlung (prognostiziert auf 1 Billion USD bis 2030) wird den WS<sub>2</sub>-Verbrauch auf 500 Tonnen pro Jahr erhöhen ([Wolframmarkt](#)). Die WS<sub>2</sub>-Produktion von [CTIA GROUP LTD](#) (99,9 % Reinheit) unterstützt diesen Trend mit einer Jahresproduktion von etwa 200 Tonnen.

### 6.2.2 Intelligente Materialien

Die Anwendungen von WS<sub>2</sub> im Bereich intelligenter Materialien nutzen seine Flexibilität (Krümmungsradius <1 mm, siehe 5.3.1.3), seine Anpassungsfähigkeit und seine hohe Leitfähigkeit, die für adaptive Materialien und intelligente Fertigung geeignet sind.

#### 6.2.2.1 Adaptive Materialien

Die zweidimensionale Struktur und die einstellbaren Eigenschaften von WS<sub>2</sub> machen es zur idealen Wahl für adaptive Materialien, die dynamische Reaktionen und Umweltanpassungen unterstützen.

##### 6.2.2.1.1 Intelligente Beschichtungen

WS<sub>2</sub>-Nanoblätter (5-20 nm) in Kombination mit Polymeren (z. B. [Wolfram-Kunststoff](#)) bilden intelligente Beschichtungen, die die Reibungskoeffizienten (0,04-0,06, ASTM D1894) an Temperaturänderungen (25-200 °C) anpassen. Seine Wärmeleitfähigkeit (35 W/m·K, siehe 3.2.3.1)

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

unterstützt die Wärmeableitung. Nach 1000 Zyklen (500 °C) beträgt die Verschleißrate  $<0,01 \text{ mm}^3/\text{N}\cdot\text{m}$  (Vier-Kugel-Test). In [der Wolframtechnologie](#) haben WS<sub>2</sub>-Smart-Beschichtungen für Triebwerke in der Luft- und Raumfahrt einen jährlichen Bedarf von etwa 200 kg, der bis 2030 voraussichtlich 500 kg erreichen wird (10 % jährliches Wachstum). Intelligente Gebäude und Robotik werden die Nachfrage weiter erhöhen.

#### 6.2.2.1.2 Formgedächtnis-Materialien

WS<sub>2</sub> in Kombination mit Wolframkautschuk (10 Gew.-%) erzeugt Formgedächtnismaterialien mit einer Rückgewinnungsrate von 95 % bei 50 °C (thermomechanischer Test) und einem Reibungskoeffizienten von 0,05 (ASTM G99). Seine Flexibilität (Krümmungsradius 2 mm) unterstützt mehrere Verformungen (1000 Zyklen,  $<5\%$  Leistungsabfall). Bei Wolframprodukten liegt der jährliche Verbrauch bei Medizinprodukten (z. B. Kathetern) bei etwa 100 kg, der bis 2030 voraussichtlich auf 300 kg steigen wird. Der globale Markt für intelligente Materialien (ca. 50 Mrd. USD im Jahr 2023, 12 % jährliches Wachstum) wird die WS<sub>2</sub>-Nachfrage ankurbeln, möglicherweise mit einer jährlichen Wachstumsrate von 15 %.

#### 6.2.2.2 Intelligente Fertigung

WS<sub>2</sub> verbessert die Anlagenleistung und Produktionseffizienz in der intelligenten Fertigung, da es durch seine hohe Leitfähigkeit und Verschleißfestigkeit die Automatisierung unterstützt.

##### 6.2.2.2.1 Feinmechanische Bauelemente

WS<sub>2</sub>-Beschichtungen (1-5  $\mu\text{m}$  dick, Kaltspritzen) für feinmechanische Bauteile (z. B. CNC-Maschinenspindeln) reduzieren den Reibungskoeffizienten auf 0,03 (ASTM D1894) und verbessern die Präzision um 10 % (Bearbeitungstest). Bei 500 °C erreicht die Lebensdauer 2000 Stunden (Verschleißrate  $0,005 \text{ mm}^3/\text{N}\cdot\text{m}$ ). In der [Wolframtechnologie](#) liegt der jährliche Verbrauch bei etwa 300 kg, der bis 2030 voraussichtlich auf 1000 kg steigen wird. Der globale Markt für intelligente Fertigung (prognostiziert auf 1 Billion USD bis 2030, ein jährliches Wachstum von 10 %) wird die WS<sub>2</sub>-Nachfrage ankurbeln, wahrscheinlich mit einer jährlichen Wachstumsrate von 12 %.

##### 6.2.2.2.2 3D-Druck-Materialien

WS<sub>2</sub>-Nanopulver (0,1-0,5  $\mu\text{m}$ ), gemischt mit Wolfram-Kunststoff (5-10 Gew.-%) wird für den 3D-Druck von selbstschmierenden Teilen mit einem Reibungskoeffizienten von 0,04 (ASTM G99) und einer Zugfestigkeit von 60 MPa (ASTM D638) verwendet. Bei 200 °C verlängert sich die Lebensdauer der Teile um 30 % (1000 Stunden). Bei Wolframprodukten liegt der jährliche Verbrauch bei etwa 200 kg, der bis 2030 voraussichtlich auf 500 kg steigen wird. Das schnelle Wachstum des 3D-Druckmarktes (15 % jährliches Wachstum) wird die WS<sub>2</sub>-Nachfrage auf 800 Tonnen pro Jahr ([Wolframmarkt](#)) treiben.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT



CTIA GROUP LTD Wolframdisulfid

## Kapitel 7: Umweltauswirkungen der Herstellung und Anwendung von Wolframdisulfid

Wolframdisulfid (WS<sub>2</sub>) ist ein Hochleistungswerkstoff, der unter anderem in der Schmierung (siehe 5.1), in der Katalyse (siehe 5.2), in der Elektronik (siehe 5.3) einen außergewöhnlichen Anwendungswert aufweist. Die Umweltauswirkungen der Produktions- und Anwendungsprozesse sind jedoch nicht zu übersehen und umfassen Themen wie Abgasemissionen, Abwasserverschmutzung und Abfallwirtschaft. Bei der Herstellung von WS<sub>2</sub> (Wolframdisulfid) sind Hochtemperaturreaktionen und chemische Reagenzien erforderlich, bei denen Schadstoffe wie Schwefelwasserstoff (H<sub>2</sub>S) und Schwefeldioxid (SO<sub>2</sub>) entstehen können, während die Abfallwirtschaft in ihren Anwendungen auch die ökologische Nachhaltigkeit berücksichtigt. Mit immer strengeren globalen Umweltvorschriften (z. B. EU REACH, China GB 8978-1996) ist die Bewertung und Optimierung der Umweltauswirkungen von WS<sub>2</sub> zu einem entscheidenden Thema für die Förderung seiner industriellen Entwicklung geworden. Dieses Kapitel analysiert die Umweltauswirkungen der Produktion und Anwendung von WS<sub>2</sub>, untersucht Umweltmaßnahmen und -strategien und zeigt praktische Erkenntnisse anhand von Fallstudien auf, die eine wissenschaftliche Grundlage für eine umweltfreundliche Produktion und Anwendung bieten.

### 7.1 Umweltauswirkungen der Wolframdisulfidproduktion

Bei der Herstellung von Wolframdisulfid werden verschiedene traditionelle und moderne Verfahren (z. B. Kalzinierungszersetzungsmethode 4.1.1, chemische Gasphasenabscheidungsmethode 4.2.1) mit primären Umweltauswirkungen wie Abgasemissionen, Abwasserverschmutzung und Erzeugung fester Abfälle durchgeführt. Diese Auswirkungen sind eng mit den Produktionsprozessen, der Auswahl der Rohstoffe und dem Zustand der Ausrüstung verbunden. In

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

diesem Abschnitt werden die spezifischen Umweltauswirkungen der WS<sub>2</sub>-Produktion aus der Perspektive von Abgasen, Abwasser und festen Abfällen detailliert beschrieben, wobei Daten und Fallstudien integriert werden, um potenzielle Risiken zu untersuchen.

### 7.1.1 Abgasemissionen

Abgase aus der WS<sub>2</sub>-Produktion stammen hauptsächlich aus Hochtemperaturreaktionen und Sulfidierungsprozessen, wobei häufige Schadstoffe wie Schwefelwasserstoff (H<sub>2</sub>S), Schwefeldioxid (SO<sub>2</sub>) und flüchtiger Schwefel (S) enthalten sind. Diese Emissionen stellen eine Bedrohung für die atmosphärische Qualität und die menschliche Gesundheit dar.

Bei der Kalzinierungszersetzungsmethode (siehe 4.1.1) reagiert Wolframsäure (H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) oder Wolframtrioxid (WO<sub>3</sub>) mit H<sub>2</sub>S zu WS<sub>2</sub>, begleitet von H<sub>2</sub>S- und S-Verflüchtigung. Die Reaktionsgleichung mit H<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> als Rohstoff lautet:

$$\text{H}_2\text{WO}_4 + 2\text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{WS}_2\downarrow + 2\text{H}_2\text{O}\uparrow + \text{H}_2\uparrow$$
$$\text{H}_2\text{WO}_4 + 2\text{H}_2\text{S} \rightarrow \text{WS}_2\downarrow + 2\text{H}_2\text{O}\uparrow + \text{H}_2\uparrow$$
Das Abgas enthält bei 400-600 °C H<sub>2</sub>S-Konzentrationen von 500-1000 ppm (Gaschromatographie) und liegt damit über der Norm GB 16297-1996 (<50 ppm). Unvollständige Reaktionen führen dazu, dass überschüssiges H<sub>2</sub>S (20-30 % molarer Überschuss, siehe 4.1.1.2) direkt emittiert wird, wodurch 0,5-0,6 m<sup>3</sup> H<sub>2</sub>S pro Tonne produziertem WS<sub>2</sub> freigesetzt werden (Durchflussmesser). H<sub>2</sub>S, hochgiftig (LC<sub>50</sub> ca. 700 ppm), schädigt die Atemwege und das Nervensystem erheblich.

Im Sublimationsverfahren (siehe 4.1.2) zerfällt WS<sub>3</sub> in WS<sub>2</sub> und S mit der Reaktion: WS<sub>3</sub> → WS<sub>2</sub>↓ + S↑ WS<sub>3</sub> → WS<sub>2</sub>↓ + S↑ Bei 700-900 °C und 10<sup>-2</sup>-10<sup>-3</sup> Pa betragen die Emissionen flüchtiger S (Siedepunkt 444 °C) etwa 0,2-0,3 kg pro Tonne WS<sub>2</sub> (Massenmethode). Ohne Kondensatrückgewinnung kann S-Dampf zu SO<sub>2</sub> oxidieren (Nachverbrennungskonzentration 100-200 ppm), was das Risiko des sauren Regens erhöht. Die jährlichen SO<sub>2</sub>-Emissionen von kleinen bis mittleren Produktionslinien können 50-100 Tonnen erreichen, was sich erheblich auf die Luftqualität auswirkt.

Moderne Verfahren wie die chemische Gasphasenabscheidung (CVD, siehe 4.2.1) erzeugen weniger Emissionen, erzeugen aber immer noch geringe Mengen an H<sub>2</sub>S und CO (aus der W(CO)<sub>6</sub>-Zersetzung). Jede Charge (<1 g/cm<sup>2</sup>) emittiert etwa 0,01-0,02 m<sup>3</sup> H<sub>2</sub>S (Durchflussmesser); Obwohl das Gesamtvolumen gering ist, müssen hohe lokale Emissionen beachtet werden. In der Wolframforschung können die H<sub>2</sub>S-Konzentrationen von unbehandelten CVD-Abgasen 200 ppm erreichen, was eine strenge Kontrolle erfordert.

### 7.1.2 Verschmutzung durch Abwasser

Abwässer aus der WS<sub>2</sub>-Produktion fallen hauptsächlich aus der Reinigung von Rohstoffen, Reaktionsnebenprodukten und Reinigungsprozessen an, die saure Substanzen, Schwermetallionen und organische Verbindungen enthalten und eine Bedrohung für aquatische Ökosysteme darstellen.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Bei der Kalzinierungszersetzung entstehen bei der sauren Waschreinigung (z. B. 5 % HCl, siehe 4.3.1.1) saure Abwässer (pH 1-2) mit Fe<sup>3+</sup> und Si<sup>4+</sup>. Jede Tonne WS<sub>2</sub> produziert 0,5-1 m<sup>3</sup> Abwasser (Volumenmethode) mit Fe-Konzentrationen von 0,1-0,5 g/L (ICP-MS). Eine direkte Einleitung kann zu Wassereutrophierung und Schwermetallbelastung führen. Das hydrothermale/solvothermische Verfahren (siehe 4.2.2) verwendet Natriumwolframat (Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>) und Thioharnstoff (CS(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>) mit der Reaktion: Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>+2CS(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>+2H<sub>2</sub>O→WS<sub>2</sub>↓+2NaOH+2CO<sub>2</sub>+4NH<sub>3</sub>↑  
Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub>+2CS(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>+2H<sub>2</sub>O→WS<sub>2</sub>↓+2NaOH+2CO<sub>2</sub>↑+4NH<sub>3</sub>↑

Das Abwasser enthält NH<sub>3</sub> (0,5-1 g/L) und CO<sub>2</sub> (Löslichkeit 1-2 g/L), wodurch der pH-Wert auf 10-11 ansteigt. Unbehandelte Einleitung kann zu Wasseralkalisierung und CSB-Überschreitungen führen (>50 mg/L, GB 8978-1996).

Bei der Gerätereinigung fällt Abwasser (ca. 0,2-0,5 m<sup>3</sup>/t) mit WS<sub>2</sub>-Rückständen und Spuren W<sup>6+</sup> (0,01-0,05 g/L, ICP-OES) an. Obwohl die Konzentrationen niedrig sind, kann eine langfristige Akkumulation das Grundwasser kontaminieren. Bei einer Jahresproduktion von 50.000 Tonnen erreicht das Gesamtabwasser 25.000-50.000 m<sup>3</sup>, was eine Neutralisation und Fällungsbehandlung erfordert. Wolfram-Marktdaten zeigen, dass unbehandeltes Abwasser die CSB- und Schwermetallnormen um 30-50 % überschreitet, was sich erheblich auf die Flussökosysteme auswirkt.

### 7.1.3 Feste Abfälle

Feste Abfälle aus der WS<sub>2</sub>-Produktion umfassen nicht umgesetzte Rohstoffe, Nebenprodukte und Geräterückstände, hauptsächlich Wolframverbindungen und Sulfide, mit potenzieller Toxizität und Recyclingwert.

Bei der Kalzinierungszersetzung bilden unumgesetztes Wolframpulver (W) oder WO<sub>3</sub> (<0,1 %, XPS) und FeS, SiS<sub>2</sub> (<0,5 %, ICP-OES) feste Abfälle, die 10-20 kg WS<sub>2</sub> pro Tonne erzeugen (Massenmethode). Unsachgemäße Lagerung kann in den Boden eindringen und Fe<sup>2+</sup> und S<sup>2-</sup> freisetzen (Bodentests 0,05-0,1 g/kg), was das Pflanzenwachstum beeinträchtigt. Bei CVD müssen Substratrückstände (z. B. Si/SiO<sub>2</sub>) mit WS<sub>2</sub> (<1 g/cm<sup>2</sup>) abgestreift werden, wodurch 0,5-1 kg Abfall pro Charge entstehen. Obwohl die kumulativen Mengen gering sind, müssen Spurenschwermetalle ordnungsgemäß entsorgt werden.

Zu den Risiken für feste Abfälle gehören Bodenverunreinigungen und Ressourcenverluste. Bei CTIA GROUP LTD fallen bei der Produktion von 50.000 Tonnen WS<sub>2</sub> pro Jahr 500 bis 1000 Tonnen fester Abfall an. Nicht recycelte Teile können, wenn sie deponiert werden, 50-100 kg S<sup>2-</sup> freisetzen (Auslaugungstest), was langfristige Auswirkungen auf den pH-Wert des Bodens und die mikrobiellen Gemeinschaften hat. In der Wolframtechnologie liegen die Verwertungsquoten fester Abfälle unter 50 %, während der Rest eine Behandlung gefährlicher Abfälle erfordert (GB 18597-2001), was die Kosten um etwa 20-30 RMB/kg erhöht.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

#### 7.1.4 Energieverbrauch und CO<sub>2</sub>-Fußabdruck

Die Hochtemperaturprozesse der WS<sub>2</sub>-Produktion (z. B. Kalzinierung 600-900 °C, CVD 900-1100 °C) führen zu einem erheblichen Energieverbrauch und CO<sub>2</sub>-Emissionen. Bei der Kalzinierungsmethode werden für jede Tonne WS<sub>2</sub> 500 kWh verbraucht (siehe 4.4.2.1), während für die CVD 2000 kWh benötigt werden. Legt man den durchschnittlichen CO<sub>2</sub>-Emissionsfaktor Chinas (0,8 kg CO<sub>2</sub>/kWh) zugrunde, so werden bei der Kalzinierung 400 kg CO<sub>2</sub> pro Tonne WS<sub>2</sub> und bei CVD 1600 kg CO<sub>2</sub> emittiert. Eine 50.000-Tonnen-WS<sub>2</sub>-Produktionslinie (hauptsächlich kalziniert) stößt jährlich etwa 20.000 Tonnen CO<sub>2</sub> aus, ein nicht großer, aber bemerkenswerter Teil der Industrieemissionen.

Eine energieintensive Produktion verstärkt den Treibhauseffekt. In [der Wolframforschung](#) ist der CO<sub>2</sub>-Fußabdruck von Herz-Kreislauf-Erkrankungen viermal so groß wie der der Kalzinierung, obwohl der geringe Ausstoß (<200 kg/Jahr) die Gesamtauswirkungen begrenzt. Großflächige traditionelle Methoden erfordern jedoch eine Energieoptimierung, um die Umweltbelastung zu reduzieren.

#### 7.1.5 Mögliche ökologische und gesundheitliche Risiken

Die Abgase H<sub>2</sub>S und SO<sub>2</sub> können Atemwegserkrankungen verursachen, während die Schwermetalle des Abwassers (z. B. Fe<sup>3+</sup>) und NH<sub>3</sub> für Wasserlebewesen hochgiftig sind (LC<sub>50</sub> ca. 10-50 mg/L, Fischtests). Die Auswaschung fester Abfälle kann zu einer Versauerung des Bodens führen (pH-Abfall um 0,5-1 Einheit). Daten zu Wolframprodukten schätzen, dass unbehandelte Schadstoffe jährlich umliegende ökologische Gebiete von 10 bis 20 km<sup>2</sup> betreffen, wobei 10.000 bis 20.000 Menschen von Gesundheitsrisiken betroffen sind.

Auf dem Wolframmarkt erfüllen etwa 20-30 % der Produktionslinien die Emissionsnormen nicht, was technologische Upgrades und strengere Vorschriften zur Risikominderung erfordert. Die Nachhaltigkeit der WS<sub>2</sub>-Produktion erfordert ein Gleichgewicht zwischen wirtschaftlichem Nutzen und ökologischer Verantwortung.

## 7.2 Umweltauswirkungen der Anwendung von Wolframdisulfid

Die Umweltauswirkungen der WS<sub>2</sub>-Anwendung (Wolframdisulfid) manifestieren sich in erster Linie in Abfallemissionen, Partikeldispersion und Umweltbelastungen am Ende der Lebensdauer. Diese Effekte variieren je nach Anwendungsszenario, Materialform (Pulver, Beschichtung, Verbundwerkstoff) und Einsatzbedingungen (z. B. hohe Temperatur, hoher Druck). In diesem Abschnitt werden die spezifischen Umweltauswirkungen der WS<sub>2</sub>-Anwendung aus Sicht der Abfallemissionen, der Partikelausbreitung und des Lebenszyklusmanagements analysiert, wobei reale Fälle integriert werden, um potenzielle Risiken und Managementanforderungen zu untersuchen.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

### 7.2.1 Abfallemissionen

Bei der WS<sub>2</sub>-Anwendung fallen Abfälle an, darunter Restmaterialien, fehlerhafte Beschichtungen und Verbundprodukte, die Boden, Wasser und Luft verschmutzen können.

In der Schmierung (siehe 5.1) geben WS<sub>2</sub>-Festschmierstoffe (z. B. Mikrometergroßes Pulver von 5-20 µm, siehe 3.1.1.1), die in Schwermaschinen oder Luft- und Raumfahrttriebwerken verwendet werden, Abfälle über Reibungsverschleiß an die Umwelt ab. Bei Stahlofenrollen (siehe 5.1.1.1.1) entsteht pro 1000 Betriebsstunden ein WS<sub>2</sub>-Verschleiß von 0,1 bis 0,5 kg pro Tonne (Massenverfahren), wobei 30 000 Tonnen jährlich 3000 bis 15 000 kg Abfall produzieren. Dieses restliche WS<sub>2</sub> (mit Spuren von Fe, Si <0,5%, ICP-OES) in industriellem Abwasser kann sich im Boden oder im Wasser ablagern und sich bei 10-50 mg/kg anreichern (Sedimenttest), wodurch die mikrobielle Aktivität gehemmt wird (z. B. Schwefeloxidierende Bakterien, 20-30 % Aktivitätsreduktion, Enzymtest).

In der Katalyse (siehe 5.2) müssen WS<sub>2</sub>-Katalysatoren (z. B. Nanoblätter 20-50 nm, siehe 3.1.2) in petrochemischen Prozessen (z. B. HDS, siehe 5.2.1.1) aufgrund von Aktivitätsverlust ausgetauscht werden. Bei der Dieselentschwefelung (siehe 5.2.1.1.1) werden bei der Verarbeitung von 500.000 Tonnen Diesel 500-1000 kg verbrauchter WS<sub>2</sub>-Katalysator (Massenmethode) erzeugt. Da sie Spuren von S (0,1-0,5 %, XPS) und W<sup>6+</sup> (0,01-0,05 g/kg, ICP-MS) enthalten, kann eine Deponierung ohne Stabilisierung W<sup>6+</sup> ins Grundwasser auslaugen und die Grenzwerte (>0,05 mg/L, GB 8978-1996) überschreiten und ein Toxizitätsrisiko für Wasserlebewesen darstellen.

In der Elektronik (siehe 5.3) entsteht bei WS<sub>2</sub>-Einschichtfolien (0,62 nm, siehe 3.1.2.1) von ausrangierten Geräten (z. B. flexible Displays, siehe 5.3.1.3.2) Elektroschrott. Bei einem jährlichen Verbrauch von 200 kg (siehe 6.1.2.2) beläuft sich der Abfall auf insgesamt 50-100 kg (50-75 % Rückgewinnung), der Spuren von WS<sub>2</sub> und Substraten (z. B. PET) enthält. Bei der Verbrennung werden CO<sub>2</sub> (ca. 100-200 kg, Schätzung der Verbrennung) und geringe SO<sub>2</sub>-Emissionen (<10 kg) freigesetzt, die zu Treibhauseffekten und dem Risiko des sauren Regens beitragen.

Abfallemissionen wirken sich auf die Ansammlung von Schwermetallen im Boden, die Wasserverschmutzung und die sekundäre Luftverschmutzung aus. In [der Wolframtechnologie](#) belaufen sich die unsachgemäß entsorgten WS<sub>2</sub>-Abfallemissionen auf etwa 1000-2000 kg pro Jahr, die lokale Ökosysteme über 5-10 km<sup>2</sup> beeinträchtigen.

### 7.2.2 Ausbreitung der Partikel

WS<sub>2</sub>-Partikel (nano- und mikrongroß), die während der Anwendung abgenutzt oder abgelöst werden, können sich in Luft, Wasser oder Boden verteilen und Umwelt- und Gesundheitsrisiken auslösen.

In Schmieranwendungen (z. B. Lagerbeschichtungen, siehe 5.1.2.1.1) verschleifen WS<sub>2</sub>-Schichten (1-5 µm) bei 500 °C und 2 GPa, wodurch Nanopartikel (<100 nm, 10-20 %, TEM) freigesetzt werden. Bei 500 Tonnen, die jährlich in Lagern für die Luft- und Raumfahrt eingesetzt werden

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

(siehe 5.1.2.1.1), belaufen sich die Verschleißpartikel auf 5-10 kg (Massenmethode). Diese verteilen sich über den Luftstrom und erhöhen den PM<sub>2.5</sub>-Gehalt um 0,1-0,5 µg/m<sup>3</sup> (Luftüberwachung), werden möglicherweise in die Lunge eingeatmet und verursachen Entzündungen (Zelltests zeigen eine Hochregulierung von IL-6 um 20-30%). Wolfram-Marktdaten zeigen, dass die Partikelemissionen in der Luft- und Raumfahrt 5-10 % der gesamten WS<sub>2</sub>-Emissionen ausmachen, was Bedenken hinsichtlich der beruflichen Exposition erforderlich macht.

In der Katalyse lösen sich WS<sub>2</sub>-Nanoblätter (20-50 nm) bei der Dieselschwefelung (siehe 5.2.1.1.1) durch Flüssigkeitserosion ab und gelangen mit dem Abwasser in das Wasser. Bei der Verarbeitung von 500.000 Tonnen pro Jahr werden 1-2 kg Partikel freigesetzt (Sedimenttest), wobei Wasserkonzentrationen von 0,01-0,05 mg/l (DLS) erreicht werden. Diese Nanopartikel sind hochgiftig für Plankton (z. B. Algen EC<sub>50</sub> ca. 5 mg/L, Wachstumshemmungstest) und können aquatische Ökosysteme stören.

In der Elektronik erzeugt die WS<sub>2</sub>-Einschicht-Folienablösung (z. B. Wearables, siehe 5.3.1.3.1) Nanopartikel (<10 nm), die sich mit dem Abfall dispergieren. Bei einem jährlichen Verbrauch von 100 kg (siehe 6.1.2.2) belaufen sich die Partikel auf 0,5-1 kg. Im Boden erreicht die Akkumulation 0,1-0,5 mg/kg (Bodentest), mit minimalen kurzfristigen Auswirkungen auf die Wurzel Aufnahme und die mikrobielle Aktivität (<5%, Enzymtest), obwohl Langzeitwirkungen untersucht werden müssen.

Die Ausbreitung von Feinstaub wirkt sich auf die Luftqualität, die Wassertoxizität und die Mikrobiologie des Bodens aus. In [Wolframprodukten](#) beträgt die jährliche Partikeldispersion etwa 10-20 kg, was eine Filtration und Rückgewinnung erfordert, um die Risiken zu mindern.

### 7.2.3 Lebenszyklus-Management

Der Anwendungslebenszyklus von WS<sub>2</sub>, von der Nutzung bis zur Entsorgung, ist mit Umweltbelastungen verbunden, einschließlich Ressourcenverbrauch, Abfallentsorgung und Recyclingeffizienz, wobei Missmanagement die Auswirkungen noch verschärft.

Bei der Schmierung fallen bei WS<sub>2</sub>-Fetten (z. B. Autofett, siehe 5.1.3.1.1) mit einem Jahresbedarf von 2000 Tonnen (siehe 6.1.1.2) 500-1000 kg Altabfall an (50-75 % Rückgewinnung). Nicht recycelte Portionen vermischen sich mit Siedlungsabfällen, und bei der Verbrennung werden CO<sub>2</sub> (ca. 1000-2000 kg, Schätzung der Verbrennung) und Spuren-SO<sub>2</sub> (<20 kg) freigesetzt, wodurch sich der CO<sub>2</sub>-Fußabdruck erhöht. Niedrige Gewinnungsraten (<50 %, [Wolframtechnologie](#)) führen zu Ressourcenverlusten, wobei jede Tonne WS<sub>2</sub> im Wert von 300-500 RMB (siehe 4.4.3.1) verschwendet wird.

In der Katalyse erzeugen verbrauchte WS<sub>2</sub>-Katalysatoren (z. B. Schwerölcracken, siehe 5.2.1.2.2) jährlich 800-1000 kg Abfall (siehe 6.1), mit W- und S-Rückgewinnungsraten von nur 30-40 % (Lösungsmittel extraktion). Nicht recycelte Anteile belegen 0,5-1 m<sup>3</sup> pro Tonne auf Deponien und sammeln sich über 10-20 Jahre auf 8000-10.000 m<sup>3</sup> an, verbrauchen Landressourcen und laugen

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

Spuren  $W^{6+}$  (0,01-0,02 mg/L, Auslaugungstest) aus, wodurch das Grundwasser verunreinigt wird.

In der Elektronik produzieren  $WS_2$ -Einschichtfolien (z. B. flexible Displays, siehe 5.3.1.3.2) jährlich 50-100 kg Abfall mit hohen Recyclingschwierigkeiten (<20 %, physisches Stripping), so dass von 200 kg verwendeter Flüssigkeit 160-180 kg nicht recycelt werden (siehe 6.1.2.2). Bei unsachgemäßer Entsorgung werden  $CO_2$  und kleinere toxische Gase (z. B.  $SO_2$  <5 kg) freigesetzt, die Spuren von Schwermetallen und organischen Stoffen (PET-Substrat) enthalten.

#### 7.2.4 Mögliche ökologische und gesundheitliche Risiken

$WS_2$ -Anwendungsabfälle und Feinstaub können ökologische und gesundheitliche Risiken auslösen. Das Einatmen von Nanopartikeln (<100 nm) kann Lungenentzündungen verursachen ( $PM_{2.5}$  Expositionsanstieg um 10-20%, gesundheitliche Bewertung), während Abwasser  $W^{6+}$  und  $S^{2-}$  für Wasserlebewesen hochgiftig sind ( $LC_{50}$  ca. 5-10 mg/L). Die  $WS_2$ -Akkumulation im Boden (0,1-0,5 mg/kg) hat kurzfristig begrenzte Auswirkungen, kann aber die Struktur der mikrobiellen Gemeinschaft langfristig verändern (Diversitätsreduktion 5-10%, 16S rRNA-Sequenzierung).

In [der Wolframforschung](#) zeigen arbeitsmedizinische Untersuchungen der  $WS_2$ -Partikelbelastung ein um 15-20 % erhöhtes Risiko für Atemwegserkrankungen (Umfrage). Wolfram-Marktdaten schätzen den weltweiten  $WS_2$ -Anwendungsabfall und die Partikelemissionen auf 5000-10.000 kg pro Jahr, was sich ökologisch auf 50-100 km<sup>2</sup> auswirkt und ein Gesundheitsrisiko für 50.000-100.000 Menschen darstellt.

#### 7.2.5 Variationsanalyse von Anwendungsszenarien

Die Umweltauswirkungen von  $WS_2$  variieren je nach Szenario erheblich. Die Schmierung mit hohem Verbrauch (80.000-100.000 Tonnen/Jahr, siehe 6.1.1) dominiert bei den Abfall- und Partikelemissionen (70-80 %); Die Katalyse mit häufigem Katalysatorausfall (1000-2000 kg/Jahr) konzentriert sich auf Abwasser und feste Abfälle (50-60%); Elektronik mit geringerem Verbrauch (2000-3000 Tonnen/Jahr, siehe 6.1.2) konzentriert sich auf Feinstaub und Elektroschrott (60-70 %). Bei [Wolframprodukten](#) sind die Emissionen von Schmierabfällen am höchsten (ca. 80 %) und erfordern ein gezieltes Management.

### 7.3 Umweltmaßnahmen und -strategien

Die Umweltauswirkungen der Herstellung (siehe 7.1) und der Anwendung (siehe 7.2) von  $WS_2$ , einschließlich Abgasen, Abwasser, festen Abfällen und Feinstaub, sind die Haupthindernisse für seine nachhaltige Entwicklung. Gezielte Umweltmaßnahmen und -strategien, die die Abgasbehandlung, das Abwassermanagement, die Verwertung fester Abfälle, die Partikelkontrolle und die Optimierung umweltfreundlicher Prozesse umfassen, sind unerlässlich. Diese zielen darauf ab, [die Umweltbelastung von  \$WS\_2\$  \(Wolframdisulfid\)](#) über den gesamten Lebenszyklus zu reduzieren, globale Vorschriften (z. B. EU REACH, China GB 8978-1996) zu erfüllen und eine umweltfreundliche Produktion und Anwendung zu fördern. In diesem Abschnitt werden die

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

technischen Prinzipien, die Implementierungseffekte und Optimierungsempfehlungen dieser Maßnahmen beschrieben und eine praktische Anleitung für die Nachhaltigkeit der WS<sub>2</sub>-Branche geboten.

### 7.3.1 Abgasreinigung

WS<sub>2</sub>-Produktions- und Anwendungsabgase (z. B. H<sub>2</sub>S-, SO<sub>2</sub>-, S-Dampf, siehe 7.1.1) müssen absorbiert, kondensiert und katalytisch umgewandelt werden, um die Luftverschmutzung zu reduzieren.

Bei der Kalzinierungsmethode bei H<sub>2</sub>S-Emissionen (500-1000 ppm, siehe 4.1.1) wandeln Abgasabsorptionstürme (10-15 % NaOH-Lösung) H<sub>2</sub>S in Na<sub>2</sub>S um, mit den Reaktionen:  $H_2S + NaOH \rightarrow NaHS + H_2O$ ,  $H_2S + 2NaOH \rightarrow Na_2S + 2H_2O$ ,  $NaHS + NaOH \rightarrow Na_2S + H_2O$ . Absorptionsraten erreichen 95-98 % (Gaschromatographie), Reduzierung des Abgases H<sub>2</sub>S auf <50 ppm (GB 16297-1996). Bei [CTIA GROUP LTD](#) werden für die Verarbeitung von 1000 m<sup>3</sup> H<sub>2</sub>S jährlich 200-300 kg NaOH benötigt, was etwa 20-30 RMB/m<sup>3</sup> kostet. Die Optimierung umfasst die Erhöhung der Recyclingquoten von Absorptionmitteln (50-70 %) und die Reduzierung des Reagenzienverbrauchs um 10-15 %.

Beim Sublimationsverfahren (siehe 4.1.2) wird S-Dampf (0,2-0,3 kg/Tonne WS<sub>2</sub>) durch Kondensation (0-10 °C) mit einem Wirkungsgrad von >90 % (Massenverfahren) zurückgewonnen, wobei jährlich 1000-1500 kg S zurückgewonnen werden (50.000-Tonnen-Produktion). Restliches S wird zu SO<sub>2</sub> verbrannt (1000 °C), mit Ca(OH)<sub>2</sub> zu CaSO<sub>4</sub> neutralisiert:  $S + O_2 \rightarrow SO_2$ ,  $SO_2 + Ca(OH)_2 \rightarrow CaSO_3 + H_2O$ ,  $CaSO_3 + 0,5O_2 \rightarrow CaSO_4$ . Emissionen sinken auf <50 ppm und erfüllen die Normen. Die Niedertemperaturkatalyse (CuO, 300 °C) ersetzt die Verbrennung und erreicht einen Wirkungsgrad von >98 %, SO<sub>2</sub> <10 ppm und eine Energieeinsparung von 60 % (20 kWh/Tonne vs. 50 kWh/Tonne, siehe 4.3.3.1).

In [der Wolframtechnologie](#) verarbeiten Abgassysteme jährlich etwa 2000 m<sup>3</sup> H<sub>2</sub>S und S mit einer Einhaltung von >99 %, obwohl die Betriebskosten (50-70 RMB/t WS<sub>2</sub>) durch Prozessintegration gesenkt werden müssen.

### 7.3.2 Abwasserbehandlung

WS<sub>2</sub>-Produktions- und Anwendungsabwässer (mit Fe<sup>3+</sup>, NH<sub>3</sub>, W<sup>6+</sup>, siehe 7.1.2) müssen neutralisiert, gefällt und adsorbiert werden, um die Wasserverschmutzung zu verringern.

Saures Abwasser (z. B. Kalzinierungs-Säurewäsche, pH 1-2) wird mit Ca(OH)<sub>2</sub> bis pH 7-8 neutralisiert, wodurch  $Fe(OH)_3 \downarrow$  entsteht. Filtration erreicht eine Rückgewinnung von >95 % (Massenmethode), wodurch Fe auf <0,05 mg/L (ICP-MS) reduziert wird, was GB 8978-1996 entspricht.

#### [COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT](#)

Hydrothermales Abwasser (pH 10-11) mit  $\text{NH}_3$  (0,5-1 g/L) wird destilliert (80 °C) und auf 10 % (Massenmethode) konzentriert, wodurch das verbleibende  $\text{NH}_3$  auf <10 mg/l gesenkt wird. Jede Tonne  $\text{WS}_2$  verarbeitet 0,5-1 m<sup>3</sup> Abwasser und gewinnt 0,05-0,1 kg Fe und 0,1-0,2 l  $\text{NH}_3$  zurück, wodurch 15-20 RMB/Tonne eingespart werden (siehe 4.3.3.2).

$\text{W}^{6+}$ -haltiges Abwasser (0,01-0,05 g/L) nutzt Aktivkohleadsorption mit einem Wirkungsgrad von >90 % (BET-Test), wodurch  $\text{W}^{6+}$  auf <0,05 mg/L reduziert wird. Bei 50.000 Tonnen  $\text{WS}_2$  pro Jahr beläuft sich das Abwasser auf 25.000-50.000 m<sup>3</sup>, wofür 500-1000 kg Aktivkohle (Kapazität 0,1 g/g) benötigt werden, was 10-15 RMB/m<sup>3</sup> kostet. In [Wolframprodukten](#) gewinnen die Aufbereitungssysteme jährlich 50-100 kg W zurück und reduzieren den CSB auf <50 mg/l bei einer Einhaltung von >95 %.

### 7.3.3 Verwertung fester Abfälle

Feste Abfälle aus der  $\text{WS}_2$ -Produktion und -Anwendung (mit W, S, Fe, siehe 7.1.3) müssen verwertet und wiederverwendet werden, um Ressourcenverschwendung und Umweltrisiken zu reduzieren.

Kalzinierungsabfälle (10-20 kg/Tonne  $\text{WS}_2$ ) mit unumgesetztem [Wolframpulver](#) (W) und  $\text{WO}_3$  (<0,1 %) werden durch Säureauflösung (HCl, pH 2-3) und Fällung zurückgewonnen, wobei eine Rückgewinnung von 80-90 % W (ICP-OES) erreicht wird. FeS und  $\text{SiS}_2$  werden durch Flotation (Aufschäumer Kiefernölalkohol, 0,1 Gew.-%) mit einem Wirkungsgrad von >90 % (Massenmethode) getrennt. Bei CTIA GROUP LTD erzeugen jährlich 50.000 Tonnen 500 bis 1000 Tonnen Abfall und gewinnen 400 bis 800 kg W (im Wert von 1,2 bis 2,4 Millionen RMB, 300 RMB/kg) zurück, was 20 bis 30 RMB/kg kostet.

Verbrauchte  $\text{WS}_2$ -Katalysatoren (z. B. HDS, siehe 5.2.1.1) werden durch Lösungsmittlextraktion (1 M  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) zurückgewonnen, wobei eine Rückgewinnung von 60-70 % W (Laugungstest) erreicht wird, wobei der verbleibende S durch Kalzinierung (600 °C) zur Behandlung in  $\text{SO}_2$  entfernt wird. Bei einem jährlichen Abfall von 1000 kg werden 600-700 kg W zurückgewonnen. In der Wolframtechnologie steigen die Rückgewinnungsraten von 50 % auf 70 %, wodurch die Deponierung um 30-40 % (ca. 300-400 Tonnen/Jahr) reduziert wird.

Die Optimierung umfasst eine fortschrittliche Trennung (z. B. Kombination aus Magnet- und Flotationskombination, wodurch die Fe-Rückgewinnung auf 95 % gesteigert wird) und geschlossenes Recycling, wodurch die Abfallemissionen um 20-30 % gesenkt werden.

### 7.3.4 Partikel-Kontrolle

Die Partikeldispersion der  $\text{WS}_2$ -Anwendung (<100 nm, siehe 7.2.2) erfordert Filtration, Sedimentation und Schutzmaßnahmen, um die Luft- und Wasserverschmutzung zu reduzieren.

Bei der Schmierung (z. B. Lagerbeschichtungen, siehe 5.1.2.1.1) werden  $\text{WS}_2$ -Partikel (5-10 kg/Jahr)

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

mit HEPA-Filtern (>99,9 % Abscheidung) kontrolliert, wodurch PM<sub>2.5</sub> auf <0,1 µg/m<sup>3</sup> reduziert wird (Luftüberwachung). Auf dem [Wolframmarkt](#) sinken die Partikelemissionen in der Luft- und Raumfahrt um 80-90 % und kosten 10-15 RMB/kg WS<sub>2</sub>. Schutzmaßnahmen wie versiegelte Arbeitsbereiche und N95-Masken reduzieren das Inhalationsrisiko um 90 % (gesundheitliche Bewertung).

Katalytische Abwasserpartikel (1-2 kg/Jahr) werden durch Zentrifugation (5000 U/min, >95 % Wirkungsgrad) entfernt, wodurch die Wasserkonzentrationen auf <0,01 mg/l (DLS) gesenkt werden. Elektroschrottpartikel (0,5-1 kg/Jahr) werden durch Nassverfahren (Wasserwäsche, 90 % Wirkungsgrad) zurückgewonnen, wodurch die Dispersion um 80-85 % reduziert wird. In [der Wolframforschung](#) verarbeiten Partikelkontrollsysteme jährlich 10-20 kg mit einer Einhaltung von >98 %.

### 7.3.5 Grüne Prozessoptimierung

Der Energieverbrauch und die CO<sub>2</sub>-Bilanz der WS<sub>2</sub>-Produktion (siehe 7.1.4) müssen durch Abwärmerückgewinnung, Niedertemperaturprozesse und saubere Energiesubstitution optimiert werden. Die Abwärmerückgewinnung aus den Abgasen des Kalzinierungsofens (500-700 °C) erwärmt die Rohstoffe vor, wodurch 20 % Energie eingespart werden (100 kWh/Tonne, 80 RMB/Tonne, siehe 4.4.2.2). Das CVD-Zweizonen-Design (heiße Zone 1000 °C, kalte Zone 800 °C) reduziert den Wärmeverlust um 15 % (300 kWh/Tonne). Die Verkürzung der hydrothermalen Reaktionszeit (24 bis 18 Stunden) senkt den Energieverbrauch auf 200 kWh/Tonne (160 RMB/Tonne). Bei CTIA GROUP LTD sparen jährlich 50.000 Tonnen 5000 MWh ein und reduzieren den CO<sub>2</sub>-Ausstoß um 4000 Tonnen (0,8 kg CO<sub>2</sub>/kWh).

Die Niedertemperaturkatalyse (CuO, 300 °C) ersetzt die Verbrennung zur H<sub>2</sub>S-Behandlung und spart 60 % Energie (20 kWh/Tonne) durch SO<sub>2</sub> <10 ppm. Die Substitution sauberer Energie (z. B. Solarenergie) senkt die Kohlenstoffemissionen um 30-40 % (ca. 6000-8000 Tonnen CO<sub>2</sub>/Jahr). In der Wolframtechnologie senkt die umweltfreundliche Optimierung die Gesamtkosten um 10-15 % (ca. 120 RMB/Tonne) und erhöht so die Vorteile für die Umwelt.

### 7.3.6 Politische und regulatorische Unterstützung

Umweltmaßnahmen erfordern politische Unterstützung, einschließlich Emissionsnormen (z. B. GB 16297-1996), Steueranreize und Technologiesubventionen. Chinas 14. Fünfjahresplan schreibt die Einhaltung von >95 % für Industrieabgase und einen CSB für Abwasser von <50 mg/l vor, Standards, die die WS<sub>2</sub>-Produktion erfüllen muss. Auf dem Wolframmarkt erhalten konforme Unternehmen Steuerermäßigungen von 10 bis 20 % (etwa 0,5 bis 1 Million RMB/Jahr) und Subventionen für Technologie-Upgrades in Höhe von 2 bis 3 Millionen RMB pro Ausrüstung.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT



CTIA GROUP LTD

## Kapitel 8: Lieferanten von Wolframdisulfid

### 8.1 Verifizierter Lieferant - CTIA GROUP LTD

Große Hersteller verbessern die Wettbewerbsfähigkeit von  $WS_2$  durch technologische Optimierung, wie z. B. [CTIA GROUP LTD](#).

CTIA GROUP LTD ist ein führender  $WS_2$ -Produzent in China mit einer Jahresproduktion von 50.000 Tonnen, was einem Anteil von 30 % am Inlandsmarkt entspricht (Wolfram-Marktdaten). Es verwendet die Kalzinierungszersetzungsmethode (4.1.1), die durch Säurewaschen (5 % HCl) und Glühen (950 °C) optimiert ist und eine Reinheit von 99,9 % (ICP-OES) erreicht. Das Schleifen (0,5  $\mu m$ ) und das Flüssigphasen-Exfoliation (50 nm) erfüllen die Anforderungen an Schmierung und Nano und produzieren jährlich etwa 500 kg Nano- $WS_2$ .

In ökologischer Hinsicht gewährleisten die Absorption des Endgases ( $Na_2S$ -Umwandlung) und die Neutralisation von Abfallflüssigkeiten ( $CaSO_4$ ) die Einhaltung der Emissionen ( $SO_2 < 50$  ppm). Die Kosten werden auf 300-500 RMB/kg begrenzt, wobei die Produkte in der Luft- und Raumfahrtsschmierung (Reibungskoeffizient 0,05) und HDS (90 % Abscheiderate) verwendet werden. In der [Wolframtechnologie](#) unterstützt das  $WS_2$  die High-End-Forschung mit jährlichen Exporten von rund 10.000 Tonnen.

#### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

## Referenzen

- "Was ist Wolframdisulfid?", China Tungsten Online News, 2022-07-07
- "Atomare Struktur von Wolframdisulfid", China Tungsten Online News, 2022-09-10
- "Eigenschaften, Herstellung und Anwendungen von Wolframdisulfid: Ein Überblick", Ding J et al., Angewandte Physik, 2021
- "Was sind die Verwendungen von Wolframdisulfid-Nanoblättern?", China Tungsten Online News, 2025-02-09
- Öffentliches WeChat-Konto "China Tungsten Online": Updates zum Wissen über Wolframdisulfid
- "Eigenschaften, Herstellung und Anwendungen von Wolframdisulfid: Ein Überblick", Ding J et al., Angewandte Physik, 2021
- "Eigenschaften und Anwendungen von nanoskaligem Wolframdisulfid", Zhang Q et al., Nanotechnologie, 2023
- "Herstellung und Anwendungen von hochreinem Wolframdisulfid", Wang L et al., Chemieingenieurwesen, 2022
- "Kristallphasen und Eigenschaften von Wolframdisulfid", Li M et al., Materialwissenschaft, 2023
- "Synthese und Anwendungen von Wolframdisulfid-Nanostrukturen", Zhang Q et al., Nanotechnologie, 2023
- "Kostenanalyse der WS<sub>2</sub>-Produktion", Li Wei et al., Chemical Economics, 2021
- "Studie zur Optimierung des Energieverbrauchs für industrielles WS<sub>2</sub>", Zhang Qiang et al., Energietechnik, 2020
- "Wirtschaftliche Analyse der skalierten WS<sub>2</sub>-Produktion", Wang Lei et al., Materialien und Fertigung, 2022
- "Trends auf dem Markt für Wolframrohstoffe", China Tungsten Online News, 2023-06-15
- "Studie zu Reinheitsverbesserungstechniken in der WS<sub>2</sub>-Produktion", Zhang Wei et al., Journal of Chemical Engineering, 2021
- "Partikelgrößenkontrolle von Nano WS<sub>2</sub>", Li Ming et al., Werkstofftechnik, 2020
- "Umwelttechnologien in der Wolframdisulfidproduktion", Wang Qiang et al., Umweltwissenschaften, 2022
- "Überblick über die WS<sub>2</sub>-Produktion bei CTIA GROUP LTD ", China Tungsten Online News, 2023
- "Studie zur Herstellung von WS<sub>2</sub>-Dünnschichten durch chemische Gasphasenabscheidung", Li Wei et al., Nanotechnologie, 2021
- "Optimierung der hydrothermalen Präparation von nanoskaligem WS<sub>2</sub>", Zhang Qiang et al., Acta Chimica Sinica, 2020
- "Fortschritte bei der mechanischen Exfoliation für einschichtiges WS<sub>2</sub>", Wang Lei et al., Materials Science, 2022
- "Moderne Synthesetechniken für Wolframdisulfid", China Tungsten Online News, 2023-01-10
- "Überprüfung der Produktionsprozesse von Wolframdisulfid", Zhang Wei et al., Chemical Engineering Progress, 2020
- "Optimierungsstudie zur Herstellung von WS<sub>2</sub> durch Kalzinationszerlegung", Li Ming et al., Materialwissenschaft und -technik, 2021
- "Prozessanalyse der Wolframtrisulfid-Sublimationsmethode", Wang Qiang et al., Zeitschrift für Anorganische Chemie, 2019
- "Technologie zur Herstellung von Wolframverbindungen", China Tungsten Online News, 15.05.2022
- "Studie über die Anwendung von Wolframdisulfid bei der Schmierung", Zhang Qiang et al., Schmierung und Abdichtung, 2021
- "Leistungsanalyse von WS<sub>2</sub>-Beschichtungen in Hochtemperaturumgebungen", Li Ming et al., Materialwissenschaft und -technik, 2020
- "Vorbereitung und Anwendung von Verbundwerkstoffschmierstoffen", Wang Lei et al., Chemical Engineering Progress, 2022
- "Marktanalyse von Schmierstoffen auf Wolframbasis", China Tungsten Online News, 2023-02-10
- "Studie zur Anwendung von Wolframdisulfid in Halbleiterbauelementen", Zhang Wei et al., Acta Electronica Sinica,

### COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

2021

"Leistungsanalyse von WS<sub>2</sub>-Photodetektoren", Li Ming et al., Acta Optica Sinica, 2020

"Fortschritte bei der Anwendung von WS<sub>2</sub> in der flexiblen Elektronik", Wang Qiang et al., Nanotechnologie, 2022

"Überblick über den Markt für wolframbasierte elektronische Materialien", China Tungsten Online News, 2023-04-10

"Studie zu Abgasbehandlungstechnologien für die Wolframdisulfidproduktion", Zhang Qiang et al., Zeitschrift für Umwelttechnik, 2022

"Technologien zur Behandlung und Rückgewinnung von Industrieabwässern", Li Wei et al., Chemischer Umweltschutz, 2021

"Umweltmanagementstrategien für WS<sub>2</sub> Feste Abfälle und Feinstaub", Wang Lei et al., Environmental Science, 2020

"Aktueller Stand der grünen Prozessentwicklung in der Wolframindustrie", China Tungsten Online News, 2023-05

COPYRIGHT AND LEGAL LIABILITY STATEMENT

Copyright© 2024 CTIA All Rights Reserved  
标准文件版本号 CTIAQCD-MA-E/P 2024 版  
[www.ctia.com.cn](http://www.ctia.com.cn)

电话/TEL: 0086 592 512 9696  
CTIAQCD-MA-E/P 2018-2024V  
[sales@chinatungsten.com](mailto:sales@chinatungsten.com)