

Supplementary Information

**Process intensification of 2-amylanthraquinone hydrogenation in a micro-packed
bed reactor for H₂O₂ synthesis**

Junjie Wang, Lin Sheng, Qichen Shang, Jian Deng, Guangsheng Luo*

State Key Laboratory of Chemical Engineering, Department of Chemical Engineering,

Tsinghua University, Beijing 100084, China

*Corresponding author. Tel.: +86-10-62783870; E-mail: gsluo@tsinghua.edu.cn

Contents:

1. Article data

Article data

Table 1: include figure: 6,7,9,10,12,13

experiment content	ds	L/ m	QG(ml/m in)	QL(ml/m in)	T	titrat ion 1(m L)	titrat ion 2(m L)	titrat ion 3(m L)	ave rage	B	X%
Material ratio 1:1	70	0.1	4	0.23	30	8.07 4	11.0 64	10.2 34	9.7 906 67	5.5 072 5	22. 570 7
	70	0.1	8	0.46	30	6.72 5	6.92 5	7.27 7	6.9 756 67	3.9 238 13	16. 081 2
	70	0.1	12	0.68	30	5.08 7	4.67 1	4.83 3	4.8 636 67	2.7 358 13	11. 212 35
	70	0.1	16	0.91	30	4.55 9	4.82 5	4.97	4.7 846 67	2.6 913 75	11. 030 23
	70	0.1	20	1.14	30	4.97 87	4.52 7	4.03 1	4.5 122 33	2.5 381 31	10. 402 18
Material ratio 1:1	70	0.1	4	0.23	50	13.1 81	12.0 82	12.6 23	12. 628 67	7.1 036 25	29. 113 22
	70	0.1	8	0.46	50	8.75 3	8.86 6	8.85	8.8 23	4.9 629 38	20. 339 91
	70	0.1	12	0.68	50	8.37 6	7.99 9	7.89 5	8.0 9	4.5 506 25	18. 650 1
	70	0.1	16	0.91	50	6.79 4	6.23 3	6.45 3	6.4 933 33	3.6 525	14. 969 26
	70	0.1	20	1.14	50	6.00 8	6.28 9	6.15 2	6.1 496 67	3.4 591 88	14. 177
Material ratio 2:1	70	0.1	4	0.13	50	18.5 5	18.0 73	18.3 25	18. 316	10. 302 75	42. 224 39
	70	0.1	8	0.23	50	14.8 63	14.8 99	14.6 64	14. 808 67	8.3 298 75	34. 138 83

	70	0.1	12	0.34	50	12.8 85	12.7 57	12.5 87	12. 743	7.1 679 38	29. 376 79
	70	0.1	16	0.46	50	12.0 83	12.4 98	12.6 99	12. 426 67	6.9 9	28. 647 54
	70	0.1	20	0.57	50	11.8 22	11.6 44	11.8	11. 755 33	6.6 123 75	27. 099 9
Material ratio 3:1	70	0.1	4	0.08	50	21.4 27	21.2 62	21.3 25	21. 338	12. 002 63	49. 191 09
	70	0.1	8	0.15	50	17.8 24	17.8 61	17.8 42	17. 842 33	10. 036 31	41. 132 43
	70	0.1	12	0.23	50	15.8 04	15.9 12	15.8 5	15. 855 33	8.9 186 25	36. 551 74
	70	0.1	16	0.3	50	14.0 12	14.4 76	14.2 25	14. 237 67	8.0 086 88	32. 822 49
	70	0.1	20	0.38	50	13.3 31	13.1 3	13.2 18	13. 226 33	7.4 398 13	30. 491 03
Material ratio 1:1	70	0.1	4	0.23	70	16.0 55	15.0 25	15.5 23	15. 534 33	8.7 380 63	35. 811 73
	70	0.1	8	0.46	70	12.8 12	13.0 39	12.9 63	12. 938	7.2 776 25	29. 826 33
	70	0.1	12	0.68	70	12.7 63	12.5 41	12.6 54	12. 652 67	7.1 171 25	29. 168 55
	70	0.1	16	0.91	70	11.4 52	11.3 49	11.3 86	11. 395 67	6.4 100 63	26. 270 75
	70	0.1	20	1.14	70	11.0 82	11.0 47	11.0 23	11. 050 67	6.2 16	25. 475 41
working pressure 400kpa	70	0.1	4	0.23	50	12.8 06	12.5 77	12.6 98	12. 693 67	7.1 401 88	29. 263 06
	70	0.1	8	0.46	50	8.20 1	8.73 5	8.52 9	8.4 883	4.7 746	19. 568

									33	88	39
	70	0.1	12	0.68	50	7.83 9	7.19 6	7.48 2	7.5 056 67	4.2 219 38	17. 303 02
	70	0.1	16	0.91	50	6.73 5	6.03 6	6.41 8	6.3 963 33	3.5 979 38	14. 745 65
	70	0.1	20	1.14	50	6.28 7	6.12 1	6.12 5	6.1 776 67	3.4 749 38	14. 241 55
100g/L	70	0.1	4	0.23	50	10.7 03	10.5 1	10.6 35	10. 616	5.9 715	48. 946 72
	70	0.1	8	0.46	50	8.17 7	8.02 9	8.12 1	8.1 09	4.5 613 13	37. 387 81
	70	0.1	12	0.68	50	7.67 7	7.33 2	7.45 2	7.4 87	4.2 114 38	34. 519 98
	70	0.1	16	0.91	50	6.66 1	6.72 7	6.69 4	6.6 94	3.7 653 75	30. 863 73
	70	0.1	20	1.14	50	6.41 1	6.47 8	6.01 2	6.3 003 33	3.5 439 38	29. 048 67
300g/L	70	0.1	4	0.23	50	14.8 57	14.3 19	14.6 58	14. 611 33	8.2 188 75	22. 455 94
	70	0.1	8	0.46	50	10.5 49	11.8 35	11.1 52	11. 178 67	6.2 88	17. 180 33
	70	0.1	12	0.68	50	9.2	8.93 3	9.10 7	9.0 8	5.1 075	13. 954 92
	70	0.1	16	0.91	50	7.52 1	7.47	7.49 3	7.4 946 67	4.2 157 5	11. 518 44
	70	0.1	20	1.14	50	7.33 1	7.01 3	7.12 8	7.1 573 33	4.0 26	11
TMB:T OP=3:2	70	0.1	4	0.23	50	14.3 13	13.4 66	13.8 56	13. 878 33	7.8 065 63	31. 994 11
	70	0.1	8	0.46	50	11.0	10.8	10.9	10.	6.1	25.

						11	45	68	941 33	545	223 36
	70	0.1	12	0.68	50	10.1 94	9.79 8	9.85 6	9.9 493 33	5.5 965	22. 936 48
	70	0.1	16	0.91	50	8.97 1	9.40 1	9.20 6	9.1 926 67	5.1 708 75	21. 192 11
	70	0.1	20	1.14	50	8.31 2	8.56 9	8.49 3	8.4 58	4.7 576 25	19. 498 46
TMB:T OP=3:3	70	0.1	4	0.23	50	13.3 23	13.1 63	13.2 17	13. 234 33	7.4 443 13	30. 509 48
	70	0.1	8	0.46	50	10.3 33	10.3 2	10.3 08	10. 320 33	5.8 051 88	23. 791 75
	70	0.1	12	0.68	50	9.33 4	9.09 7	9.15 8	9.1 963 33	5.1 729 38	21. 200 56
	70	0.1	16	0.91	50	8.04 5	7.92	7.96 2	7.9 756 67	4.4 863 13	18. 386 53
	70	0.1	20	1.14	50	7.83 1	7.57 9	7.62 8	7.6 793 33	4.3 196 25	17. 703 38
working pressure 300Kpa	70	0.0 1	4	0.23	50	1.31 6	1.25 4	1.32 8	1.2 993 33	0.7 308 75	2.9 953 89
	70	0.0 1	8	0.46	50	1.14 4	1.14 5	1.20 4	1.1 643 33	0.6 549 38	2.6 841 7
	70	0.0 1	12	0.68	50	0.96 1	0.90 1	0.92 5	0.9 29	0.5 225 63	2.1 416 5
	70	0.0 1	16	0.91	50	0.77 1	0.72 5	0.73 5	0.7 436 67	0.4 183 13	1.7 143 95
	70	0.0 1	20	1.14	50	0.60 1	0.55	0.58 6	0.5 79	0.3 256 88	1.3 347 85
30℃	70	0.0 1	4	0.23	30	0.67	0.69 3	0.68 1	0.6 813 33	0.3 832 5	1.5 706 97

	70	0.0 1	8	0.46	30	0.46 2	0.46	0.46 7	0.4 63	0.2 604 38	1.0 673 67
	70	0.0 1	12	0.68	30	0.35 1	0.33 5	0.34 8	0.3 446 67	0.1 938 75	0.7 945 7
	70	0.0 1	16	0.91	30	0.29 9	0.26 8	0.28 5	0.2 84	0.1 597 5	0.6 547 13
	70	0.0 1	20	1.14	30	0.26 9	0.24 1	0.25 8	0.2 56	0.1 44	0.5 901 64
70°C	70	0.0 1	4	0.23	70	1.88 2	1.69 5	1.57 4	1.7 17	0.9 658 13	3.9 582 48
	70	0.0 1	8	0.46	70	1.34 7	1.33 8	1.34 5	1.3 433 33	0.7 556 25	3.0 968 24
	70	0.0 1	12	0.68	70	1.30 5	1.29 8	1.29 8	1.3 003 33	0.7 314 38	2.9 976 95
	70	0.0 1	16	0.91	70	1.20 5	1.21 6	1.20 7	1.2 093 33	0.6 802 5	2.7 879 1
	70	0.0 1	20	1.14	70	1.19 8	1.12 7	1.16 5	1.1 633 33	0.6 543 75	2.6 818 65
40°C	70	0.0 1	4	0.23	40	0.99 3	0.97 35	1.00 45	0.9 903 33	0.5 570 63	2.2 830 43
	70	0.0 1	8	0.46	40	0.80 3	0.80 25	0.83 55	0.8 136 67	0.4 576 88	1.8 757 68
	70	0.0 1	12	0.68	40	0.65 6	0.61 8	0.63 65	0.6 368 33	0.3 582 19	1.4 681 1
	70	0.0 1	16	0.91	40	0.53 5	0.49 65	0.51	0.5 138 33	0.2 890 31	1.1 845 54
	70	0.0 1	20	1.14	40	0.43 5	0.39 55	0.42 2	0.4 175	0.2 348 44	0.9 624 74
60°C	70	0.0 1	4	0.23	60	1.59 9	1.47 45	1.45 1	1.5 081	0.8 483	3.4 768

									67	44	19
	70	0.0 1	8	0.46	60	1.24 55	1.24 15	1.27 45	1.2 538 33	0.7 052 81	2.8 904 97
	70	0.0 1	12	0.68	60	1.13 3	1.09 95	1.11 15	1.1 146 67	0.6 27	2.5 696 72
	70	0.0 1	16	0.91	60	0.98 8	0.97 05	0.97 1	0.9 765	0.5 492 81	2.2 511 53
	70	0.0 1	20	1.14	60	0.89 95	0.83 85	0.87 55	0.8 711 67	0.4 900 31	2.0 083 25

Table 2: include figure 8,11,14

AAQ concentrations	R(%)
100	99.2
200	99.86
300	99.96
temperature	R(%)
30	99.97
50	99.91
70	99.36
gas-liquid molar ratio	R(%)
1	99.91
2	99.22
3	98.23

Table 3: figure 15

cycle	R(%)	X(%)
1	100.00072	27.17
2	99.96752	27.1
3	99.75241	27.2
4	99.70966	27.09
5	99.52142	27.15
6	99.47794	27.28
7	99.3054	27.21
8	99.25923	27.25
9	99.25733	27.15
10	99.2421	27.09

Table 4: figure 16

cycle	R(%)	X(%)
0	100	100
1	99.96752	97
2	99.75241	94.09
3	99.70966	91.2673
4	99.52142	88.52928
5	99.47794	85.8734
6	99.3054	83.2972
7	99.25923	80.79828
8	99.25733	78.37434
9	99.2421	76.02311

Table 5: figure 17

Sh (Experiment)	Sh (Prediction)
0.09226	0.09208
0.12784	0.1324
0.12828	0.16322
0.15869	0.18993
0.17909	0.2136
0.1063	0.09208
0.14215	0.1324
0.18541	0.16322
0.19209	0.18993
0.21946	0.2136
0.08877	0.08116
0.12372	0.11359
0.15283	0.14003
0.19607	0.16334
0.22376	0.18324
0.06404	0.0729
0.0987	0.10334
0.13206	0.12843
0.15219	0.14861
0.17553	0.16753
0.06538	0.08116
0.09322	0.11359
0.13062	0.14003
0.1549	0.16334
0.17977	0.18324
0.08122	0.09208
0.10546	0.1324
0.13359	0.16322
0.14773	0.18993
0.17389	0.2136
0.08936	0.09208
0.1312	0.1324
0.17205	0.16322
0.19927	0.18993
0.22617	0.2136
0.11922	0.09208
0.17355	0.1324
0.19727	0.16322
0.20649	0.18993
0.24191	0.2136

0.1139	0.10531
0.16655	0.15144
0.20812	0.18668
0.24802	0.21724
0.27412	0.2443
0.10737	0.11335
0.15649	0.163
0.19171	0.20094
0.20911	0.23382
0.23995	0.26295
0.10737	0.11177
0.15649	0.16089
0.19171	0.19821
0.20911	0.23083
0.23995	0.25973
Sh	Sh
0.09226	0.09208
0.12784	0.1324
0.12828	0.16322
0.15869	0.18993
0.17909	0.2136
0.1063	0.09208
0.14215	0.1324
0.18541	0.16322
0.19209	0.18993
0.21946	0.2136
0.08877	0.08116
0.12372	0.11359
0.15283	0.14003
0.19607	0.16334
0.22376	0.18324
0.06404	0.0729
0.0987	0.10334
0.13206	0.12843
0.15219	0.14861
0.17553	0.16753
0.06538	0.08116
0.09322	0.11359
0.13062	0.14003
0.1549	0.16334
0.17977	0.18324
0.08122	0.09208
0.10546	0.1324

0.13359	0.16322
0.14773	0.18993
0.17389	0.2136
0.08936	0.09208
0.1312	0.1324
0.17205	0.16322
0.19927	0.18993
0.22617	0.2136
0.11922	0.09208
0.17355	0.1324
0.19727	0.16322