マイクロ波加熱による$Ca(OH)_2$/SiC混合ペレットの脱水反応の電磁場・伝熱・反応連成解析と加熱効率評価

Massimiliano Zamengo[1] ○ and Junko Morikawa[1]

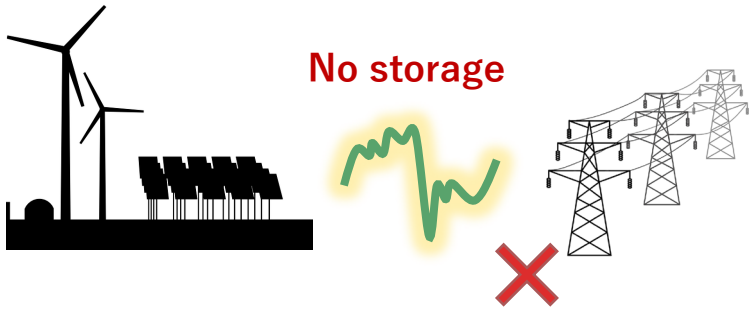
[1] School of Materials & Chemical Technology, Science Tokyo

2026/10/21-22 (Tue-Wed)
COMSOL Conference 2026 Tokyo

Institute of SCIENCE TOKYO

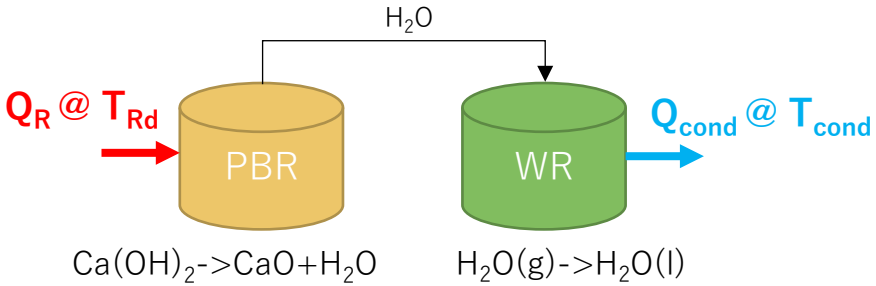
化学蓄熱の必要性

- 再生可能エネルギー発電の拡大により、電力系統の安定化が課題となっている。
- 発電量および周波数の変動が増加している。
- 電力事業者は運用戦略の調整を迫られており、出力抑制、利益損失、電力価格の変動を招いている。



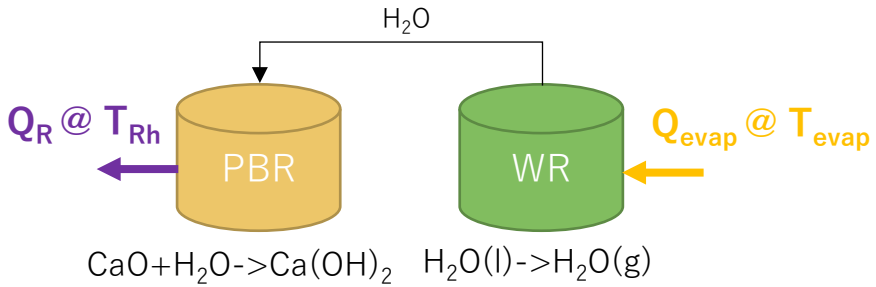
- エネルギー貯蔵技術が必要　（Power-to-Heat – Power-to-Heat-To-Power）

Heat Storage Mode – Dehydration reaction



$$T_{dehydration} \approx 450 - 500°C$$

Heat output mode – hydration reaction



$Q_R = 104$ kJ/mol　$Q_{evap} = Q_{cond} = 41$ kJ/mol

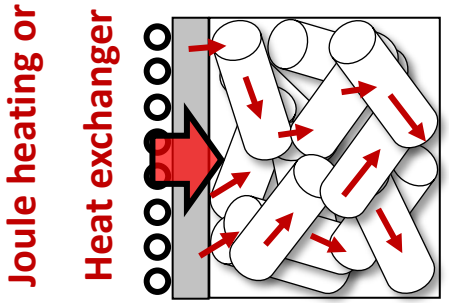
PBR: packed bed reactor; WR: water reservoir

- 可逆反応（吸熱・発熱反応）を利用　→ 必要時に熱利用可能、長期貯蔵に適している。
- 安全・低コスト・豊富な材料を利用可能。

課題：低い熱伝達性能（ボトルネック）

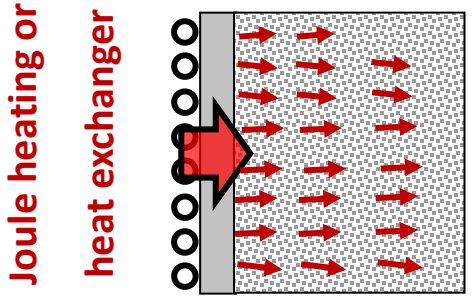
Institute of SCIENCE TOKYO

Packed bed of pellets



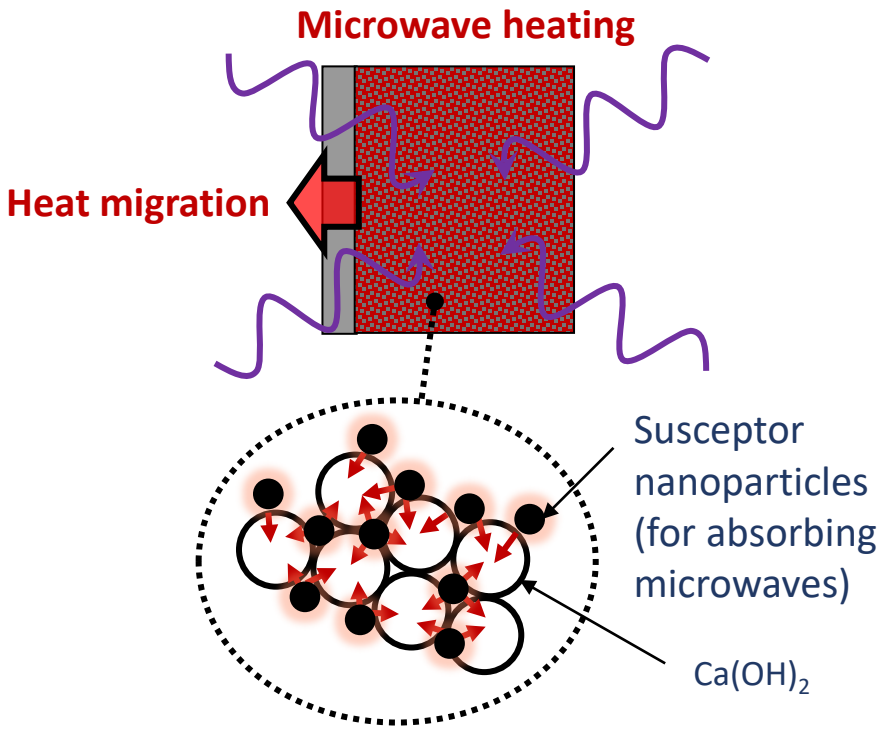
- 低い熱伝導率（0.2 W m^{-1} K^{-1}）
- 充填層と熱交換器間の接触性が悪い

Heat transfer-enhanced composites



- 高い熱伝導率（~2 W m^{-1} K^{-1}）
- 良好な密着接触性

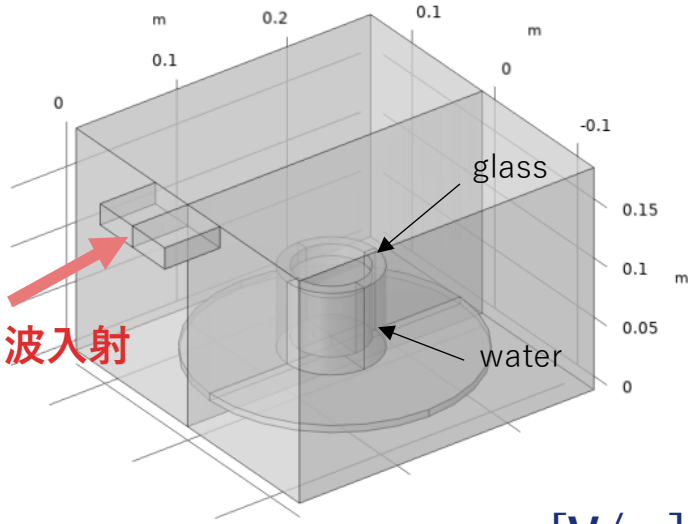
Microwave heating (electric field $\vec{E}$)



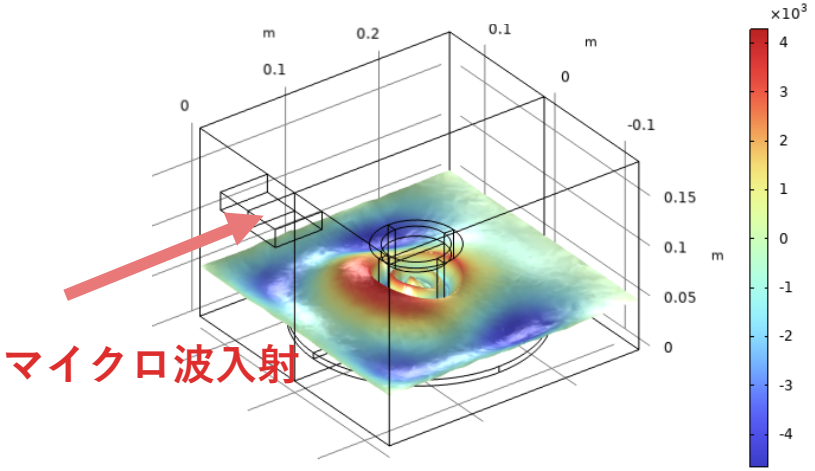
- 表面からの熱交換には、高い熱伝導率と充填層との良好な接触が必要である。
- マイクロ波は材料内部を直接加熱できる（内部発熱）。
- **マイクロ波加熱により、より高速かつ均一な加熱が期待される。**

マイクロ波加熱の方式

Multimode（加熱のみ）

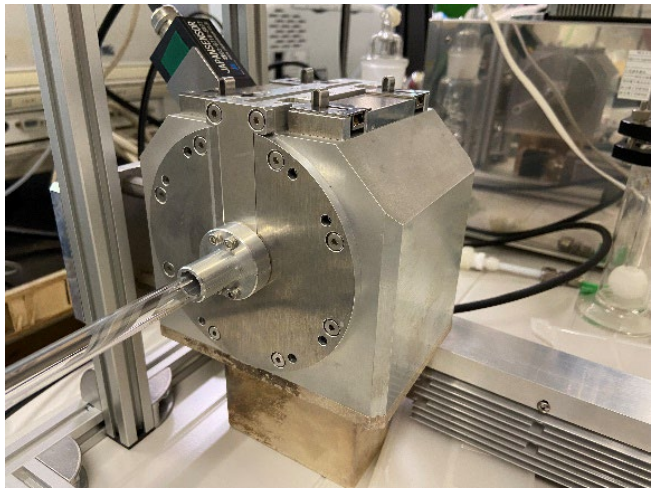


電界強度 [V/m]

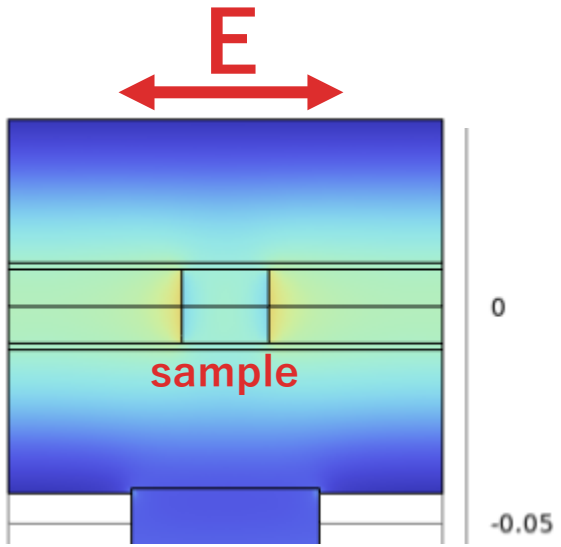


Single mode（共振キャビティTM_{010}）＋誘電率測定

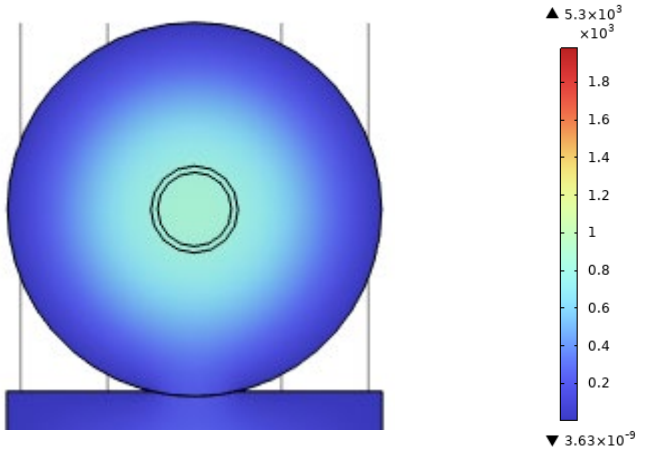
共振周波数～ 2.45 GHz



交流電場が軸方向に集中



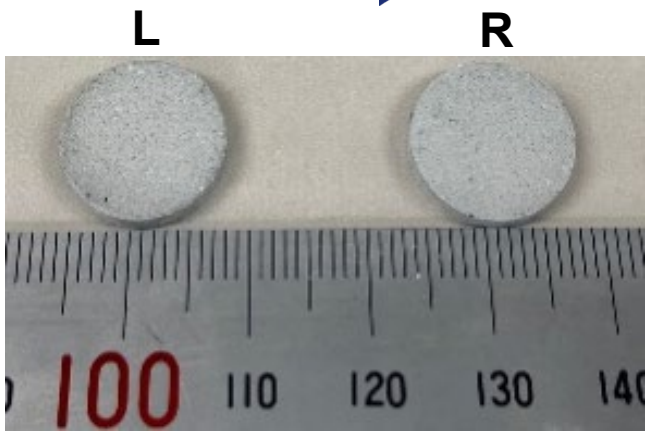
電界強度 [V/m]



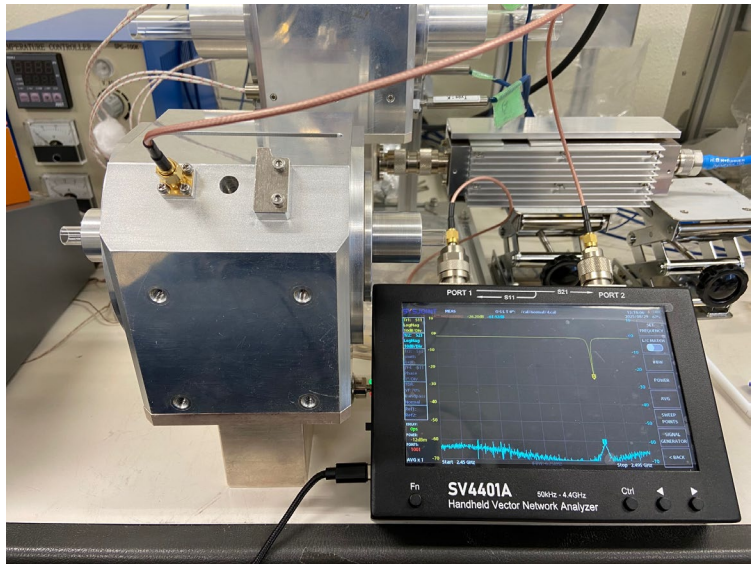
材料・試料

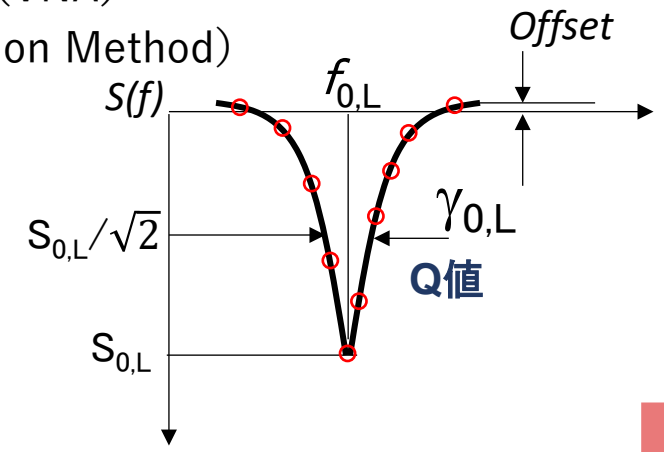
- $Ca(OH)_2$: Sigma Aldrich, purity >95%
- SiC: Fujifilm, form β, 50 nm
- Pellet ϕ=14mm H≈3 mm、SiC wt. 7%

Pellet ID	$Ca(OH)_2$ weight [mg]	SiC weight [mg]	Pellet weight [mg]	Height [mm]	Volume [cm^3]	Apparent density [$g \cdot cm^{-3}$]	Porosity [-]
CS-c-L	545	41	586	3.10	0.4772	1.159	0.45
CS-c-R	545	41	586	3.10	0.4772	1.123	0.45



- 誘電率測定
- ベクトルネットワークアナライザ（VNA）
- 空洞共振摂動法（Cavity Perturbation Method）





f_0: resonance frequency obtained **before** inserting the sample → Q_0: f_0/γ_0

f_L: resonance frequency obtained **after** inserting the sample → Q_L: f_L/γ_L

Lorentz fit

$$L(f) = \frac{S_{0,L}}{\left(1 + \frac{f - f_{0,L}}{\gamma_{lorentz}}\right)^2}$$

Gauss fit

$$G(f) = S_{0,L}\exp\left[4 * ln2 * \left(-\frac{f - f_{0,L}}{\gamma_{gauss}}\right)^2\right]$$

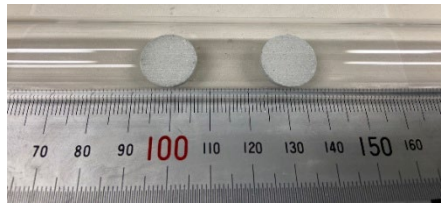
Pseudo-Voigt fit

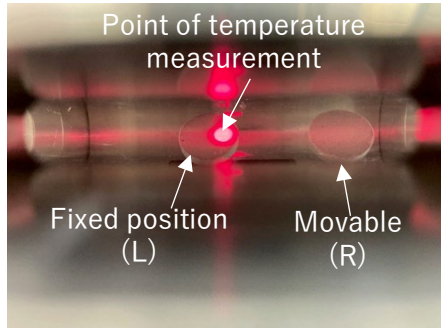
$$S(f) = A - [\eta \cdot L(f) + (1 - \eta) \cdot G(f)]$$

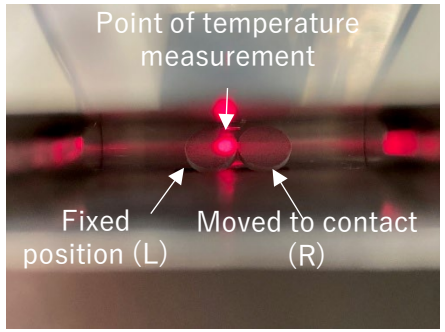
Material	f_0 [MHz]	Q_0	f_L [MHz]	Q_L	ε '	ε ''
CS-c-L	2497.0	1722.0	2490.1	1346.0	2.695	0.100
CS-c-R	2497.0	1722.0	2490.0	1310.5	2.717	0.112

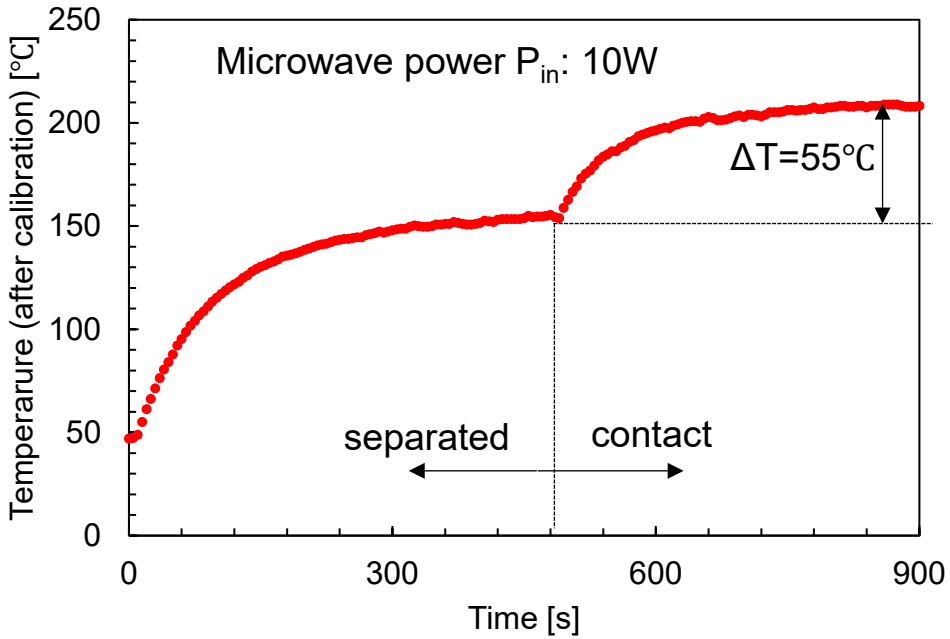
ペレット接触効果

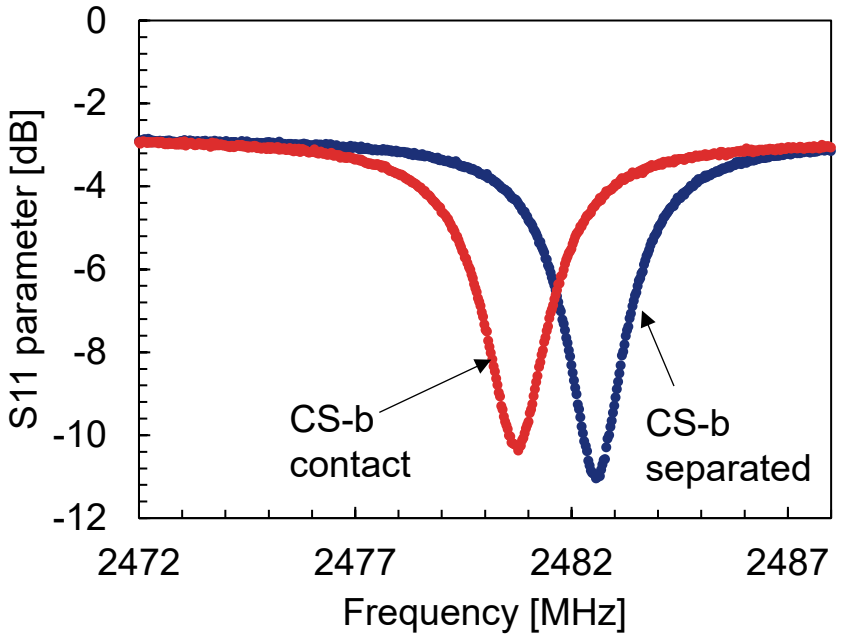
- 同一の入力電力条件下でペレット同士を接触させると、温度上昇が確認された。
- 共振周波数およびQ値の変化から、ペレット接触時には材料内部での電力損失が増加していることが示された。







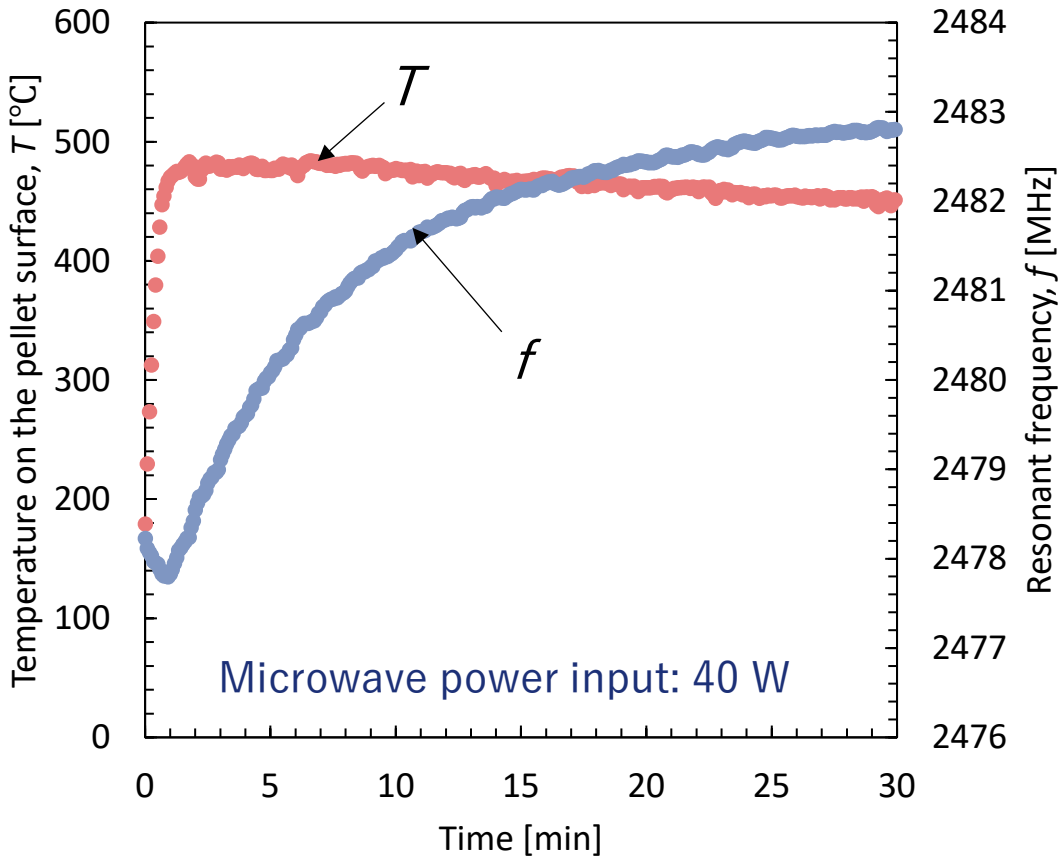


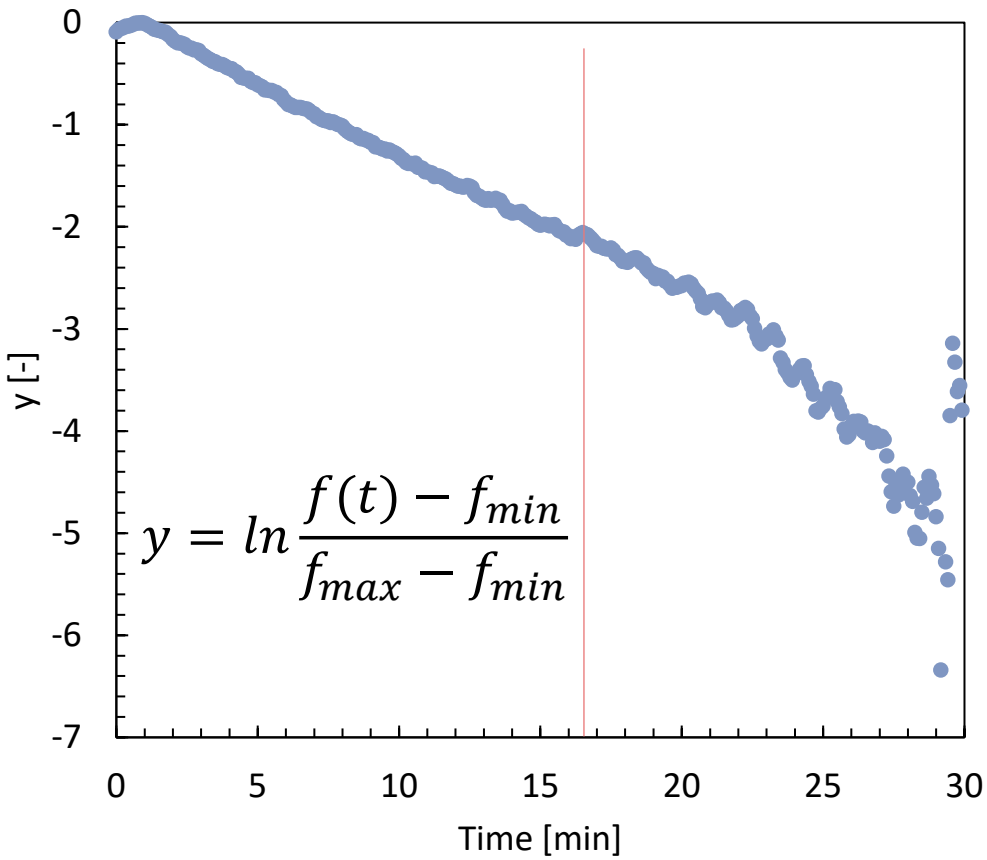


Material	Resonant frequency [MHz]	Q factor [-]
CS separated	2482.5	1198.9
CS contact	2480.5	1096.9

脱水実験

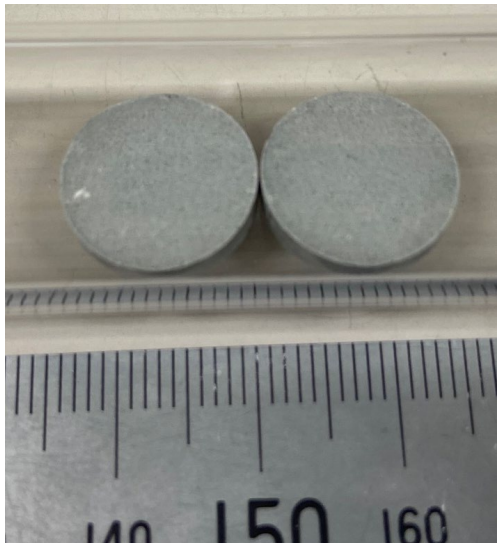
- マイクロ波電力印加後1分以内に、450°Cを超える温度が確認された。
- 共振周波数の変化は、加熱開始後20分以内において、脱水反応と同様に一次反応則に従うことが確認された。
- 共振周波数の変化は、重量測定（gravimetry）の代わりに脱水反応の追跡に利用可能である。





転化率およびエネルギー貯蔵密度

- 実験結果より、蓄熱エネルギー密度は約1 GJ m^{-3}と推定された。
- 加熱開始後5分間における平均蓄熱出力密度は、1.6 kW/L_{mat}であった (1.6 MW/m^3)。



Initial weight: 1.172g



Final weight: 1.011g

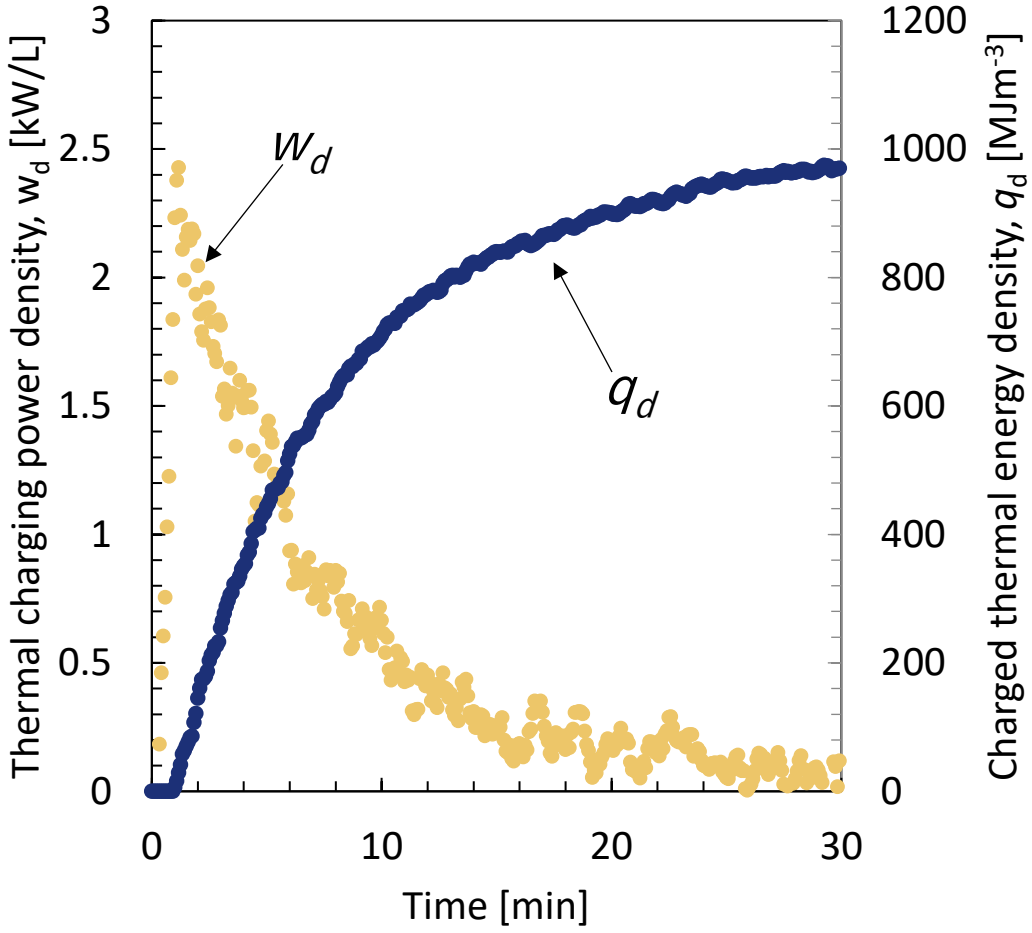
$$x_d = \frac{\Delta m / M_{H_2O}}{m_{Ca(OH)_2,ini} / M_{Ca(OH)_2,}} = \mathbf{0.607}$$

Charged thermal energy density

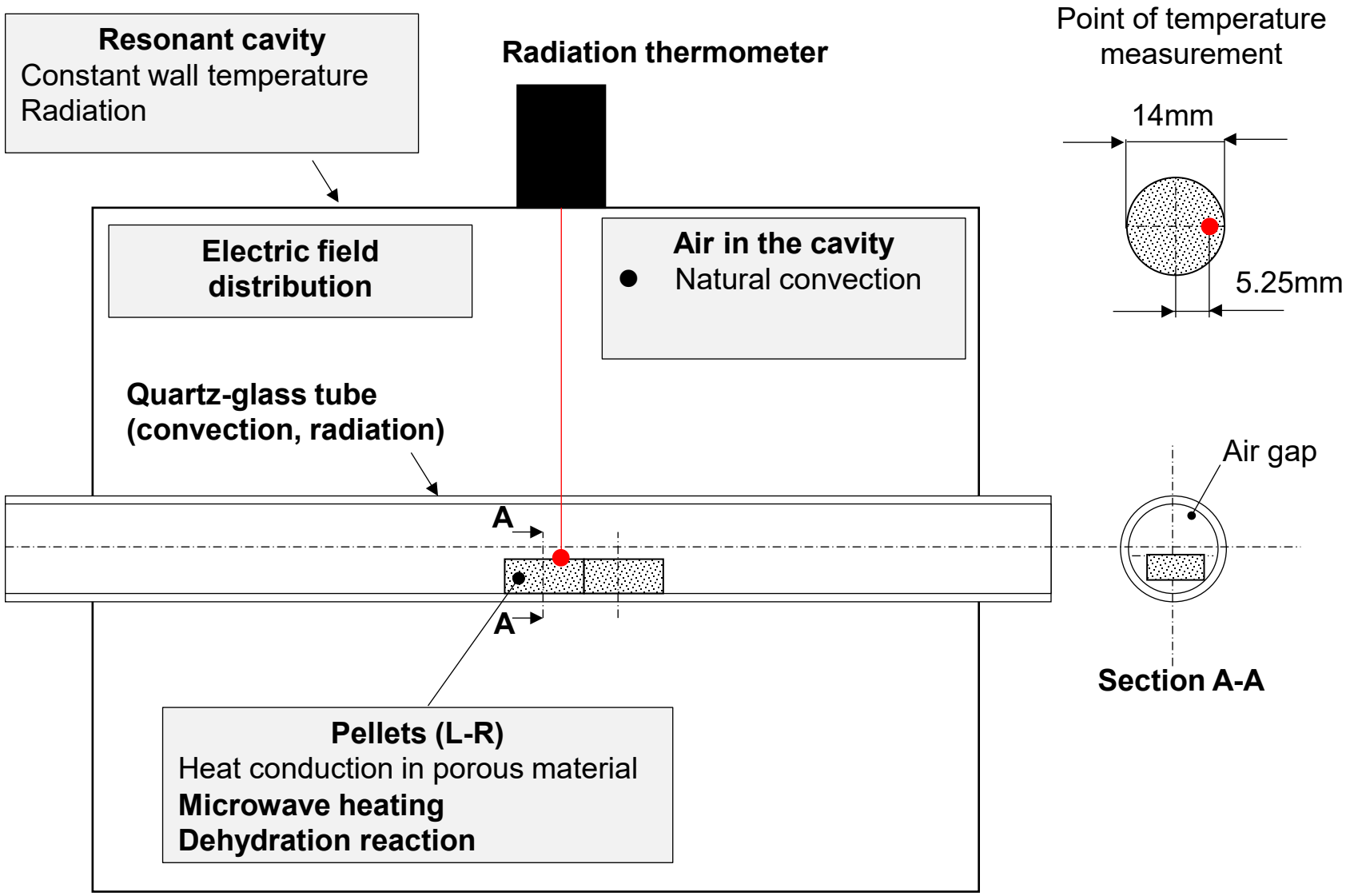
$$q_d = \Delta H \cdot \frac{m_{Ca(OH)_2,ini}}{M_{Ca(OH)_2}} \cdot \frac{x_d}{V_{sample}}$$

Thermal charging power density

蓄熱出力密度 $w_d = \frac{q_d}{dt}$



Numerical modelling of the cavity



Calculation on two steps:

1. Frequency scan
   - Calculation of electric field distribution E
2. Time dependent
   - Microwave heating is considered as heat source term in the material.

$$\dot{q}_{mw} = 2\pi f \varepsilon_0 \varepsilon' tan\delta (1-\psi) E^2$$

Numerical model of dehydration

Reaction kinetics: reaction rate from Schaube et al. (2012)

With partial water pressure P_{eq}=2.3kPa
reaction occurs for T>T_{eq}=504°C

$$P_{eq} = 10^5 \cdot exp\left(-\frac{12845}{T_{eq}} + 16.508\right)$$

x_d reacted fraction

$$\begin{cases} \frac{dx_d}{dt} = 1.9425 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(-\frac{187.88 \cdot 10^3}{RT}\right) \cdot \left(1 - \frac{P}{P_{eq}}\right)^3 \cdot (1 - x_d) & xd < 0.2 \\ \frac{dx_d}{dt} = 8.9588 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(-\frac{162.62 \cdot 10^3}{RT}\right) \cdot \left(1 - \frac{P}{P_{eq}}\right)^3 \cdot 2 \cdot (1 - x_d)^{0.5} & xd > 0.2 \end{cases}$$

Heat transfer equation

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \nabla^2 T + \dot{q}_d + \dot{q}_{mw}$$

Endothermic heat of dehydration

Enthalpy change of dehydration

Density

$$\dot{q}_d = -\Delta H \cdot (1 - \psi) \cdot (1 - \vartheta) \cdot \frac{\rho_{Ca(OH)_2}}{M_{Ca(OH)_2}} \frac{dx_d}{dt}$$

Volume fraction of SiC

Pellet porosity

Heat source (microwave heating)

$$f = \frac{\omega}{2\pi} = 2.5 \cdot 10^9\ Hz$$

$$\dot{q}_{mw} = 2\pi f \varepsilon_0 \varepsilon' tan\delta (1 - \psi) E^2$$

Electric field intensity

Dielectric constant ε*=ε'-iε''

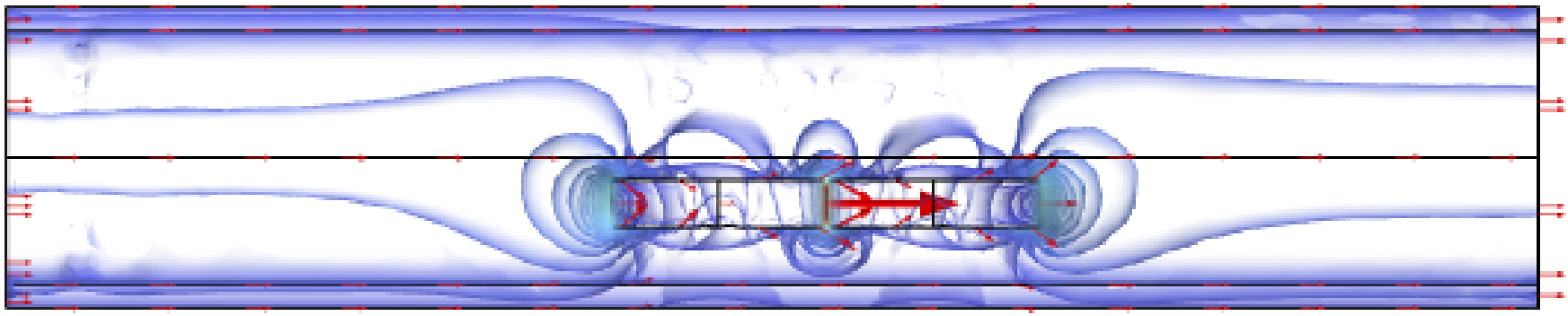
Effective thermal conductivity

- Before experiments: λ_{ini} =0.30 $Wm^{-2}K^{-1}$
- After the experiments: λ_{end}=0.15 $Wm^{-2}K^{-1}$ (assumption) $\lambda_{eff=}\lambda_{ini} \cdot (1 - x_d) + \lambda_{end} \cdot x_d$

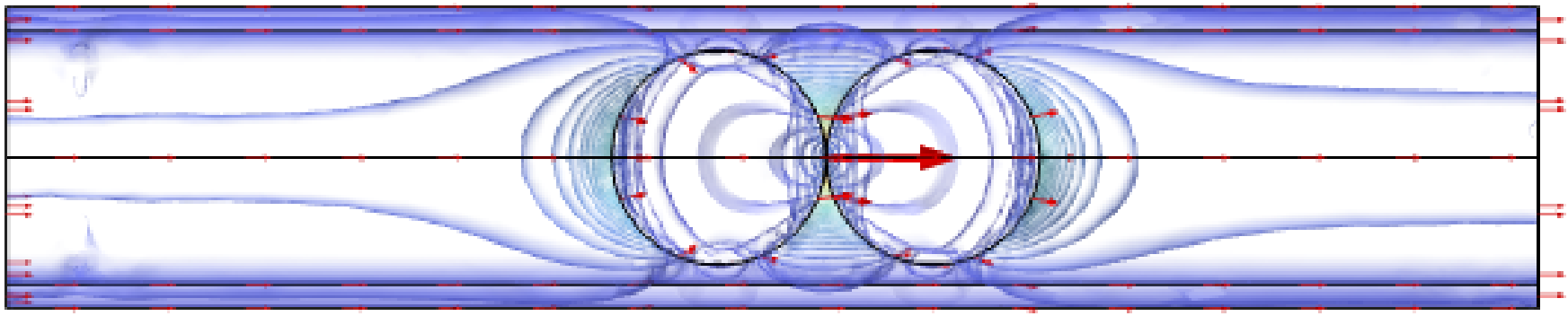
電磁場の可視化

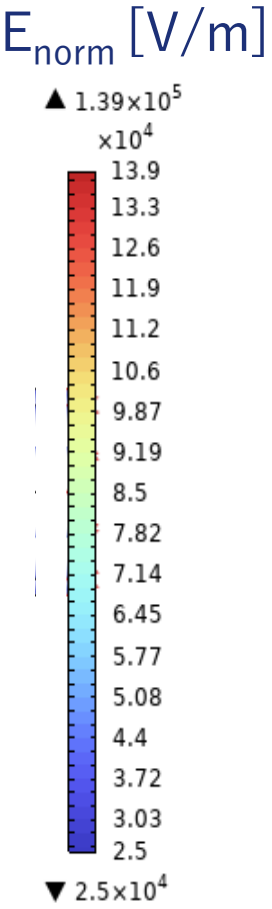
- ペレットの存在により電磁場が摂動される。
- ペレット接触界面において電磁場の集中が確認された。
- 局所的な電界集中により、接触点近傍でのエネルギー吸収が増加する。
- 大きな電界損失は局所的な温度上昇として現れる。

E field, front view



E field, top view





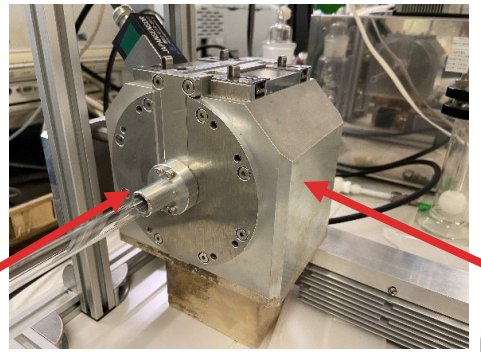
温度分布結果（全体）

- マイクロ波加熱により、ペレット近傍で急速な温度上昇が生じる。
- 石英ガラス管を通した放熱により、キャビティ内部に高温空気のプルーム（熱損失）が発生する。

Time=0 s

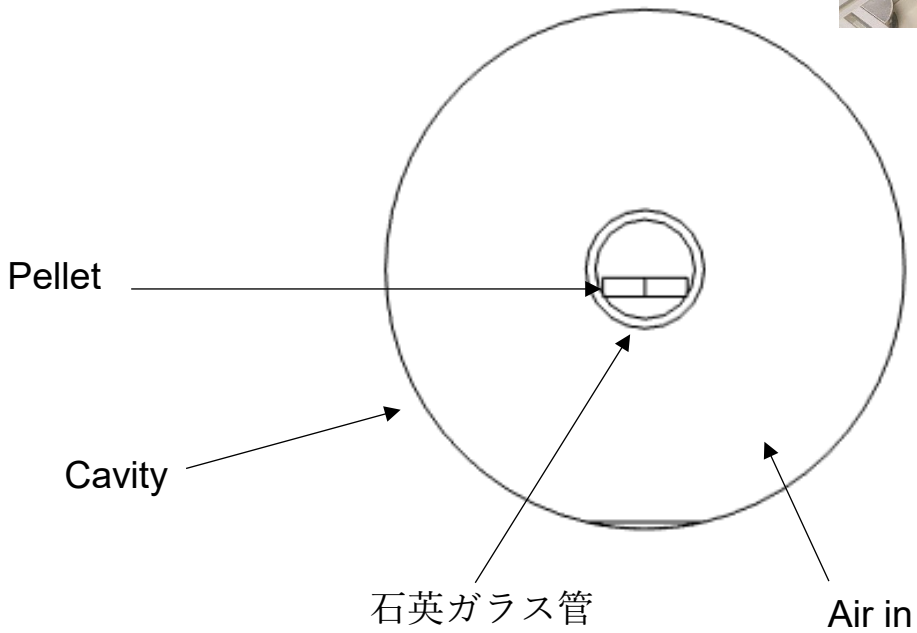
温度分布

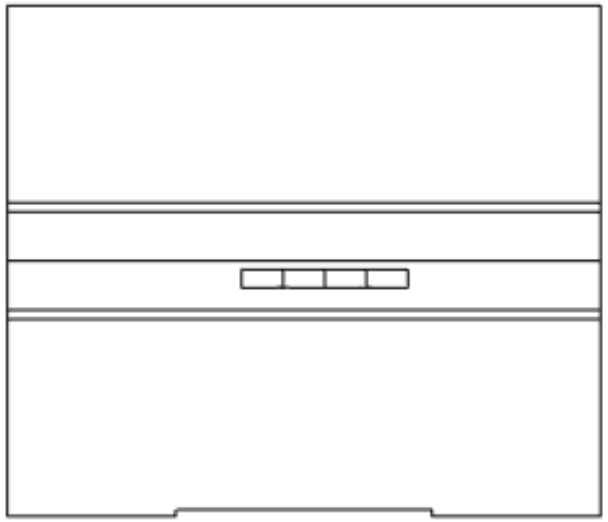
T [°C]



Side

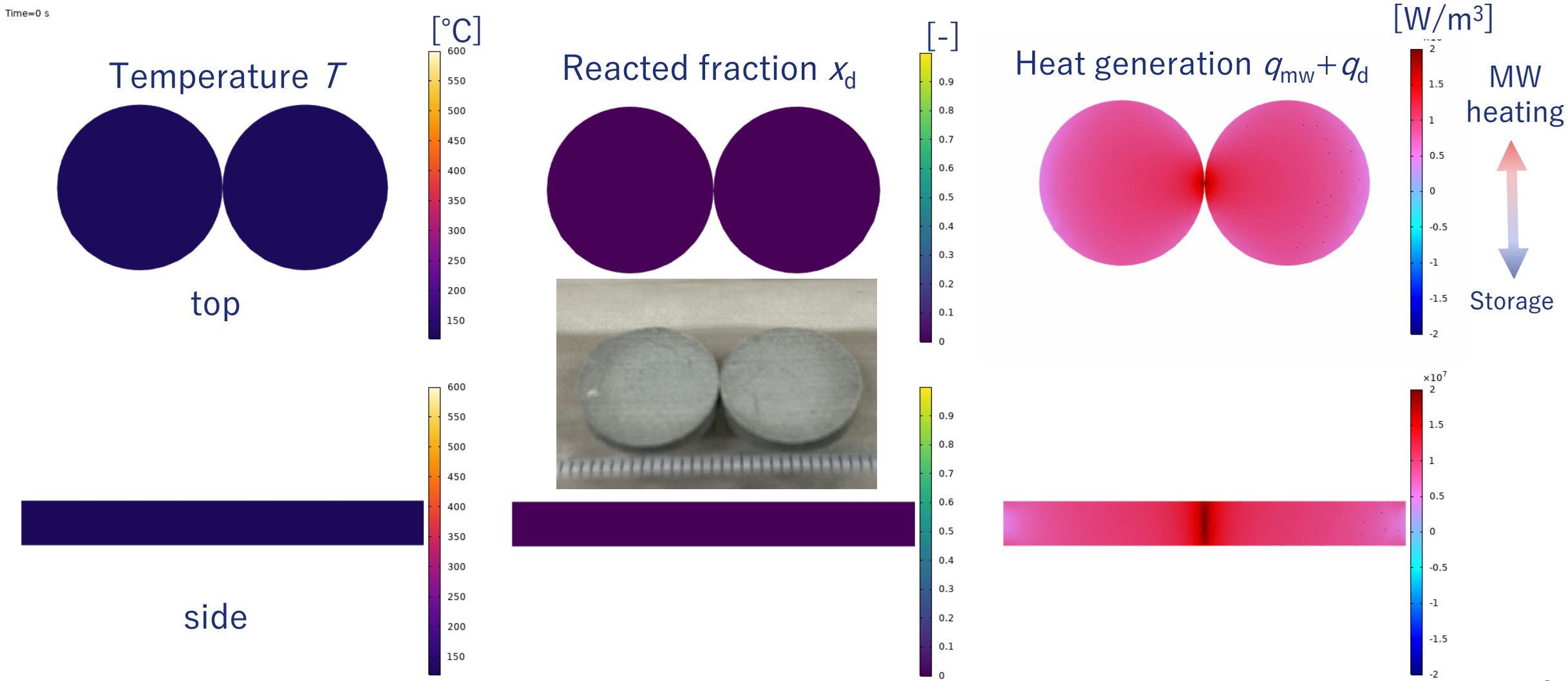
Front





ペレット領域におけるシミュレーション結果

数値解析により、ペレット接触部におけるホットスポット形成および反応 ホットスポットの伝播を説明できる。

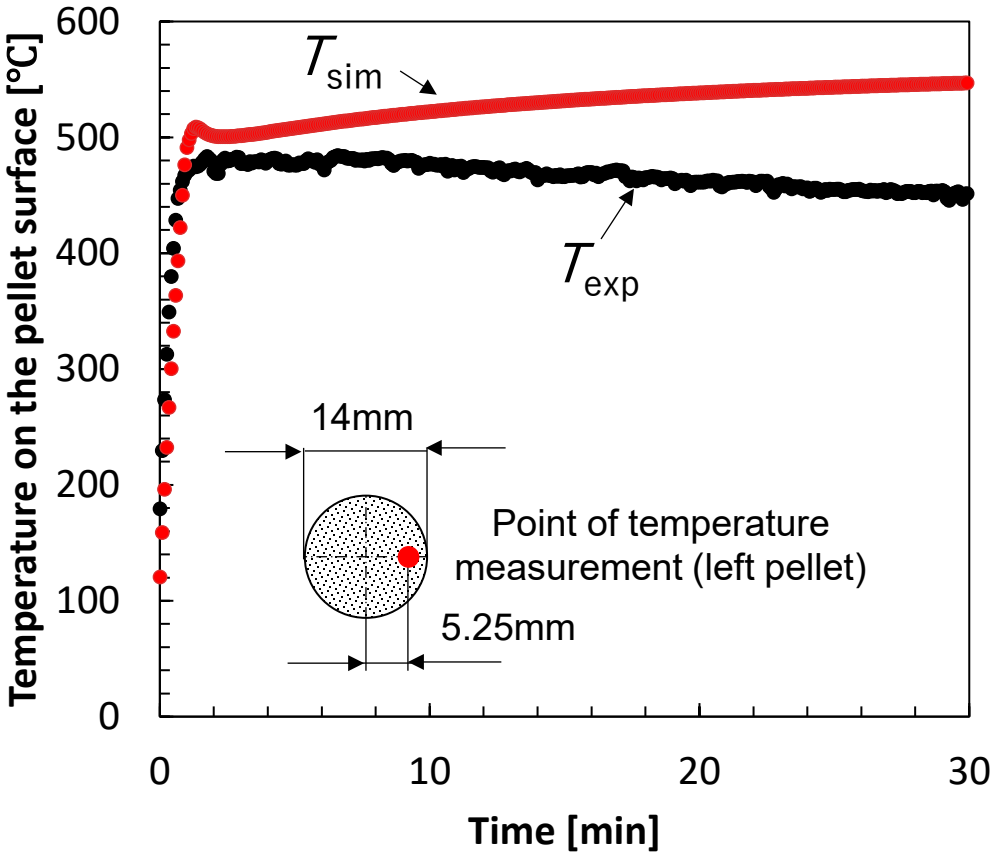


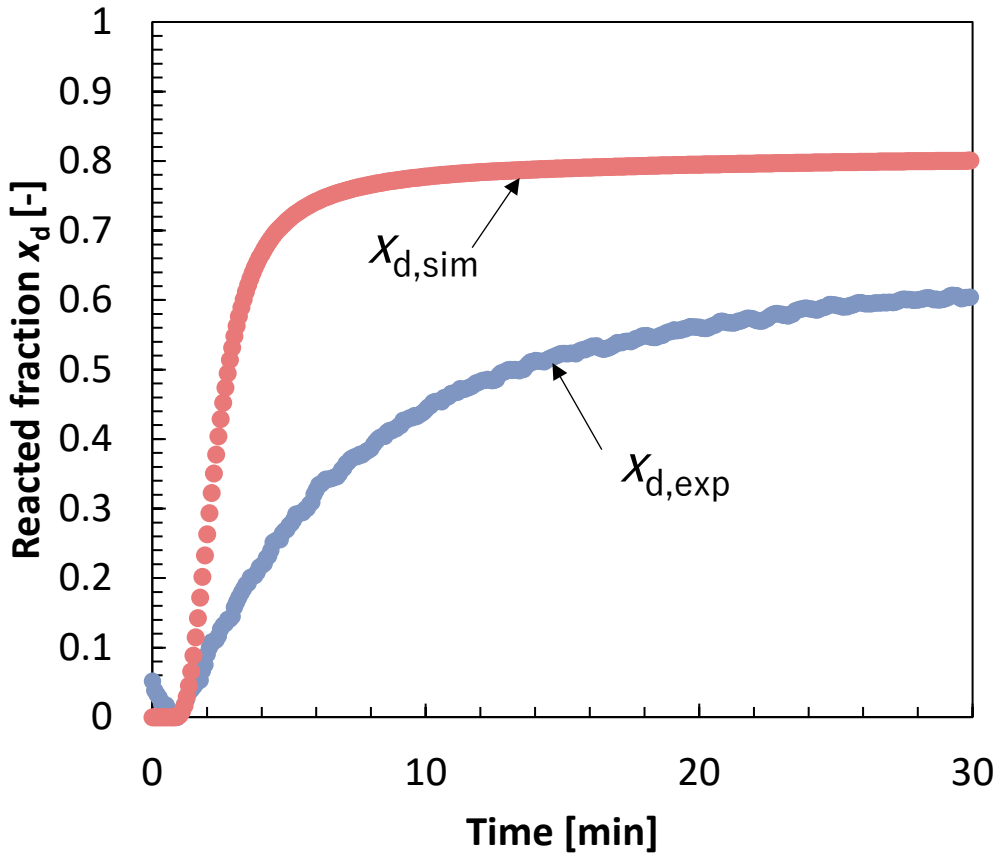
数値モデルの検証

- 本モデルは急速な温度上昇を良好に予測できる一方で、反応率には差異が見られた。
- 数値モデルでは、共振周波数の変化および電界強度の変化を再現できないため、マイクロ波による熱供給を過大評価している。

$$\dot{q}_{mw} = 2\pi f \varepsilon_0 \varepsilon' tan\delta (1-\psi) E^2$$

- 実際の実験では、ペレット間接触は数値モデルほど完全ではない。





加熱効率

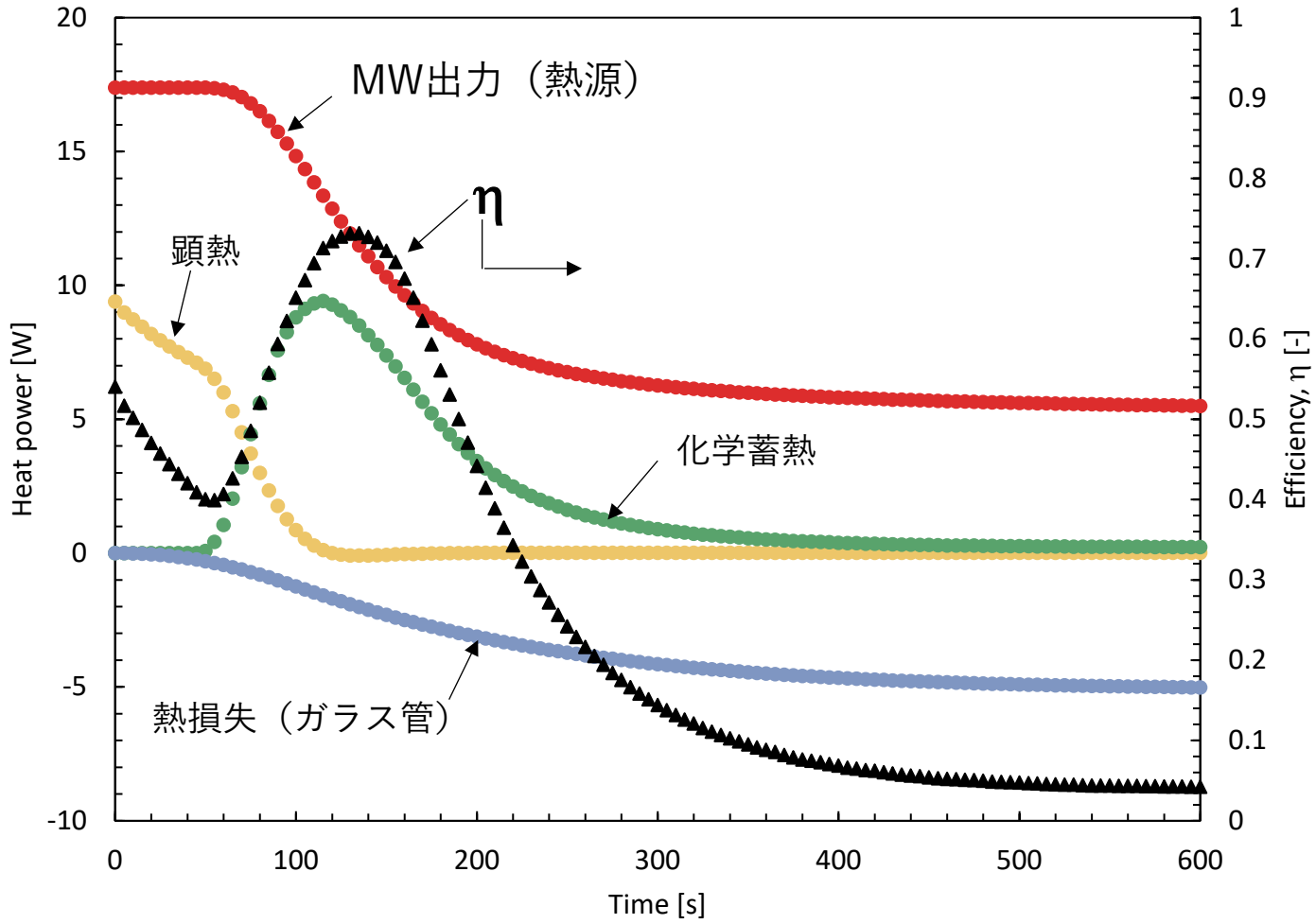
- 試料の電力収支：顕熱・反応熱（吸熱）・マイクロ波による試料内発熱・石英管からの熱損失（単位：W）

- 効率 $\eta = \dfrac{\text{顕熱} + \text{反応熱}}{\text{試料吸収マイクロ波熱源}}$

- 効率のピークは73%

効率向上のために

- SiC量の最適化
- キャビティ・チューナーの電気損失の低減



結論

- マイクロ波加熱下において、$Ca(OH)_2$の高速脱水を達成した（1.6 kW/L）。
- 数値モデルにより、電界集中および局所発熱メカニズムを説明した。
- 電力収支解析により加熱効率を定量化し、ピーク効率73％を確認した（顕熱＋反応熱／試料吸収マイクロ波熱源）。
- 今後は、マイクロ波から熱への変換効率最大化に向けて、SiC添加量（wt%）、ペレット形状、および配置形状の最適化を行う。