マイクロ波照射下粉体充填層のモデル化と加熱温度分布：触媒反応の解析

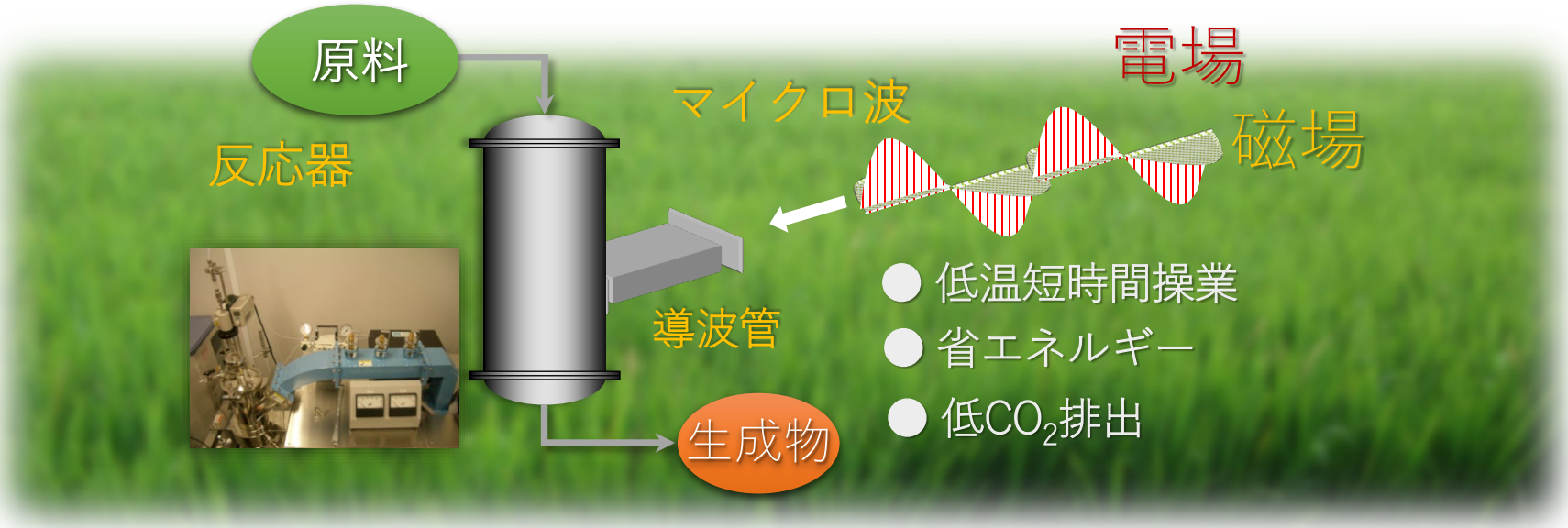
COMSOL Conference2026

2026/10/21-22

一般社団法人ZeroC
東京工業大学（現東京科学大学）名誉教授
和田雄二
L-TRiSE株式会社

カーボンニュートラル対策として産業電化

マイクロ波を用いた化学プロセスの発明を目指す



1. 触媒に対する直接的なエネルギー投入
2. 触媒近傍の局所高温場で反応が促進されることにより見かけ上の反応温度・圧力を低減
3. マイクロ波の損失機構の基づいた触媒デザイン

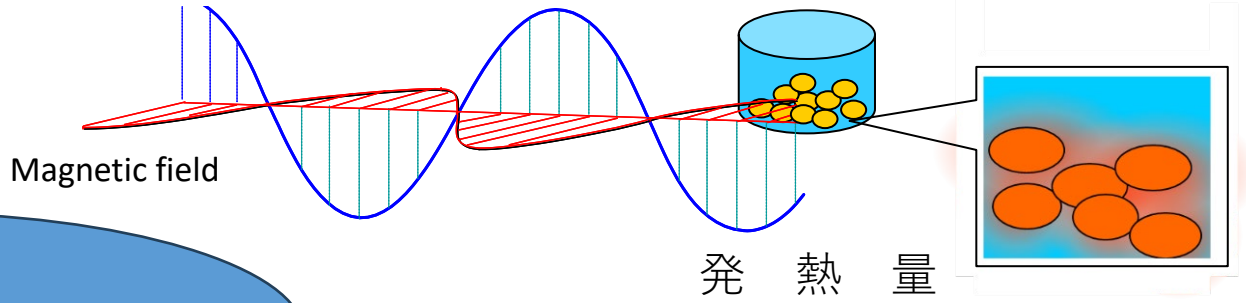
マイクロ波照射加熱を利用する化学反応

電磁波の挙動を完全に記述する→マックスウェル方程式

$$
\begin{cases}
rot\vec{H}=\vec{J}+\dfrac{\partial\vec{D}}{\partial t} \\
rot\vec{E}=-\dfrac{\partial\vec{B}}{\partial t} \\
div\vec{B}=0 \\
div\vec{D}=\rho
\end{cases}
$$

$\vec{H}$：磁界ベクトル
$\vec{D}$：電束密度ベクトル
$\vec{E}$：電界ベクトル
$\vec{B}$：磁束密度ベクトル
$\vec{J}$：電流面密度ベクトル
ρ：電荷密度

急速加熱・内部加熱・物質選択加熱



省エネ・
CO_2排出低減

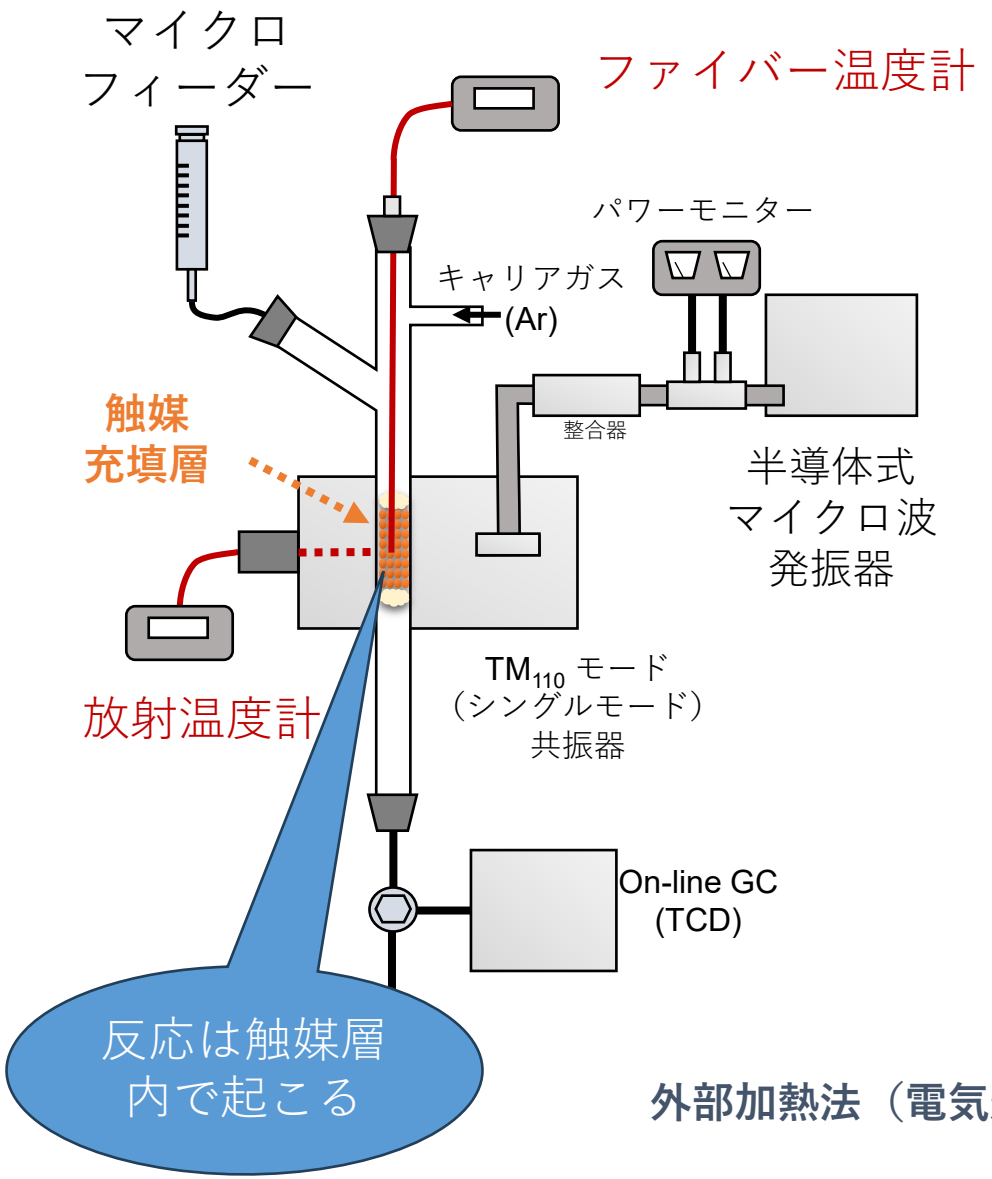
$$P=\frac{1}{2}\sigma|E|^2+pf\varepsilon_0\varepsilon_r''|E|^2+p'f\mu_0\mu_r''|H|^2$$

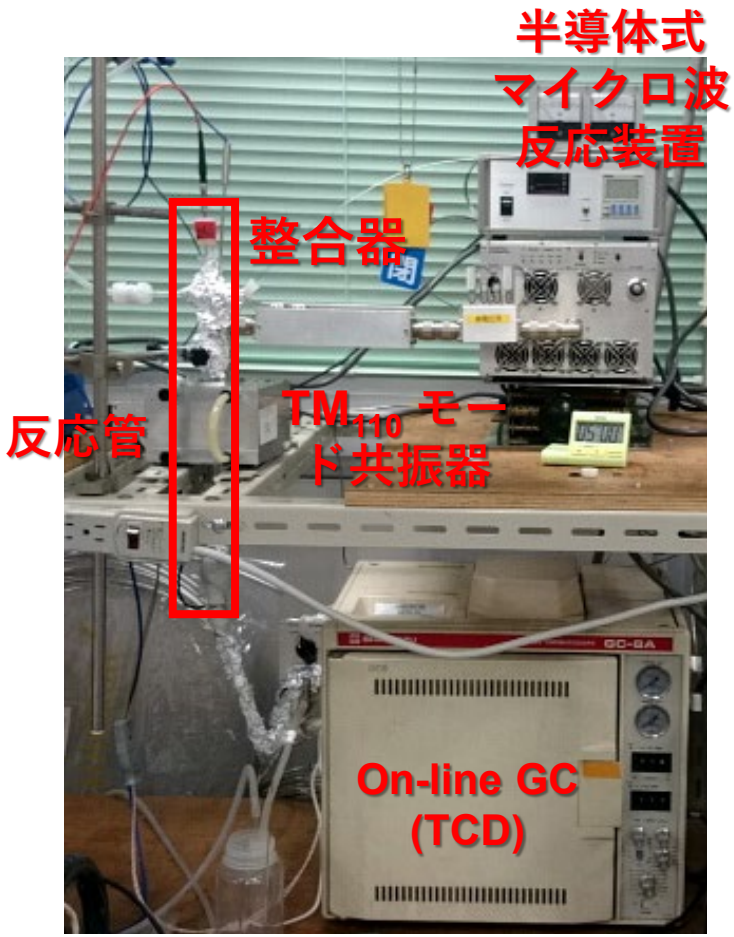
なぜこの検証を行ったのか？

産業電化技術としてマイクロ波加熱利用の
化学プロセスを発明したい

目的：原理の理解と制御因子の明確化
固体触媒層内の非平衡な局所加熱現象を理解したい

マイクロ波-固定床流通式反応装置（ラボ用）





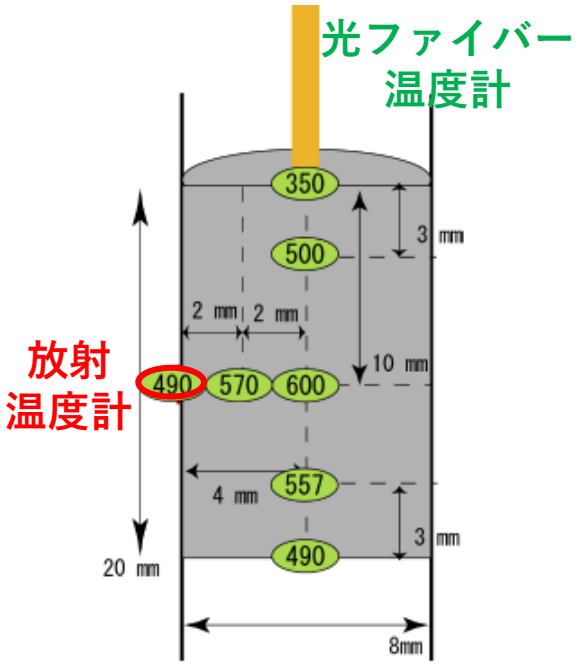
外部加熱法（電気炉）と比較

触媒層のマイクロ波加熱イメージ：３つのタイプの発見

反応場サイズ

mm　　μm　　nm

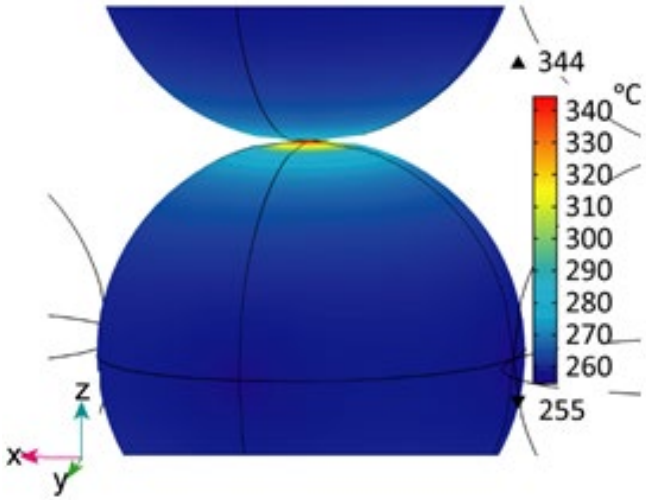
触媒層中心から端部への温度勾配



N. Haneishi et al. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2017, **56**, 7685

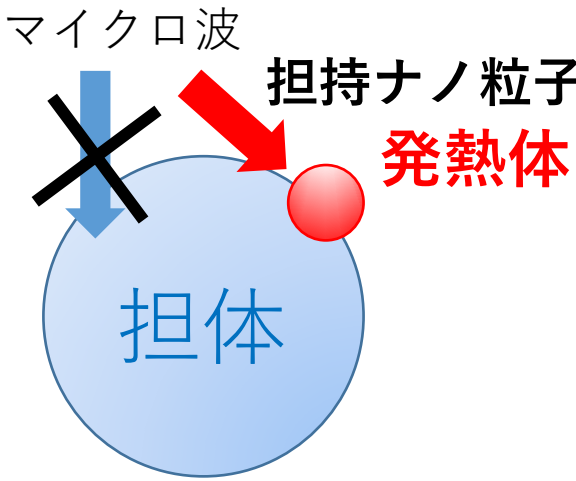
粒子間近傍での
- 電磁波集中
- 局所高温場形成

シミュレーション結果



N. Haneishi et al. *Sci. Rep.* 2019, **9**, 222

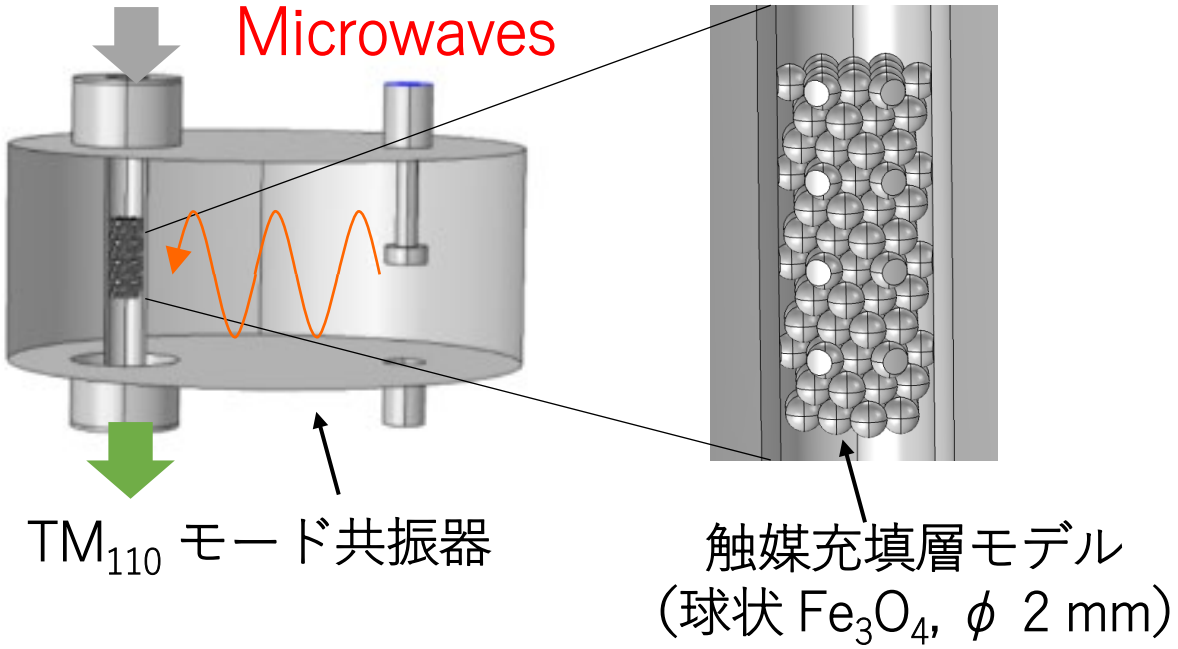
担持ナノ粒子が局所高温



T. Ano et al., *Commun Chem* 2020, **3**, 86.

キャビティー・反応管・触媒層のモデル化

有限要素法(FEM)を用いた電磁場強度の解析



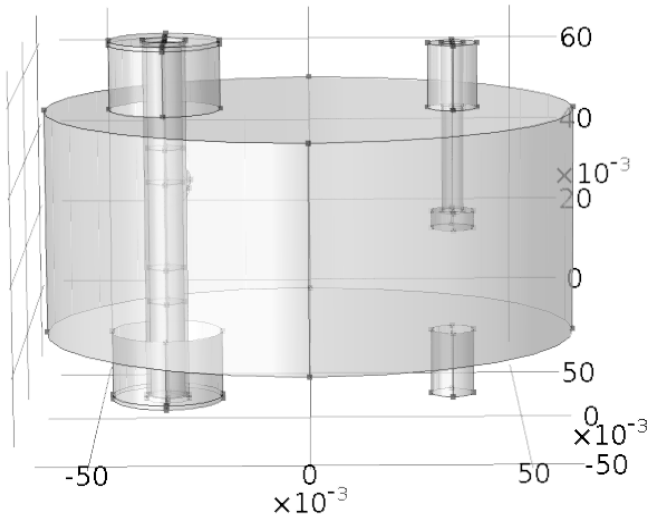
シミュレーション: COMSOL Multiphysics ver 5.2

有限要素法によるシミュレーション

有限要素法による電磁場分布シミュレーション及び、
熱流解析シミュレーション　　（COMSOL Multiphysics）

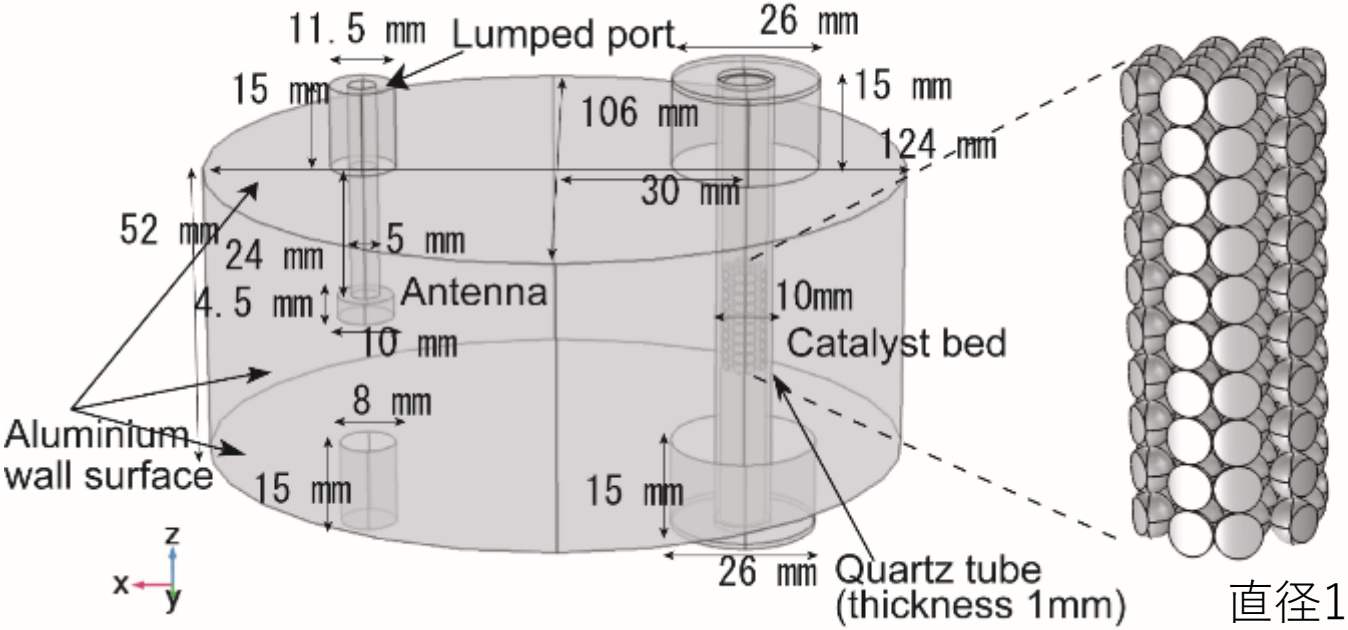
楕円チャンバー型キャビティの内部を再現

○組み込んだフィジックス
①電磁波　周波数領域モジュール
キャビティ内における電磁波分布及び触媒層内部における電力損失
②伝熱モジュール
①の電力損失から得られる発熱量を温度に換算熱の散逸を計算に入れた温度分布



球が並んだ触媒層を用いたシミュレーションモデル

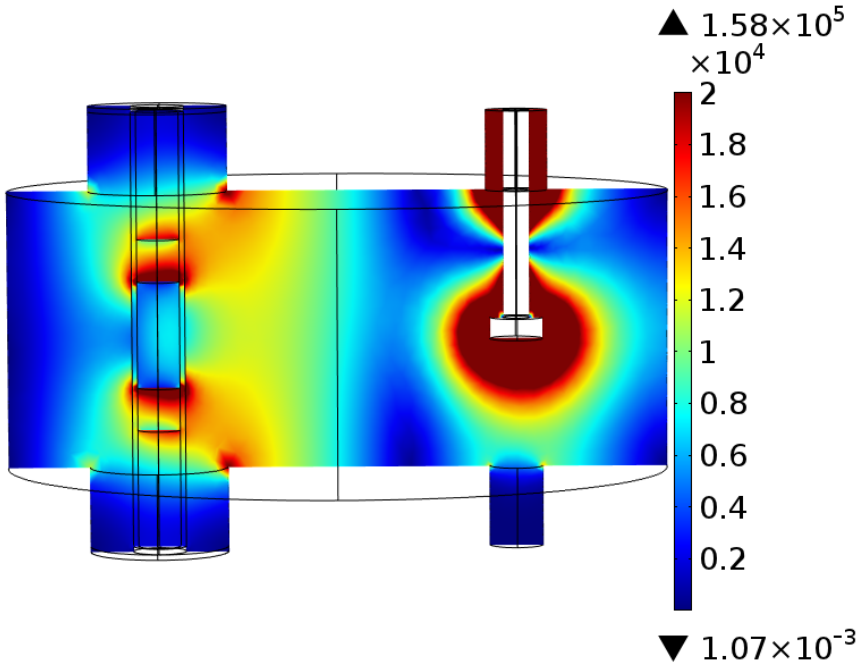
・有限要素法、COMSOL Multiphysicsを使用
・電磁波分布および伝熱のモジュール
・2－プロパノールの脱水素反応の実験と同じジオメトリの
　アプリケーターをソフトウェア上に再現



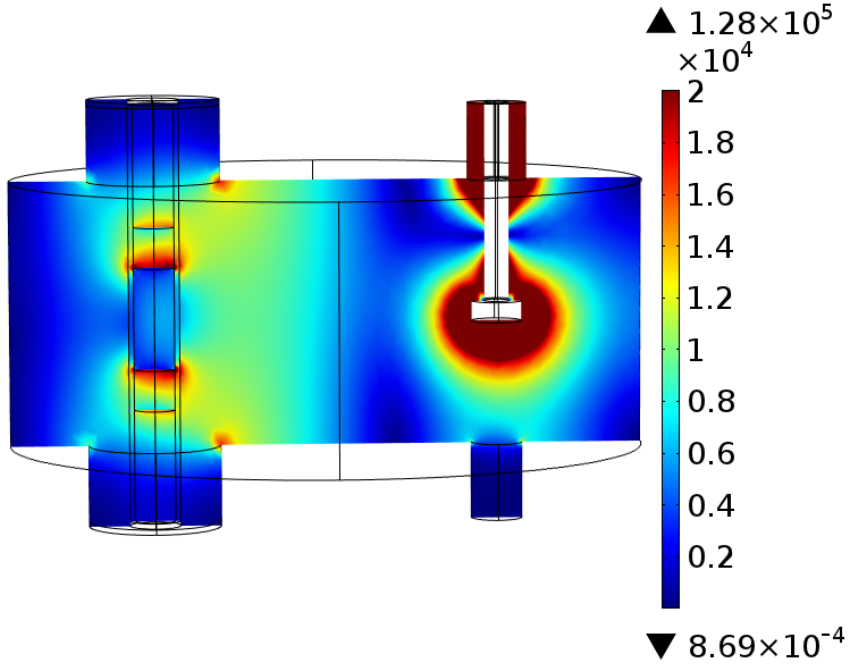
直径1.9mmの球を160個
並べて触媒層を表現

結果：得られた電場ノルム分布

楕円チャンバー内の電場分布



13.7W（触媒層中心部分が600℃）



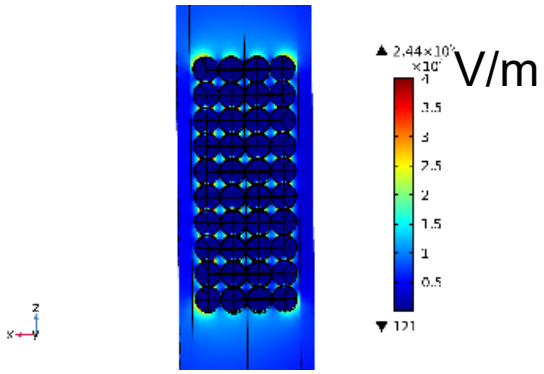
9.05W（触媒層中心部分が500℃）

触媒充填層内における局所的なマイクロ波の集中

有限要素法(FEM)を用いた電磁場強度の解析

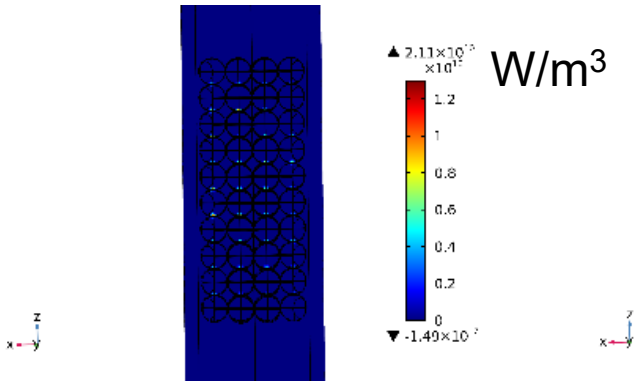
電場強度

a)



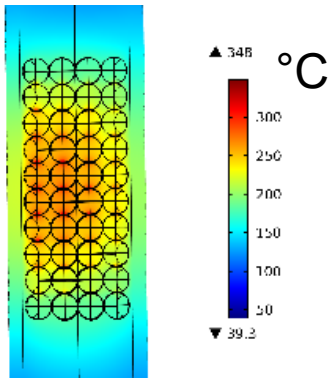
電力損失密度

b)



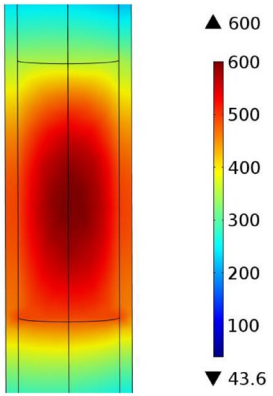
温度

c)

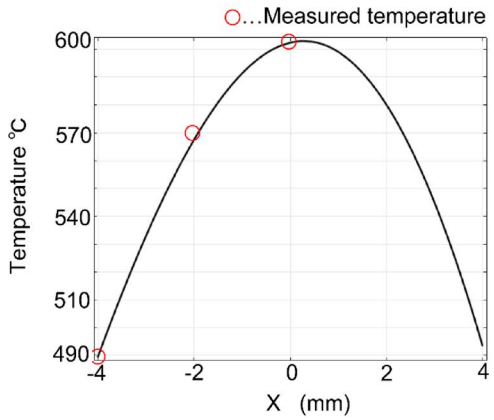


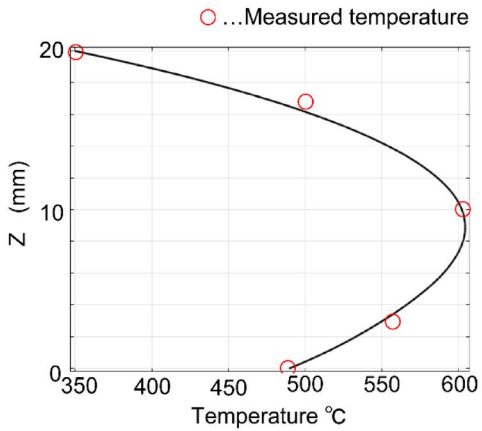
温度分布解析結果

d)

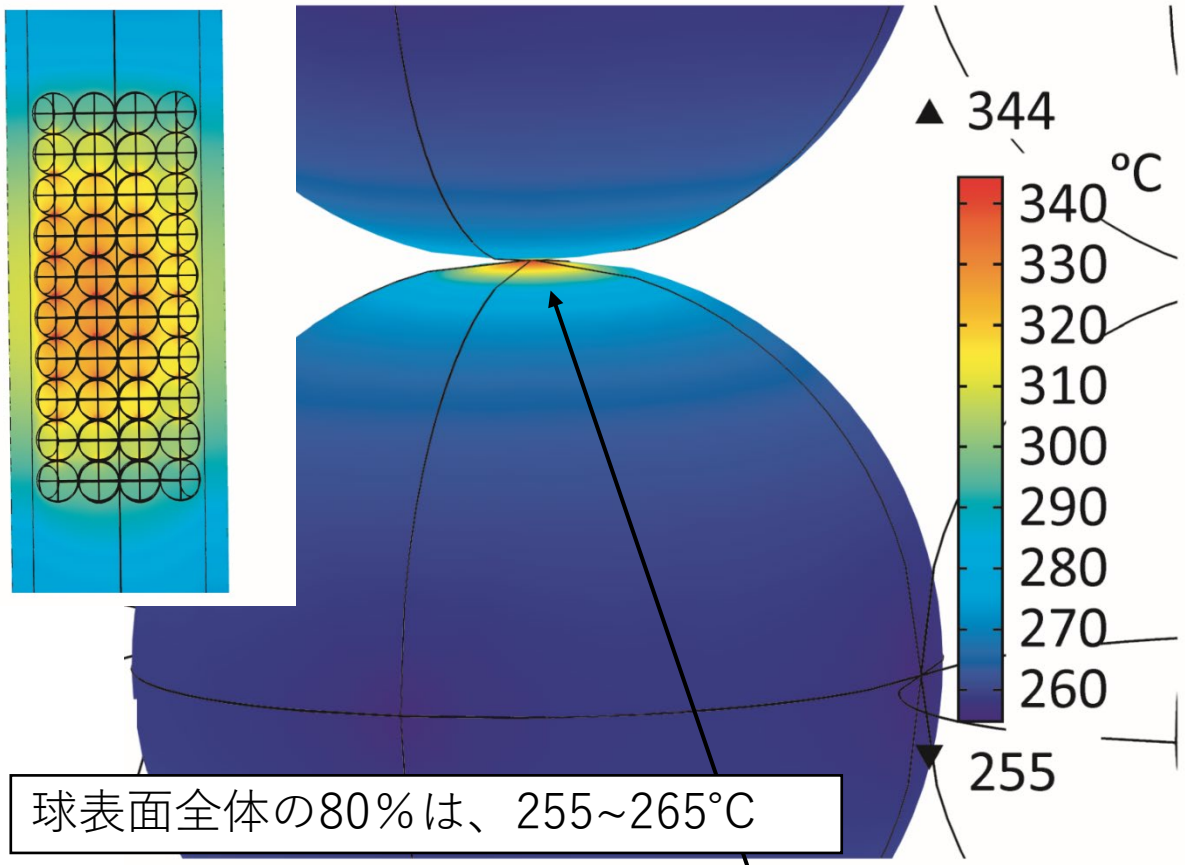


e)





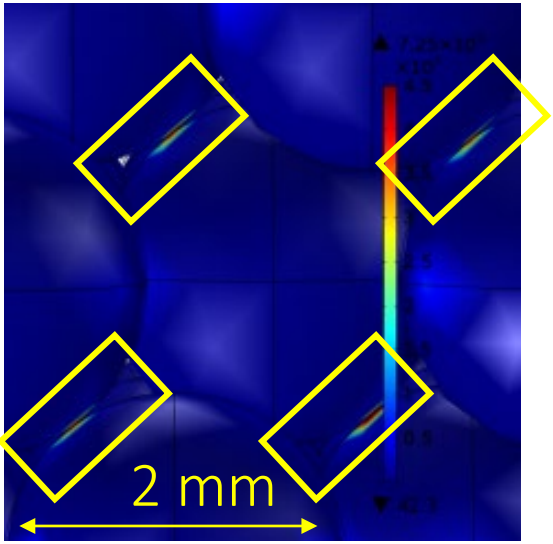
触媒層の粒子接触点温度（拡大）



固定床流通系触媒反応における非平衡局所加熱

a)

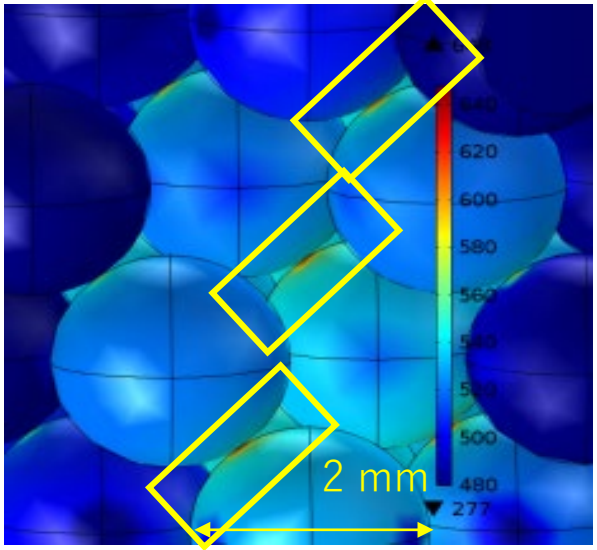
電磁界シミュレーション



触媒粒子接触点(200 μm)の
領域に450倍の強電界領域が
発生

b)

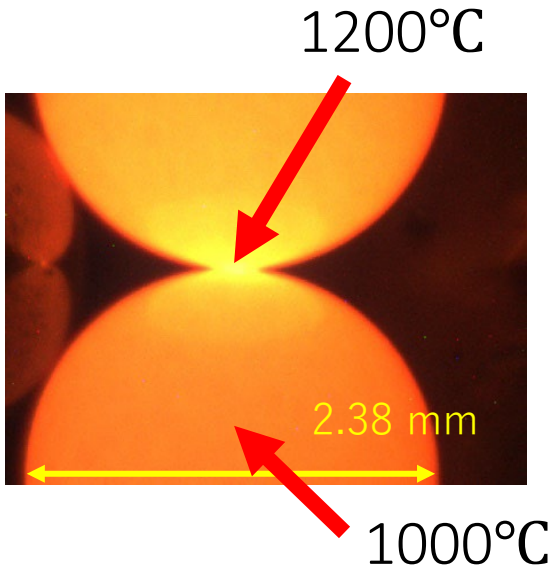
伝熱シミュレーション



触媒粒子接触点(200 μm)の
領域の温度が周囲より
100℃以上昇温

c)

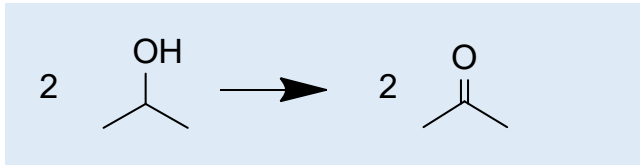
局所温度の実測



粒子接触点において**200℃**
以上の局所的な発熱を実測

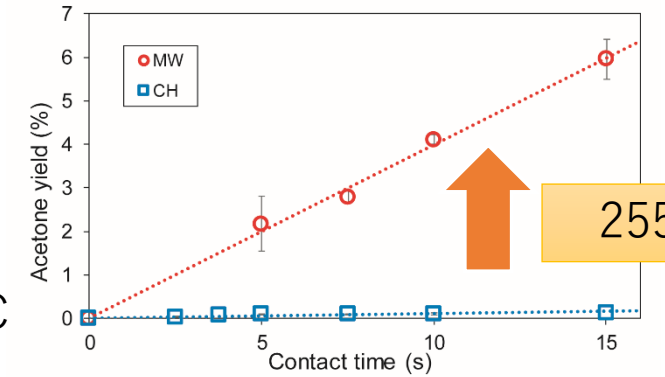
2－プロパノールの脱水素反応　反応活性

55-60℃の見かけの反応温度低下



a)

200 °C

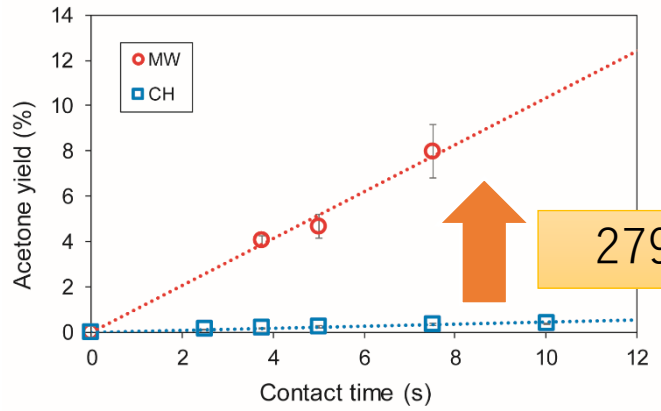


255°Cの反応に相当

・平衡転化率は、200－250°Cの範囲において99%以上
・収率が接触時間に対して一次に増加

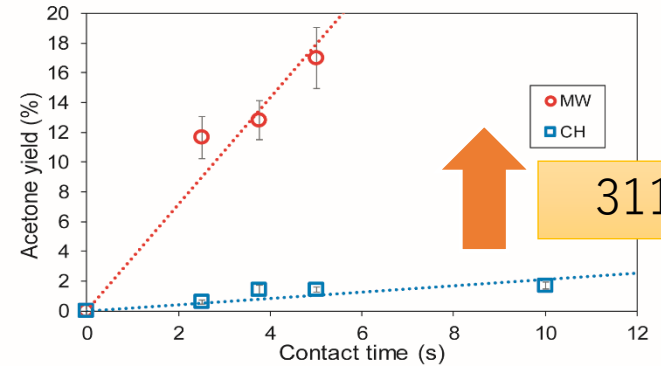
条件を満たす

225 °C



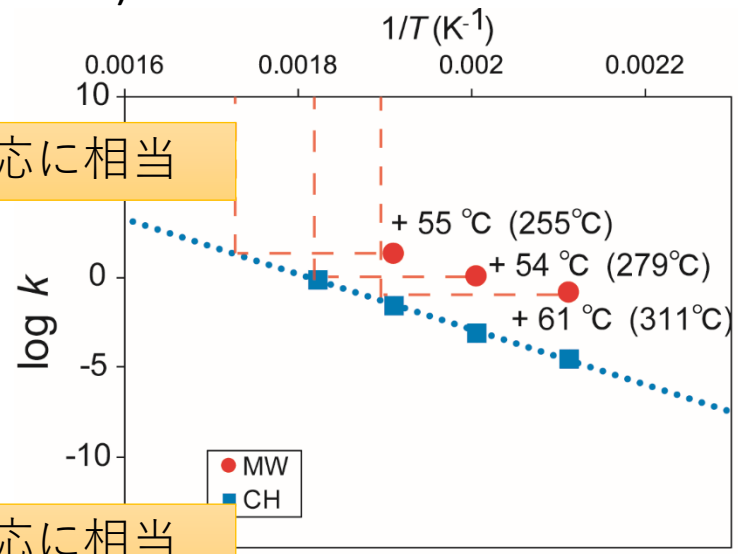
279°Cの反応に相当

250 °C



311°Cの反応に相当

a)



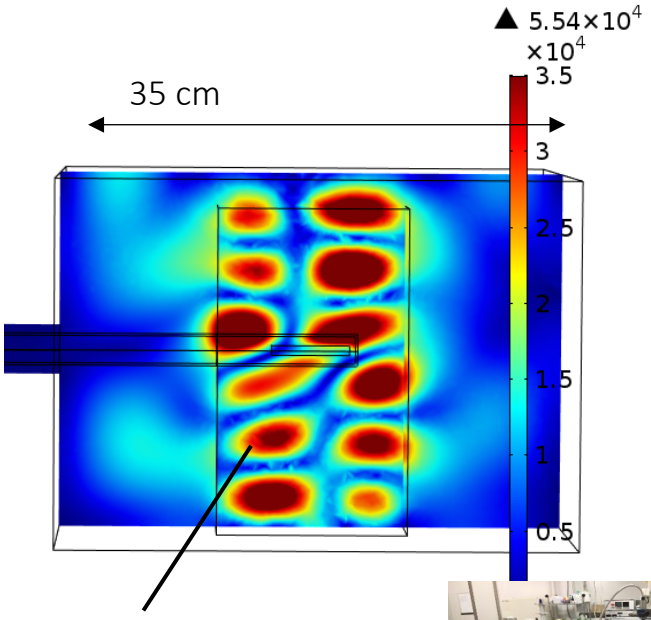
結　論

- 固体触媒充填層を球体粒子の配列としてモデル化した。
- COMSOL MultiphysicsのRFモジュールにより、充填層内の電磁場分布を求めた。
- 伝熱モジュールを連成し、充填層内の温度分布を求めた。
- 充填層内の粒子接触点に電場集中が起こることがシミュレーションから示され、さらに接触点において非平衡な局所加熱が起こることが予測された。
- リアル実験において、局所加熱発生を検証した。
- マイクロ波照射下では、通常加熱に比べ反応速度が加速し、55-61℃の低下として観測できる。

反応プロセス省エネ・CO2発生量削減効果

マルチモード vs シングルモード

マルチモード

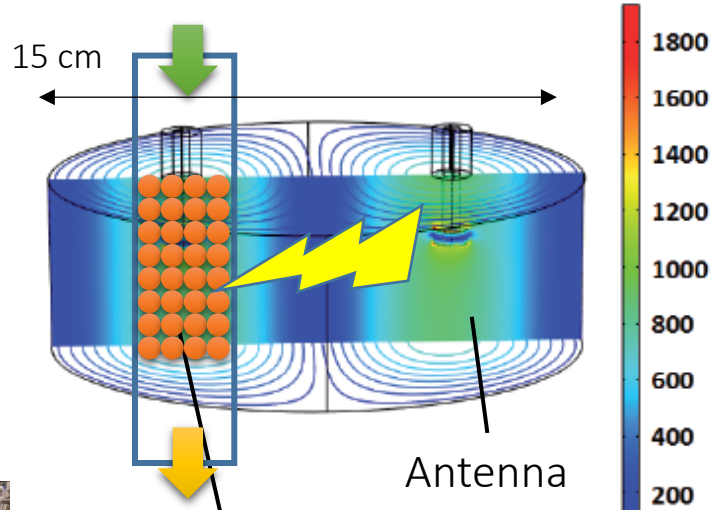


非局在化した電場



触媒加熱に高い出力が必要
(100-1000 W)

シングルモード
(TM_{110} mode)



局所に集中した電場

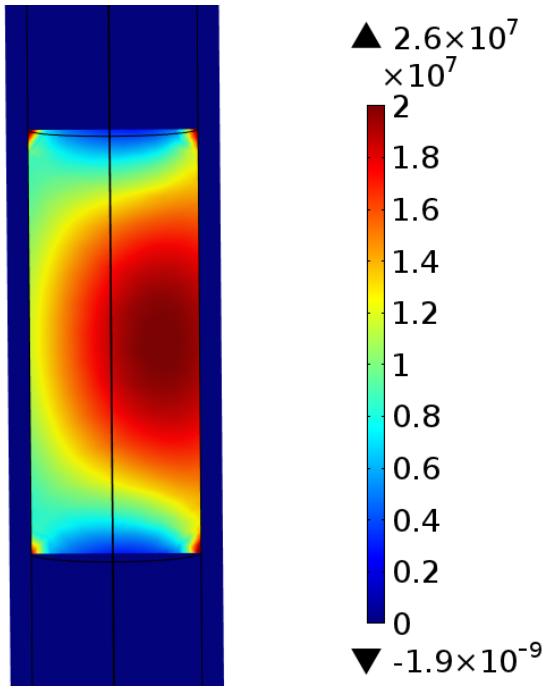


省パワーで強電界
(＜100 W)

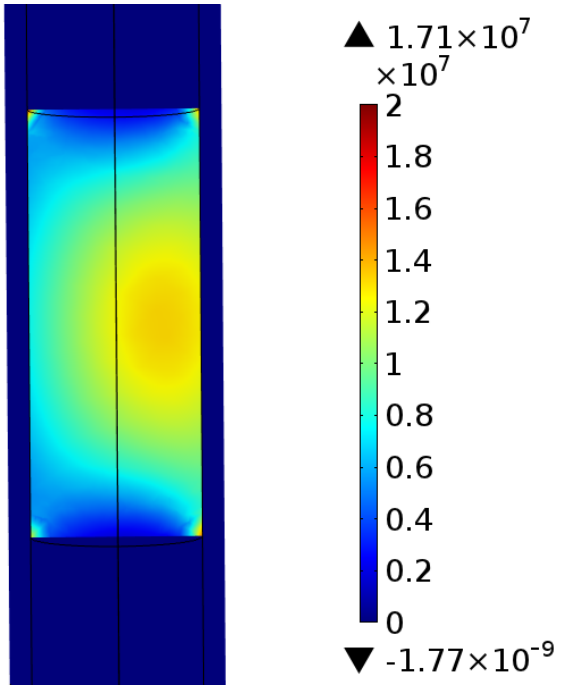
Fujii et al. Journal of Microwave Power and Electromagnetic Energy 48, 89-103, 2014

得られた電力損失密度分布

マイクロ波のエネルギーが、どの部分で損失しているか



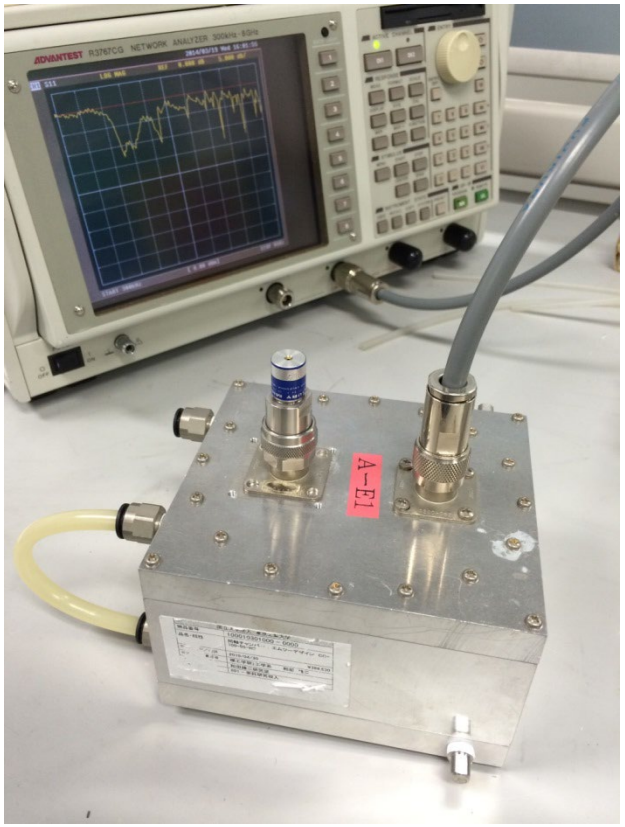
13.7W（触媒層中心部分が600℃）

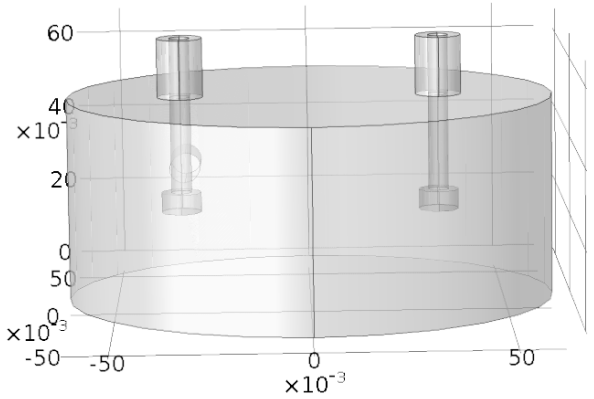


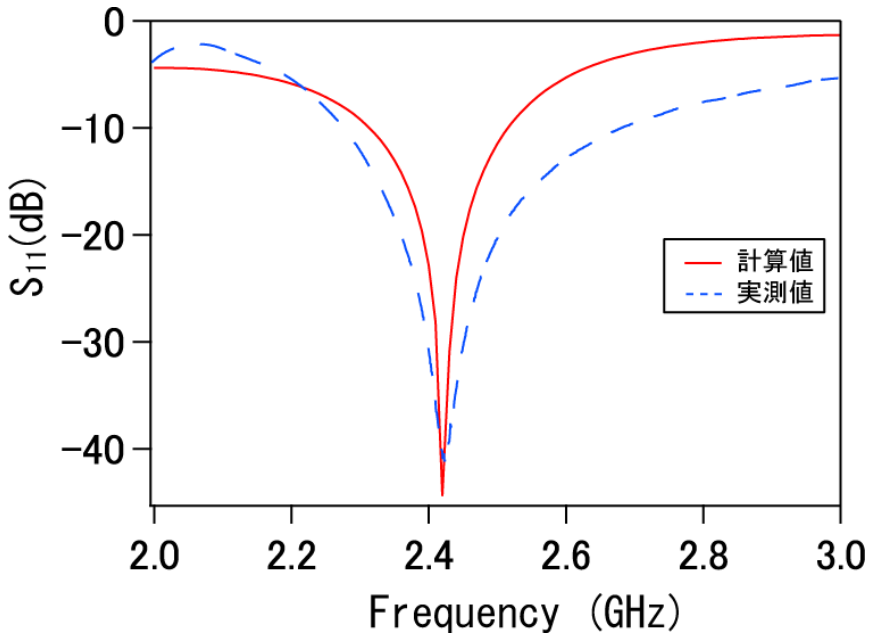
9.05W（触媒層中心部分が500℃）

電磁場分布シミュレーション結果の妥当性

S-パラメータの比較







S-パラメータのピークが同じになるように、シミュレーションモデルのキャビティは、実物よりも2mm大きく設定。

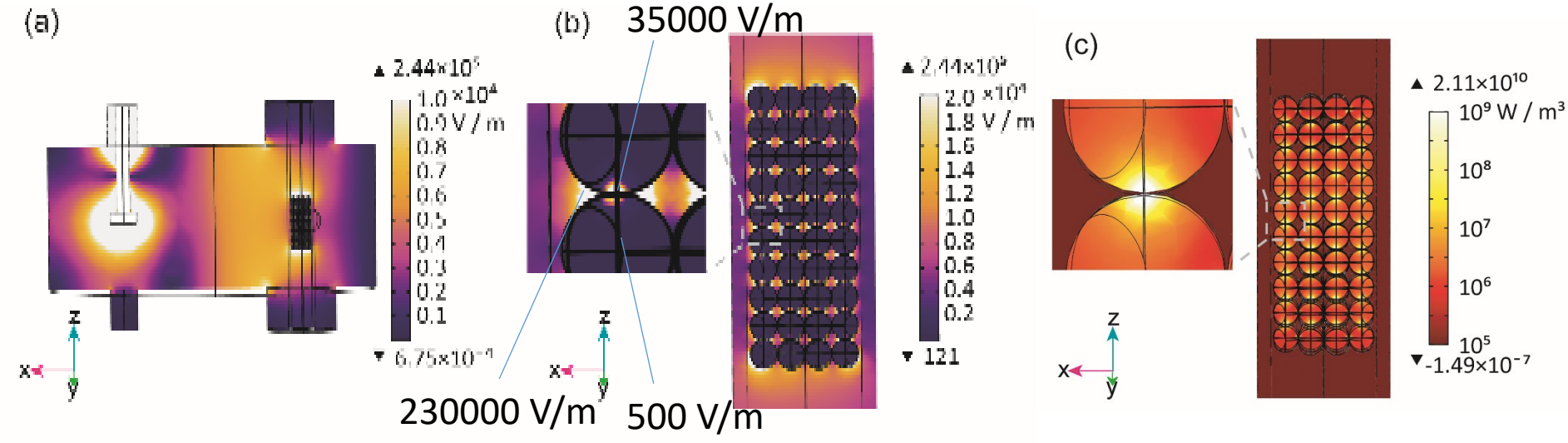
シミュレーション　結果　断面図

触媒球および空隙のアルゴンを含んだ結果

アプリケータ全体の電場分布

モデル触媒層に拡大した電場分布

モデル触媒層に拡大した電力損失密度分布



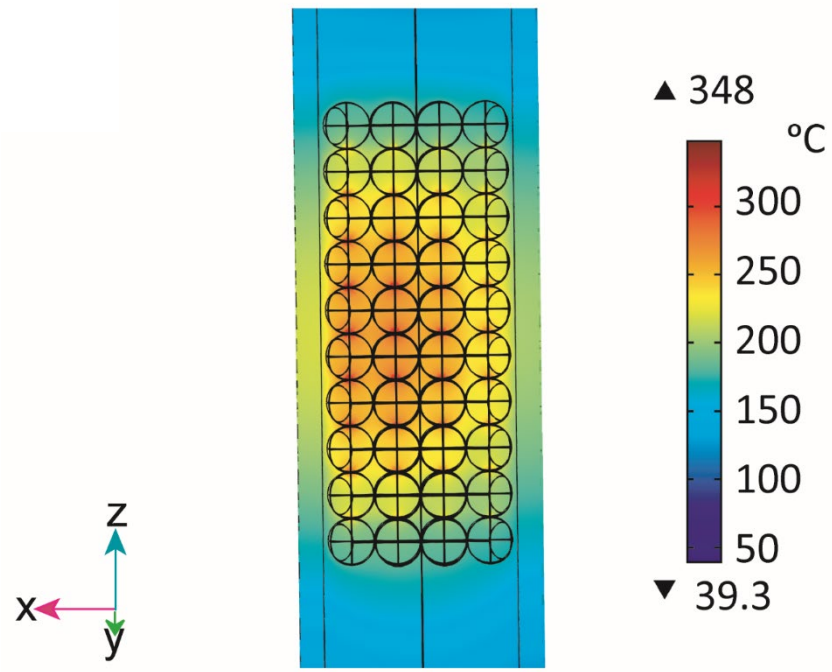
アンテナ付近と触媒層上下に強い電場が発生。触媒層周りでは、アンテナ側の電場がやや強い。

Z 軸方向に並んだ球同士の接触点およびその近傍の空隙において電場が集中。

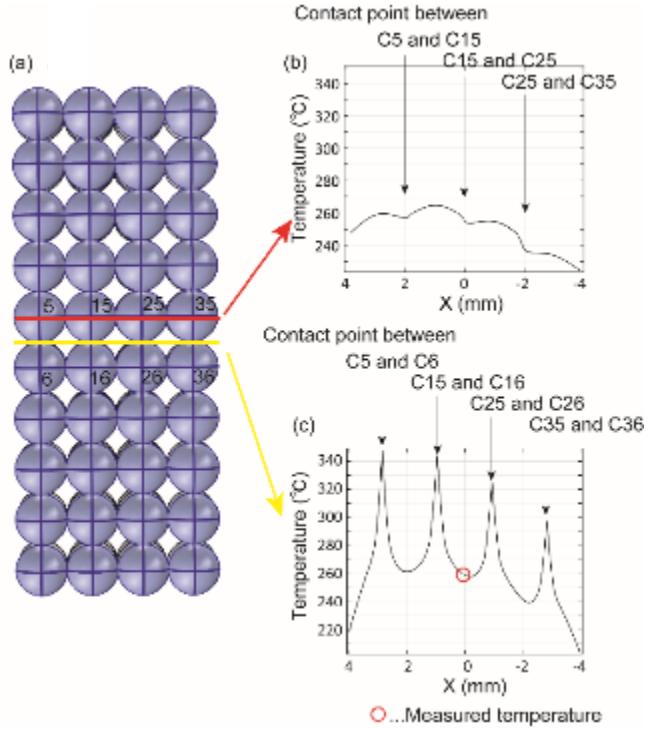
粒子全体から発熱しているものの、粒子同士の Z 軸方向の接触点からの発熱が10^4程強い。

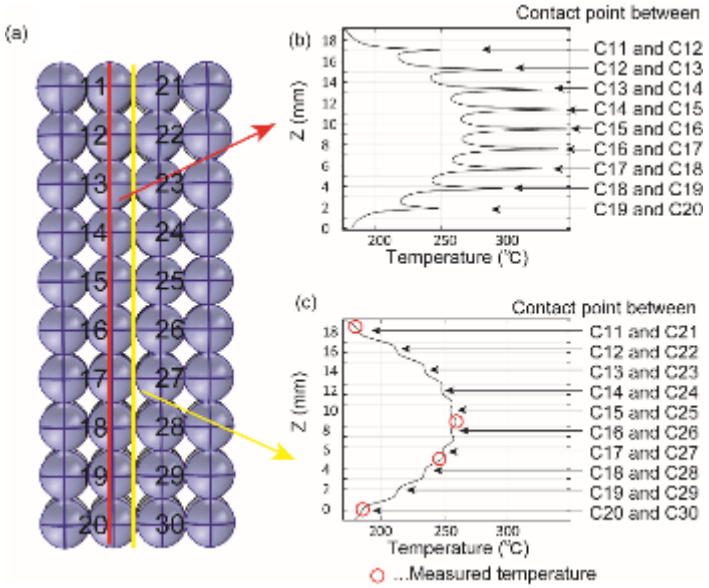
シミュレーション　結果　断面図

モデル触媒層に拡大した温度分布



触媒層の中心部分の温度が、
触媒層外側の温度よりも高い

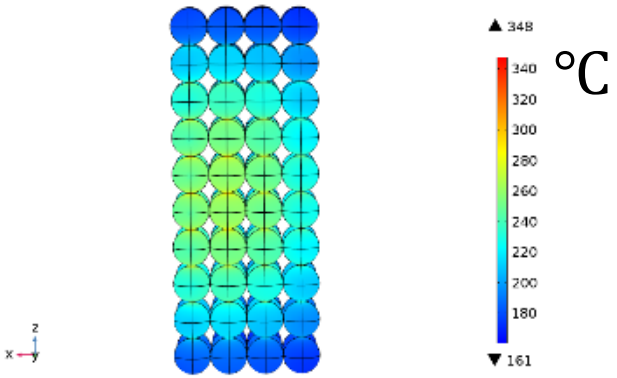




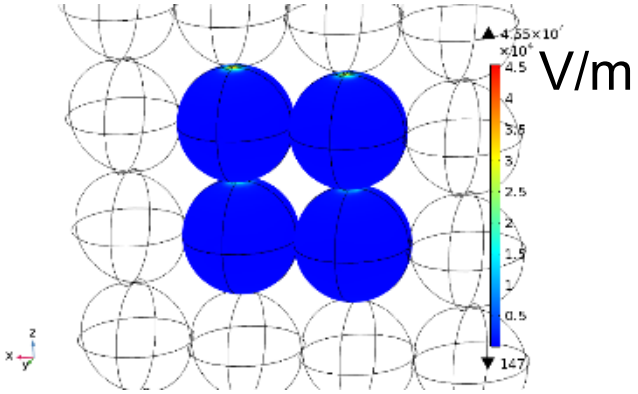
Z軸方向の粒子接触点に局所高温場が形成。
X軸方向の粒子接触点には局所高温場が発生しない。

Localized distribution of microwaves in the catalyst bed

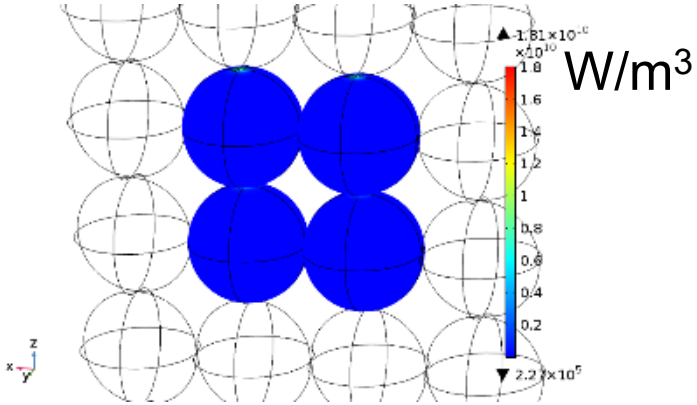
Temperature distribution of the surface of the spheres



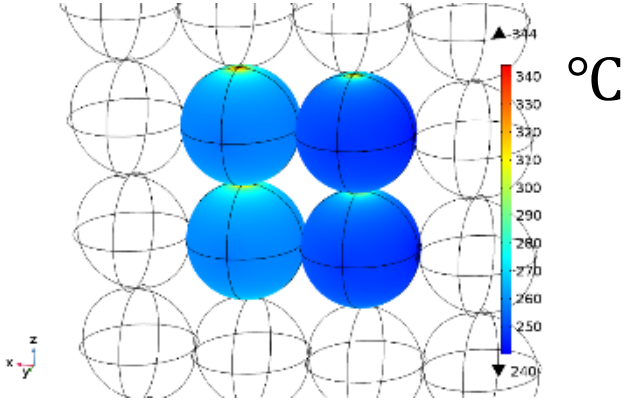
Electric field



Electromagnetic power loss density



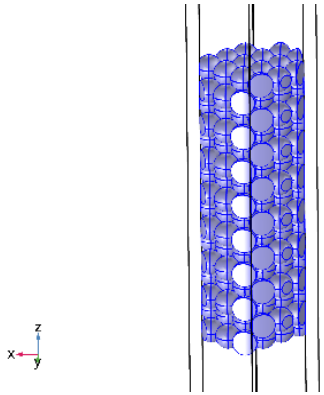
Temperature distributions at the surface



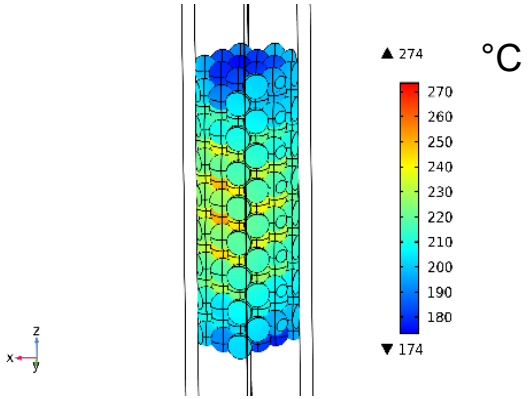
MW: 5W

Localized distribution of microwaves in the catalyst bed

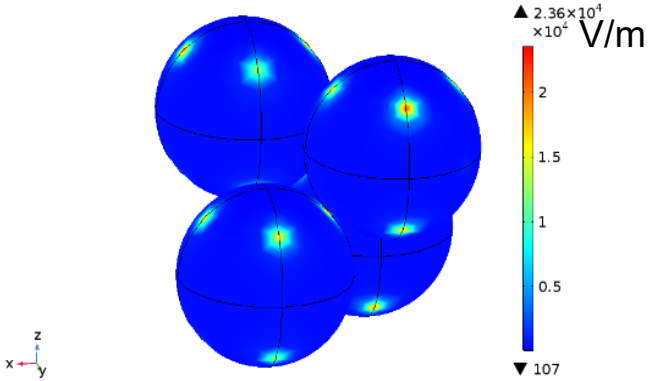
The simulation module of the catalyst bed



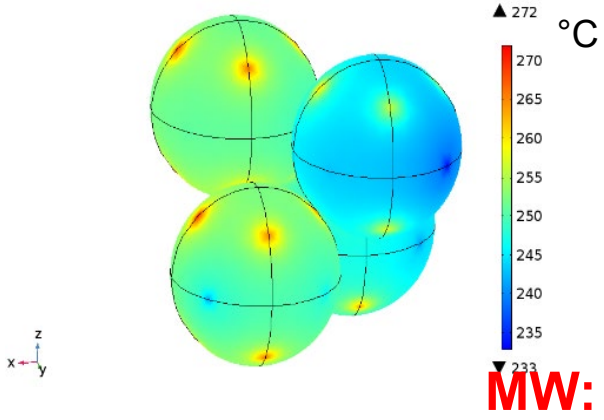
Simulated temperature distributions at the surface of the whole catalyst bed



The electric field distribution



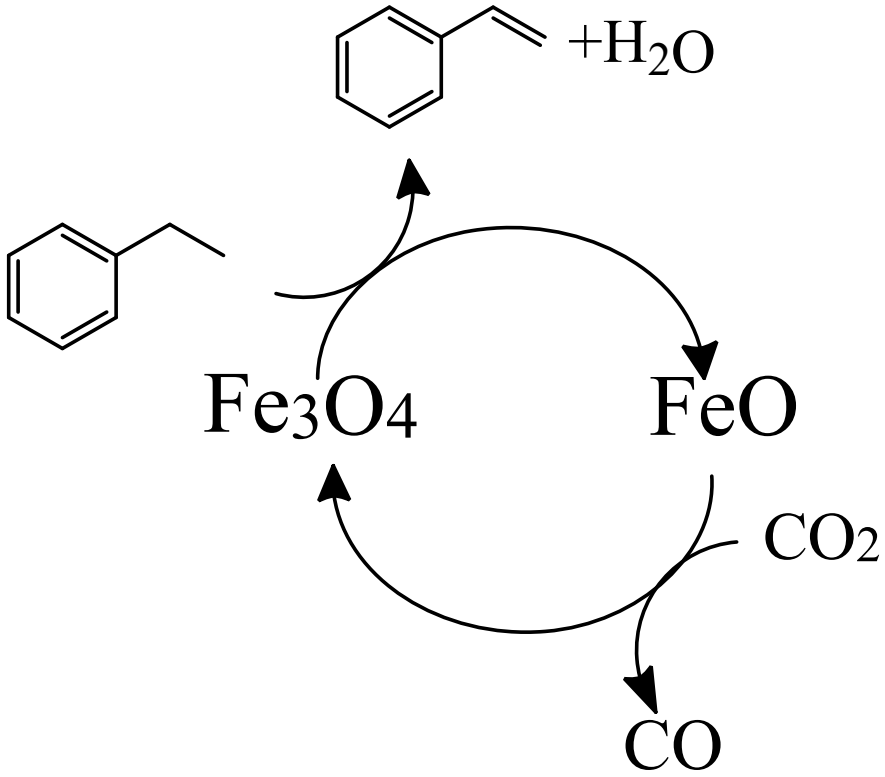
The temperature distribution at the surface



MW: 5W

モデル反応

マグネタイト触媒を用いたエチルベンゼンの脱水素反応



工業的には反応温度600℃以上
MW加熱と相性の良い吸熱反応

用いたマイクロ波照射装置

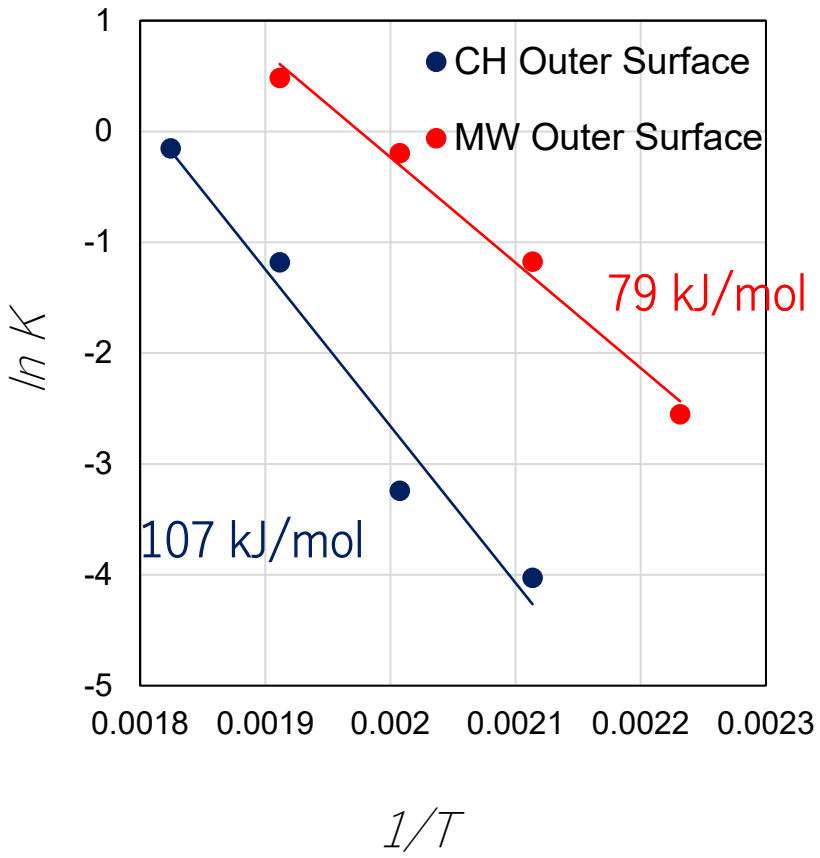
楕円チャンバー型（クロニクス技研）



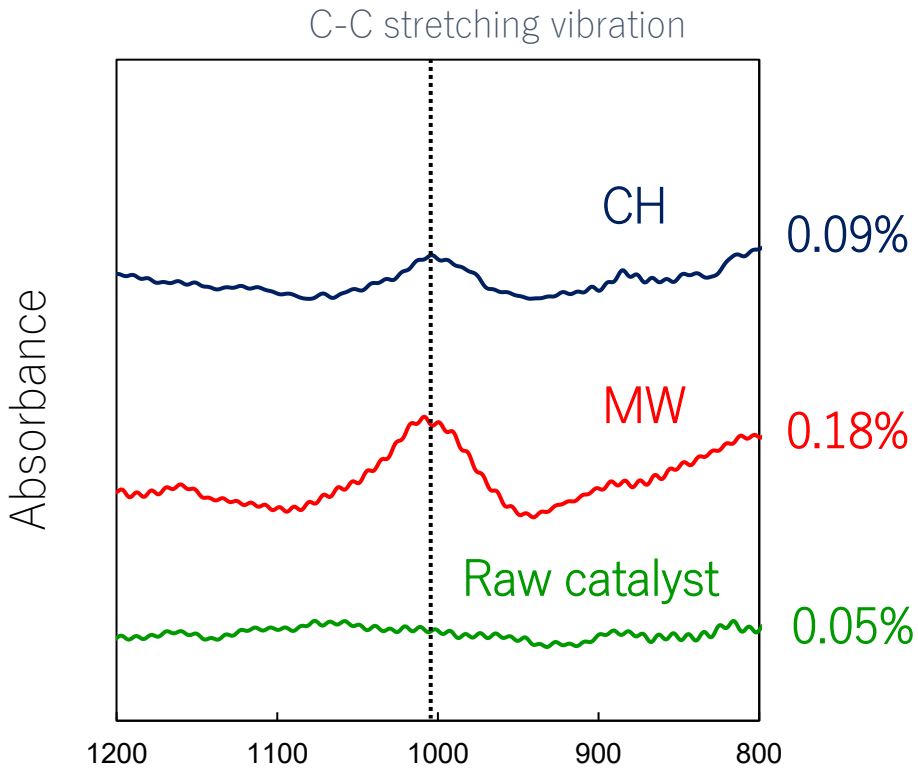
楕円の焦点部分に試料を置いた時に、マイクロ波が集中する
モードが発生するので、効率的な加熱が可能

マイクロ波と電気炉加熱の比較

アレニウスプロット



反応前後のFT-IRスペクトルの変化



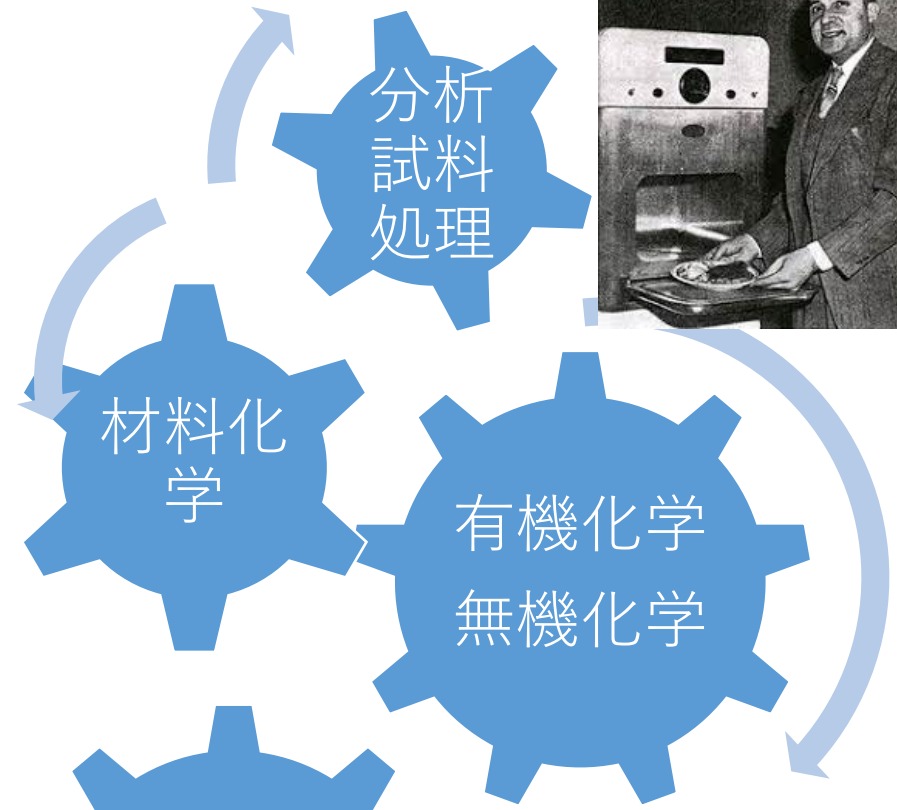
炭素析出量
(CHNS analysis)

Microwaves

- 見かけの活性化エネルギーの低下
- 炭素析出量の増加

- 局所的なホットスポットの可能性
- 従来の温度計では局所の温度を決定することが不可能

マイクロ波利用の化学とは？

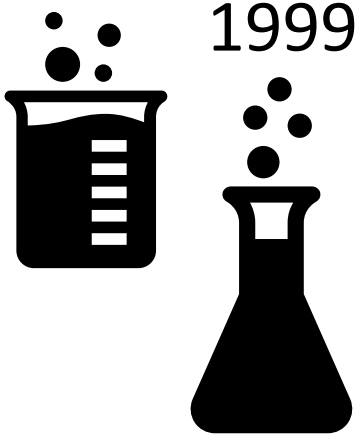


1954年ころ　電子調理器

1970年ころ　ゴム加硫

1986年 有機合成論文

1999年　ナノ粒子論文



2000年以降

・セラミックス高温焼成

・固体触媒高温反応

・製錬技術高温発生　etc.

電磁場分布シミュレーション

電磁場分布計算に必要なパラメータ

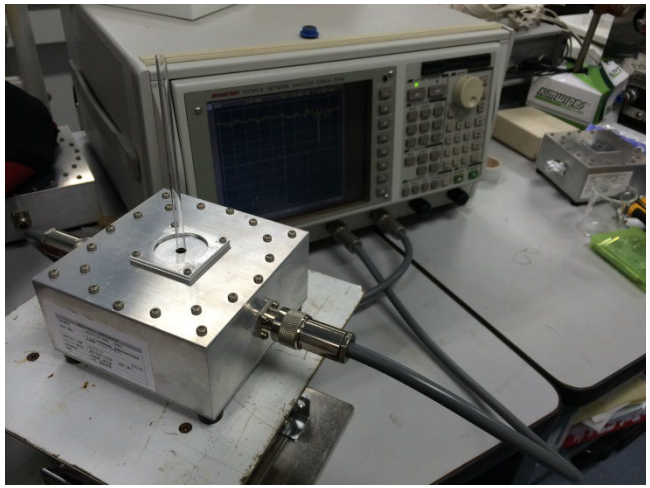
触媒層の複素誘電率ε^*、複素透磁率μ^*、導電率σ

ε^*=16.6-5.40j

μ^*=1.15-0.176j

※摂動空洞共振器法により測定

σ=0　(導電率による発熱は、誘電率による発熱に含まれる)



誘電率の真の値は、電流が流れていない状態での測定でなければ得られない。
摂動空洞共振器法での誘電率の測定では、電流が流れない状態を作れないため、導電率の寄与を含んだ値で得られる。

伝熱シミュレーション

伝熱に関連するパラメータ

触媒層の密度ρ、熱容量Cp、熱伝導率k、反応のアレニウスパラメーターA，Ea

ρ=995 [kg/m^3]※触媒層の重さ1.0g / 円柱の体積 4×4×π×20 [mm^3]

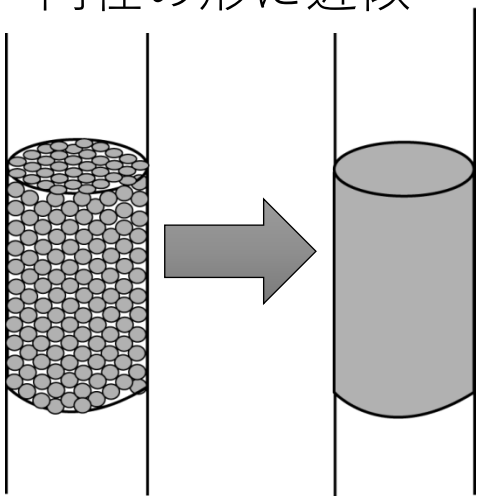
Cp=(10.2T+86.1)×232/1000　[J/(kg K)]　※化学便覧より

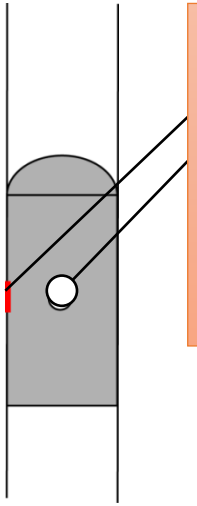
k=0.57（600℃），0.45（500℃）[W/(m K)]　※バルクのFe_3O_4は3

A=4.18×10^7[L/(kg h)], Ea=82.45[kJ/mol] ※電気炉での測定

ΔH=123.6[kJ/mol]

円柱の形に近似





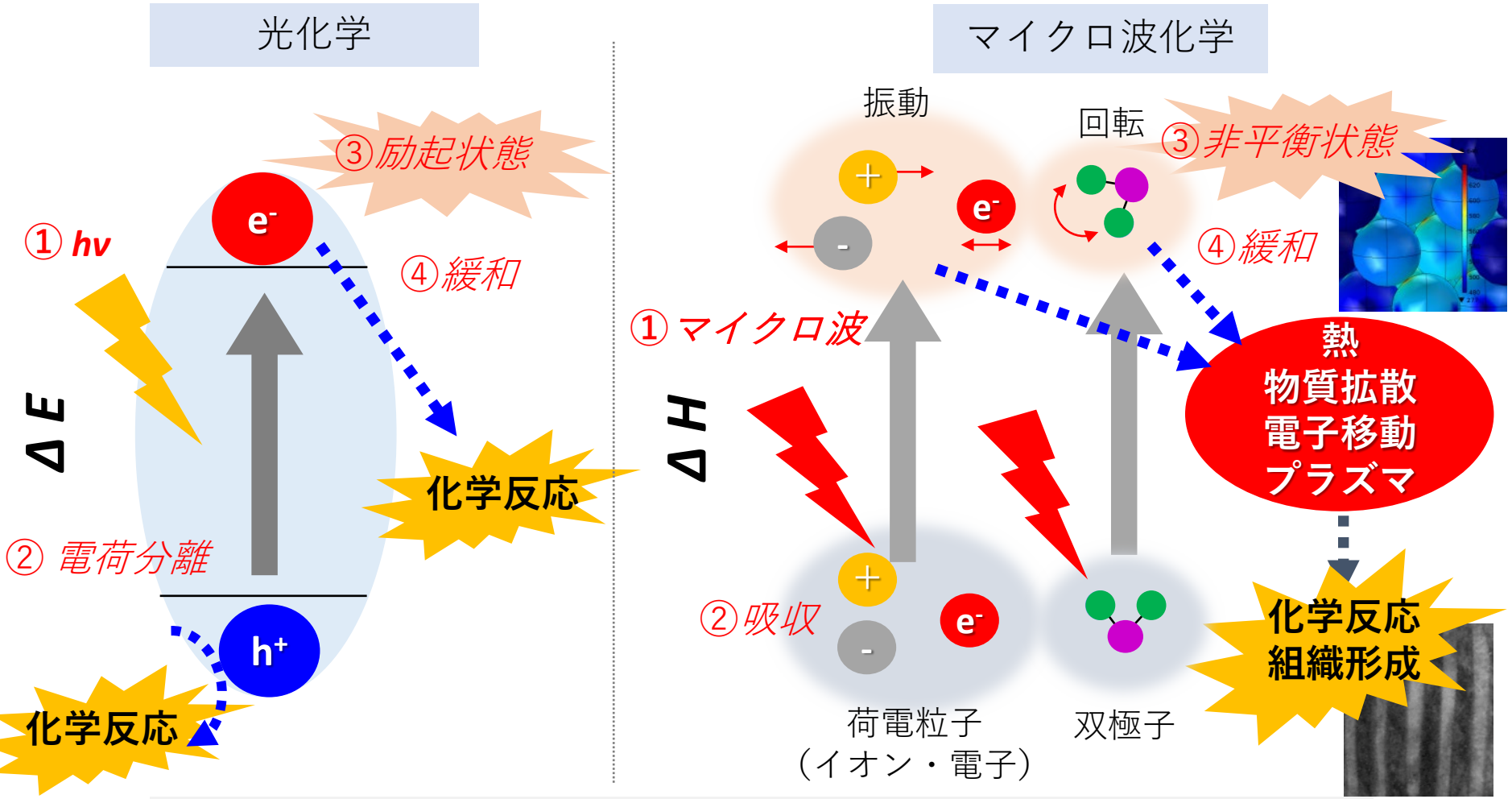
この２点において、シミュレーションによる計算値が温度の実測値と合うようにマイクロ波の出力と熱伝導率を決定

検証の背景

・なぜこの検証を行ったか？
・課題
・目的

1. タイトルスライド (1枚)
    - タイトル
    - 発表者名および所属先
    - 画像 (画像エクスポートガイドラインを参照)
    - 注記 タイトルスライドはカンファレンスのフォーマットに合わせて調整されますが, 提出された内容自体は変更されません.
2. 検証内容の背景 (1枚以上)
    - なぜこの検証を行ったのか?
    - 課題は何か?
    - 目的は何か?
3. 検証方法および COMSOL Multiphysics® の用途 (1枚以上)
    - どのような検証を実施したか? 実験とシミュレーションを組み合わせたか?
    - なぜシミュレーションを使用したのか?
    - COMSOL Multiphysics® をどのように使用したか?
    - どのような解析を実施したか?
4. 結果 (1枚以上)
    - どのような結果が示されたか?
5. 結論 (1枚以上)
    - 検証によりどのような知見が得られたか?
    - 定量的なデータがあれば含めてください.

【マイクロ波非平衡反応場の学理形成と課題】



- **非平衡状態が局所的かつ短時間**のため、直接観測が困難
- 原理の理解と制御因子の明確化が**化学反応制御手法への鍵**