

APPENDIX 5

Molecular composition of gas generated from coals and carbonaceous shales by hydroous pyrolysis experiments at 330 and 360°C for 72 h

Sample code	HP temp. [°C]	Molecular composition (mole%)																	
		Hydrocarbons													Non-hydrocarbons				
		CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	<i>i</i> -C ₄	<i>n</i> -C ₄	<i>i</i> -C ₅	<i>n</i> -C ₅	<i>neo</i> -C ₅	<i>n</i> -C ₆ H ₁₄	<i>n</i> -C ₇ H ₁₆	ΣC ₆	ΣC ₇	ΣunsHC	CO ₂	N ₂	H ₂	CO	H ₂ S
Upper Silesian Coal Basin																			
Br-20st	330	9.93	1.37	0.76	0.10	0.25	0.07	0.09	0.00	0.06	0.08	0.35	0.24	0.50	61.4	1.07	23.1	0.11	0.55
	360	20.71	2.79	1.63	0.29	0.48	0.18	0.16	0.00	0.09	0.08	0.48	0.28	0.41	50.7	0.96	19.7	0.10	0.91
Br-20c	330	51.78	7.03	3.40	0.47	0.95	0.16	6.88	0.04	0.04	0.01	0.12	0.05	0.05	21.5	1.83	3.53	0.0142	2.18
	360	68.03	7.88	3.20	0.39	0.78	0.12	0.14	0.01	0.03	0.01	0.06	0.01	0.01	14.0	0.96	1.97	n.a.	2.43
Br-23c	330	46.94	5.95	3.18	0.50	1.13	0.21	0.30	0.06	0.08	0.03	0.19	0.07	0.03	30.2	3.33	7.54	0.040	0.18
	360	55.23	7.67	3.62	0.48	1.08	0.17	0.23	0.03	0.06	0.02	0.11	0.04	0.02	26.1	1.54	3.22	0.0148	0.34
Br-23sb	330	15.81	2.22	1.23	0.31	0.51	0.21	0.25	0.05	0.18	0.16	0.77	0.73	1.41	23.3	7.07	45.4	0.0424	0.37
	360	22.40	3.00	1.47	0.33	0.60	0.19	0.26	0.04	0.16	0.11	0.55	0.37	0.62	22.9	8.77	37.0	0.0592	1.16
MI-21c	330	51.99	7.39	3.53	0.63	1.01	0.28	0.27	0.05	0.05	0.02	0.14	0.06	0.03	29.1	1.11	3.12	0.0182	1.22
	360	60.64	8.00	3.46	0.48	0.93	0.22	0.24	0.02	0.05	0.01	0.08	0.04	0.01	22.7	0.71	1.92	0.010	0.47
MI-21sb	330	25.87	4.07	2.15	0.78	0.76	0.45	0.36	0.00	0.21	0.14	0.99	0.50	1.23	19.1	3.80	39.5	n.a.	n.a.
	360	42.01	5.82	2.53	0.66	0.83	0.34	0.29	0.00	0.16	0.10	0.67	0.35	0.71	19.8	8.84	16.9	n.a.	n.a.
Si-22st	330	1.61	0.30	0.18	0.05	0.09	0.03	0.04	0.00	0.03	0.02	0.08	0.05	0.04	93.3	0.56	3.46	0.0148	0.13
	360	3.36	0.57	0.33	0.09	0.16	0.06	0.07	0.00	0.04	0.02	0.13	0.06	0.06	90.3	0.26	4.38	0.0244	0.07
Si-22c	330	37.30	6.31	3.51	0.52	0.99	0.26	0.24	0.05	0.04	0.75	0.14	0.06	0.04	43.9	0.73	3.27	0.0169	1.84
	360	58.29	8.52	4.01	0.52	0.97	0.17	0.15	0.02	0.03	0.01	0.08	0.02	0.02	23.8	0.38	1.59	0.0218	1.44
Si-23st	330	4.64	0.94	0.59	0.15	0.23	0.10	0.25	0.01	0.02	0.01	0.08	0.03	0.01	88.5	0.92	3.44	0.0192	0.04
	360	5.62	0.92	0.53	0.13	0.21	0.09	0.07	0.00	0.03	0.02	0.13	0.05	0.05	84.1	0.10	7.94	0.0568	0.01
Si-23c	330	35.14	5.68	3.01	0.45	0.82	0.21	0.23	0.05	0.05	0.02	0.15	0.06	0.03	49.2	0.94	2.96	0.0167	0.93
	360	48.45	7.04	3.44	0.48	0.87	0.21	0.22	0.03	0.04	0.01	0.09	0.02	0.02	36.3	0.46	2.00	0.0085	0.35
Lublin Coal Basin																			
Bo-20c	330	36.99	6.54	3.65	0.57	1.15	0.24	0.27	0.06	0.08	0.03	0.20	0.07	0.12	42.8	0.87	4.02	0.0342	2.31
	360	51.98	8.00	4.10	0.58	1.19	0.22	0.25	0.02	0.07	0.02	0.15	0.05	0.05	28.9	0.81	2.24	0.0231	1.29
Bo-20sb	330	18.46	3.34	1.79	0.22	0.73	0.12	0.31	0.09	0.17	0.13	0.71	0.31	1.73	37.1	2.88	28.6	n.a.	3.29
	360	29.07	4.53	2.62	0.52	1.06	0.30	0.41	0.08	0.22	0.16	0.81	0.43	0.68	35.3	1.17	20.6	0.062	1.98

HP temp. – hydroous pyrolysis temperature; ΣC₆ – sum of branched C₆H₁₄ isomers; ΣC₇ – sum of branched C₇H₁₆ isomers; ΣunsHC – sum of unsaturated hydrocarbons (ethene + propene + *i*-butene + trans-2-butene + cis-2-butene); c – channel coal sample; st – block shale sample collected above top of coal seam; sb – block shale sample collected below bottom of coal seam; n.a. – not analysed