

Primena masene spektrometrije u forenzičkoj identifikaciji dizel goriva u produktima sagorevanja

1. Lazar Miladinović

Kriminalistika i bezbednost

Visoka škola strukovnih studija za kriminalistiku i bezbednost

Niš, Srbija

e-mail: miladinovic.laza@gmail.com i ORCID: 0009-0001-8987-7188

2. dr Nenad Selaković

Centar za neravnotežne procese

Institut za fiziku

Beograd, Srbija

e-mail: nele@ipb.ac.rs i ORCID: 0000-0002-9732-2393

3. dr Radovan Radovanović

Departman Forenzičkog inženjerstva

Kriminalističko policijski univerzitet

Beograd, Srbija

e-mail: radovan.radovanovic@kpu.edu.rs i ORCID: 0000-0001-7302-8328

4. dr Nevena Puač

Centar za neravnotežne procese

Institut za fiziku

Beograd, Srbija

e-mail: nevena@ipb.ac.rs i ORCID: 0000-0003-1142-8494

Abstract: Ovaj rad prikazuje eksperimentalnu analizu produkata sagorevanja različitih građevinskih materijala u prisustvu dizel goriva kao akceleratora, primenom masene spektrometrije. Ispitivani su uzorci cigle, laminata, tepisona, tarketa i vinila. Sagorevanje uz dodatak dizel goriva rezultovalo je pojavom karakterističnih masenih obrazaca akceleratora, sa dominantnim signalima u oblastima m/z 43 i 57, kao i u višem masenom opsegu m/z 69–71 i m/z 91, koji se mogu dovesti u vezu sa fragmentacijom alifatskih i aromatskih komponenti dizel goriva. Primenom diferencijalne analize masenih spektara omogućeno je izdvajanje signala koji potiču od produkata sagorevanja u prisustvu akceleratora, uz efikasno uklanjanje uticaja atmosferskih gasova. Posebno je uzeto u obzir da detektovani signali potiču od neutralnih vrsta uzorkovanih iz gasne faze, koje se jonizuju unutar masenog spektrometra. Dobijeni rezultati pokazuju da kombinacija masene spektrometrije i diferencijalne analize predstavlja pouzdan pristup za identifikaciju prisustva dizel goriva u složenim požarnim ostacima.

Ključne reči: masena spektrometrija, akcelerator sagorevanja, forenzička analiza, požarni ostaci i spektar

I. UVOD

Sagorevanje građevinskih materijala predstavlja složen fizičko-hemijski proces koji uključuje niz međusobno povezanih reakcija, uključujući pirolizu, oksidaciju i formiranje gasovitih produkata. U realnim uslovima požara, proces sagorevanja dodatno je komplikovan prisustvom akceleratora, najčešće zapaljivih tečnosti na bazi nafte i njenih derivata, poput dizel goriva i benzina, koji značajno utiču na dinamiku procesa sagorevanja i hemijski sastav dobijenih produkata [1], [2], [3], [4].

Analiza statističkih podataka Ministarstva unutrašnjih poslova Republike Srbije, Direkcije policije, Uprave za analitiku, Odeljenja za statističku analitiku i kriminalističko-operativne evidencije, pokazuje da je u periodu od 2014. do 2024. godine na teritoriji Republike Srbije registrovano ukupno 263.009 požara i eksplozija, od čega je u 235.968 slučajeva (89,72%) uzrok požara bio neutvrđen [5]. Veliki broj ovih incidenata povezan je sa namerno izazvanim požarima ili upotrebom eksplozivnih i zapaljivih materijala radi uništenja tragova izvršenja krivičnih dela, pri čemu se često koriste

akceleratori kao što su benzin, dizel gorivo, parafin, kerozin i druge zapaljive tečnosti [3].

U forenzičkim istragama požara, identifikacija ostataka akceleratora ima ključnu ulogu u utvrđivanju uzroka požara i razlikovanje između slučajnih i namerno izazvanih incidenata. Međutim, analiza požarnih ostataka otežana je složenom požarnom matricom, koja sadrži proizvode pirolize osnovnih materijala, uticaje temperature, atmosferske uslove i procese gašenja [6], [7].

Masena spektrometrija predstavlja pouzdanu metodu za analizu gasovitih i kondenzovanih produkata sagorevanja zahvaljujući visokoj osetljivosti i mogućnosti detekcije tragova jedinjenja. Kod sistema za uzorkovanje na atmosferskom pritisku, kao što je molekularno-snopna masena spektrometrija (MBMS), analizirane vrste su inicijalno prisutne u obliku neutralnih molekula u uzorkovanom gasu, koji se zatim jonizuju unutar jonizacione komore instrumenta (najčešće elektronskom jonizacijom). Zbog toga registrovani signali odgovaraju neutralnim vrstama prisutnim u gasnoj fazi, a ne unapred postojećim jonima u samom uzorku, što je u skladu sa pristupima primenjenim u savremenim istraživanjima detekcije gasovitih vrsta u uslovima atmosferskog pritiska [8], [9], [10], [11].

Gasna hromatografija u kombinaciji sa masenom spektrometrijom (GC–MS) predstavlja standardnu tehniku za detekciju i identifikaciju zapaljivih tečnosti, uključujući dizel gorivo, u ostacima požara [1], [2]. ASTM standardi E1618 i E1412 definišu procedure za ekstrakciju i analizu ostataka zapaljivih tečnosti, pružajući pouzdan okvir za forenzičku identifikaciju [12], [13].

Savremene metode, kao što su PTR-MS i DART-MS, omogućavaju brzu i direktnu analizu uzoraka bez kompleksne pripreme ili uz minimalnu pripremu uzorka, smanjujući rizik od kontaminacije i gubitka uzorka, što je naročito važno kod ograničenih količina forenzičkih uzoraka [3], [8], [9], [14]. PTR-MS omogućava detekciju isparljivih organskih jedinjenja u realnom vremenu, dok DART-MS omogućava direktnu i nedestruktivnu identifikaciju komponenti [8].

Kombinacija GC–MS analize sa statističkim metodama poput Principal Component Analysis (PCA) omogućava pouzdaniju detekciju i klasifikaciju zapaljivih tečnosti,

uključujući i složene mešavine kao što su dizel, benzin i kerozin, čak i nakon sagorevanja na različitim supstratima [7], [15]. Analiza m/z pikova omogućava identifikaciju karakterističnih hemijskih tragova prisutnih u požarnim ostacima, što doprinosi forenzičkoj interpretaciji [2], [6], [16].

Prisustvo dizel goriva u požarnim incidentima ostavlja specifične hemijske tragove koji se mogu identifikovati masenom spektrometrijom, što čini ovu tehniku ključnom u forenzičkoj analizi i razlikovanju namerno izazvanih požara od slučajnih [1], [8], [14], [17], [18]. Poseban izazov u analizi masenih spektara u ovakvim uslovima predstavlja razdvajanje signala koji potiču od ambijentalnog vazduha od onih koji nastaju kao produkti sagorevanja, s obzirom na to da se uzorkovanje vrši u uslovima atmosferskog pritiska, što je potvrđeno i u ranijim MBMS istraživanjima [11].

II. MATERIJALI I METODE

Kao uzorci u ovom istraživanju korišćeno je šest vrsta građevinskih materijala koji se najčešće mogu naći na zgarištu požara, kako objekata za stanovanje, tako i poslovnih objekata. Eksperiment je rađen sa sledećim uzorcima: puna cigla, klasičan laminat, laminat tipa „Hartley“, tarket „Rumba“, tepison „Duga“ i vinil. Svi materijali su prethodno pripremljeni i isečeni na uzorke dimenzija približno 2×2 cm.

Kao akcelerator sagorevanja korišćeno je dizel gorivo. Uzorci su postavljeni u odgovarajuću posudu i natopljeni određenom količinom dizel goriva, nakon čega su paljeni otvorenim plamenom i ostavljeni da gore do potpunog sagorevanja akceleratora.

Nakon završetka procesa sagorevanja, uzorci su premešteni u plastičnu neutralnu komoru koja je bila povezana sa masenim spektrometrom, gde su vršena merenja gasovitih produkata i isparenja nastalih tokom sagorevanja u prisustvu akceleratora. U cilju obezbeđivanja kontrolisanih uslova merenja i smanjenja uticaja spoljašnjih faktora, korišćena je zatvorena komora koja omogućava stabilno uzorkovanje i smanjenje turbulencija vazduha.

Maseni spektri isparljivih jedinjenja oslobođenih tokom sagorevanja uzoraka snimani su pomoću molekularno-sopnog masenog spektrometra Hiden Analytical MBMS HPR60. Ovaj instrument je posebno konstruisan za brzo i precizno uzorkovanje direktno iz uslova na atmosferskom pritisku, pri čemu koristi diferencijalno pumpani ulazni sistem koji održava gradijent pritiska između zone uzorkovanja i analizatora. Na taj način omogućeno je kontinuirano uvođenje ambijentalnog gasa u instrument bez potrebe za prethodnom koncentracijom ili transferom uzorka.

Ovakav pristup omogućio je praćenje promena u gasnoj fazi uz minimalno narušavanje sistema, čime je očuvan integritet analiziranog sastava. Instrument je korišćen u režimu detekcije gasovitih vrsta uzorkovanih iz atmosferskih uslova, pri čemu je emisiona struja filameta bila podešena na 5 μ A, a energija elektronske jonizacije na 70 eV. Ova konfiguracija obezbedila je visoku osetljivost i pouzdanu detekciju i analizu komponenti prisutnih u atmosferi zone uzorkovanja. Treba napomenuti da detektovane vrste predstavljaju neutralne molekule uzorkovane iz atmosfere, koje se potom jonizuju unutar jonizacione komore masenog spektrometra. Stoga se svi identifikovani signali tumače kao da potiču od neutralnih vrsta prisutnih u

uzorkovanom gasu, a ne od prethodno postojećih jona u uzorkovanom gasu.

Snimanjem referentnog (baznog) spektra atmosfere komore pre unošenja uzorka omogućeno je nedvosmisleno razdvajanje signala koji potiču iz samog uzorka od pozadinskih doprinosa. Na taj način omogućena je sistematska karakterizacija isparljivih organskih i neorganskih jedinjenja oslobođenih tokom procesa sagorevanja. Treba napomenuti da je tokom svih merenja u komori bio prisutan ambijentalni vazduh, te da bazni spektar odgovara spektru vazdušne smeše, bez značajnog prisustva organskih jedinjenja iz uzorka.

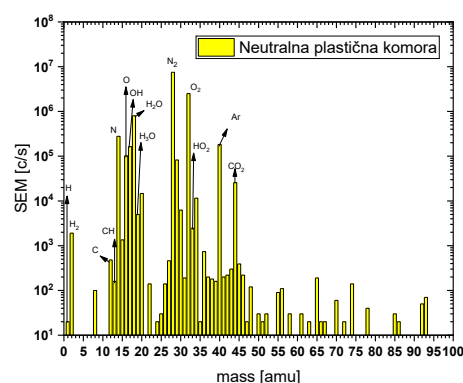
III. REZULTATI I DISKUSIJA

A. Referentni podaci

Svi signali u masenim spektrima tumače se kao poreklo od neutralnih vrsta prisutnih u gasnoj fazi komore. Nazivi jona (npr. tropilijum, $C_4H_9^+$) odnose se isključivo na fragmentacione produkte nastale EI (elektronskom jonizacijom) unutar instrumenta, a ne na vrste prisutne u uzorkovanom gasu.

Referentni maseni spektar neutralne plastične komore (Sl. 1.) predstavlja pozadinski signal kojim dominiraju atmosferski gasovi. Najintenzivniji pik uočen je na m/z 28, koji odgovara molekulskom azotu (N_2), glavnoj komponenti vazduha, a dodatni izraženi signali uključuju m/z 18 (H_2O), m/z 32 (O_2) i m/z 40 (Ar), što ukazuje na prisustvo ambijentalnog vazduha i vlage. Slabiji signal javlja se na m/z 44 što odgovara CO_2 . Znači, u niskom masenom regionu (m/z < 40) dominantni signali potiču pre svega od osnovnih komponenti vazduha i njihovih fragmenata nastalih tokom jonizacije u instrumentu, te se ne mogu jednoznačno pripisati prisustvu ugljovodonika. Signali viših masa (m/z > 60) su slabi i sporadični, bez kontinuiranog homolognog niza karakterističnog za dugolančane alkane. Takođe, region aromatskih masa (m/z 77–78) prisutan je samo u tragovima.

Odsustvo značajnih signala koji potiču od organskih jedinjenja potvrđuje da je atmosfera u komori pretežno sastavljena od vazduha, bez detektabilnih doprinosa produkata sagorevanja. Ovo potvrđuje njenu pouzdanost kao referentne osnove za diferencijalnu analizu.



Sl. 1. Maseni spektar prazne neutralne plastične komore

B. Analiza uzoraka sa dizel gorivom

Maseni spektar sagorevanja uzoraka tretiranih dizel gorivom pokazuje značajno povećanje intenziteta signala (do 10^6 – 10^7 c/s) i pojavu kompleksnog niza signala u širokom masenom opsegu (m/z $\approx$ 12–100). U svim ispitivanim uzorcima (cigla, laminat,

laminat „Hartley“, tarket „Rumba“, tepison „Duga“ i vinil) uočava se konzistentan obrazac karakterističan za prisustvo produkata sagorevanja dizel goriva.

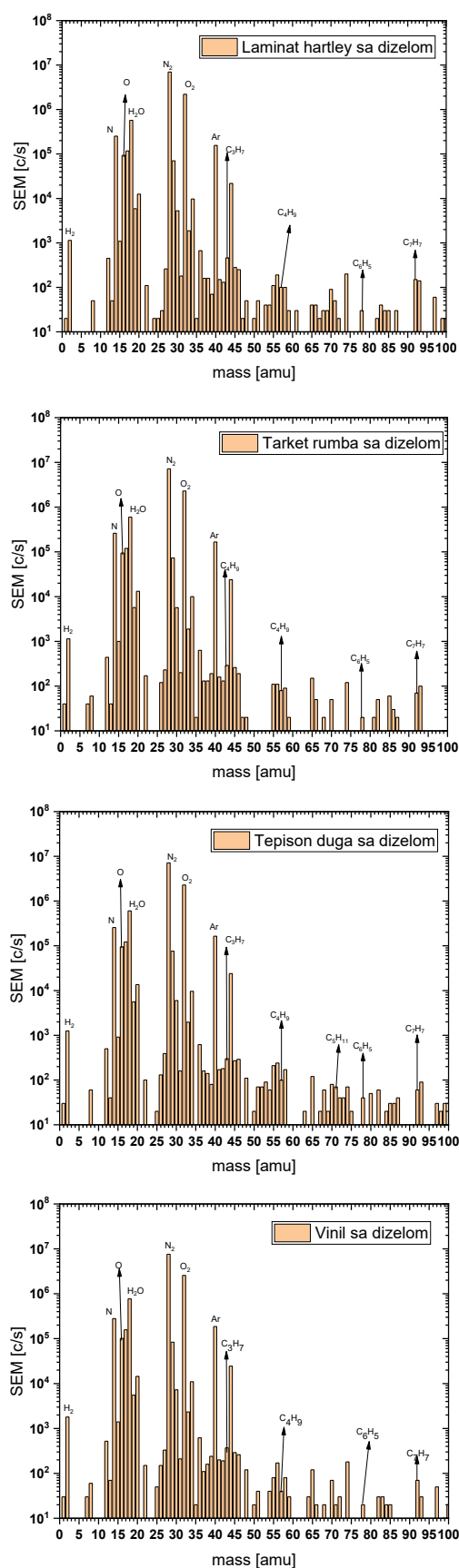
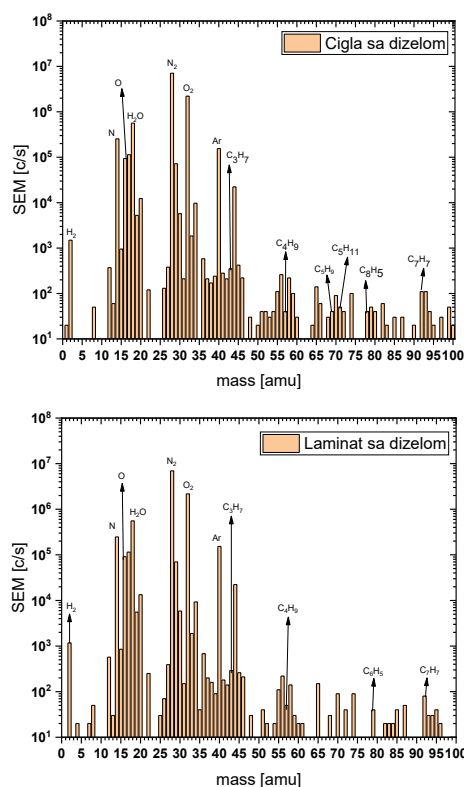
U niskom masenom regionu (m/z 12–20) registrovani su signali koji potiču od lakih molekula i fragmenata, pri čemu njihova interpretacija mora biti oprezna zbog doprinosa vazduha i procesa jonizacije. Region m/z 27–29 pokazuje izražene pikove koji se mogu povezati sa fragmentima lakih ugljovodonika i produkata sagorevanja, dok su u opsegu m/z 39–43 prisutni signali karakteristični za alifatske fragmente.

Najznačajniji deo spektra nalazi se u regionu m/z 55–57, gde dominira signal na m/z 57, koji predstavlja ključni marker *n*-alkana i jedan od najpouzdanijih indikatora prisustva dizel goriva. Njegovo prisustvo je konzistentno u svim uzorcima i značajno intenzivnije u odnosu na referentni spektar.

U višem masenom opsegu (m/z 69–71) detektovani su signali koji ukazuju na prisustvo viših alifatskih ugljovodonika. Pored toga, u regionu m/z 77–78 registrovane su aromatske neutralne komponente detektovane preko karakterističnih EI signala.

Posebno značajan je signal na m/z 91, koji odgovara tropilijum fragmentacioni signalu dobijenom usled EI. Ovaj signal predstavlja karakterističan marker alkil-benzena i aromatskih komponenti dizel goriva i detektovan je u svim uzorcima, dok je odsutan u referentnom spektru komore.

Iako svi uzorci pokazuju sličan osnovni obrazac, uočene su razlike u relativnim intenzitetima pojedinih regiona, što ukazuje na uticaj matrice materijala (Sl. 2.). Porozni materijali, poput cigle, pokazuju izraženiji signal viših masa, što se može pripisati zadržavanju težih komponenti goriva. Sa druge strane, polimerni materijali (vinil, laminati, tepison) doprinose dodatnim produktima pirolize, ali bez narušavanja osnovnog „*fingerprint*“-a dizela.



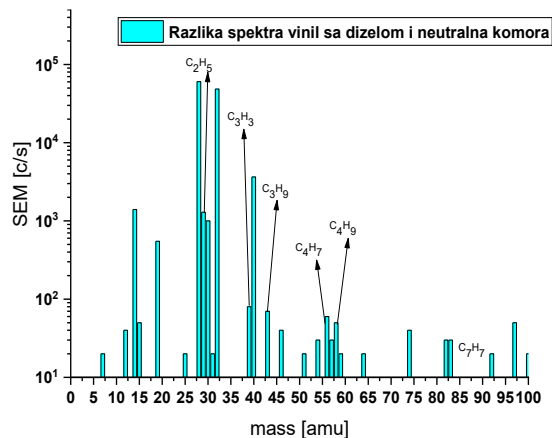
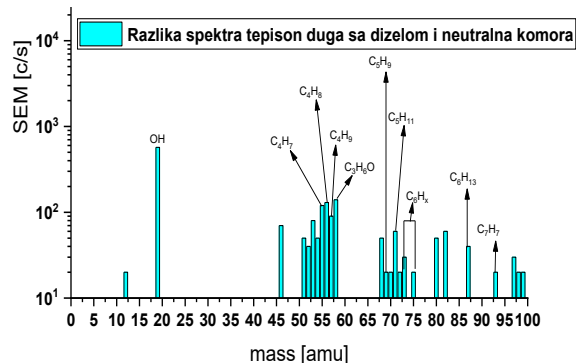
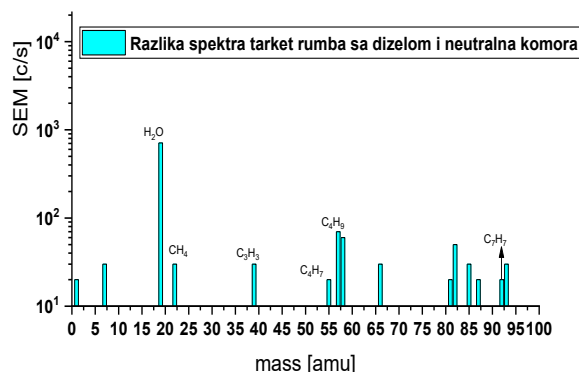
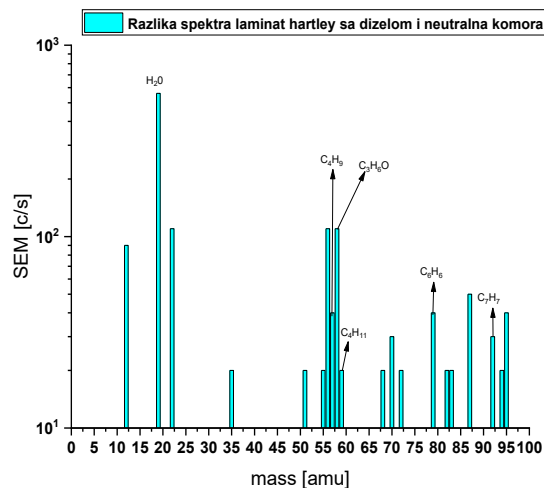
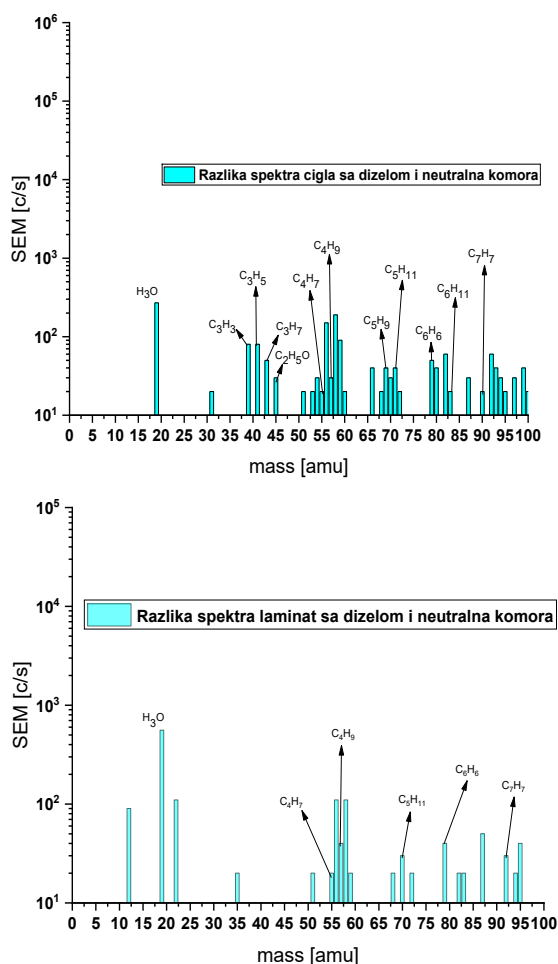
Sl. 2. Prikaz masenih spektara sagorevanja uzoraka sa dizel gorivom kao akceleratorom

C. Spektri razlike

Spektri razlike, dobijeni oduzimanjem spektra neutralne komore od spektara sagorevanja uzoraka, omogućavaju izdvajanje signala koji potiču isključivo iz sagorevanja uzorka i dizel goriva (Sl. 3.). Ovim pristupom značajno se smanjuje uticaj pozadinskih gasova i povećava selektivnost analize.

U svim diferencijalnim spektrima dominantan signal se javlja u regionu m/z 55–60, gde je jasno izražen signal na m/z 57. Njegovo prisustvo u spektrima razlike potvrđuje da ovaj fragment potiče od dizel goriva i predstavlja najpouzdaniji dijagnostički marker. U srednjem masenom regionu (m/z 39–45) zadržani su signali koji ukazuju na fragmentaciju alifatskih ugljovodonika. Takođe, u opsegu m/z 69–71 prisutni su fragmenti viših alkana. Aromatski region (m/z 77–95) pokazuje varijabilno ponašanje. U većini uzoraka detektovani su fragmenti i signal na m/z 91, iako sa smanjenim intenzitetom u odnosu na originalne spektre. U pojedinim slučajevima (npr. cigla), aromatski markeri su oslabljeni ili odsutni, što se može pripisati preklapanju sa pozadinskim signalom ili matematičkom eliminacijom tokom obrade podataka.

Ovakvo ponašanje ukazuje da diferencijalni spektar prvenstveno naglašava alifatske komponente dizel goriva, dok aromatski markeri mogu imati ograničenu dijagnostičku vrednost.



Sl. 3. Prikaz masenih spektara razlike dobijeni oduzimanjem spektra neutralne komore od spektara sagorevanja uzoraka

D. Komparativna analiza

Uparedna analiza svih uzoraka pokazuje da, uprkos razlikama u tipu materijala, postoji stabilan i reproduktivan maseni „fingerprint“ dizel goriva.

Najvažniji zajednički elementi su:

- dominantni alifatski signali (m/z 43 i 57),
- prisustvo viših alkanskih fragmenata (m/z 69–71),
- detekcija aromatskih fragmenata (m/z 77–78),
- prisustvo signala m/z 91 u originalnim spektrima.

Uticaj matrice materijala ogleda se pre svega u relativnim intenzitetima i pojavi dodatnih produkata pirolize, ali ne utiče značajno na osnovni obrazac dizel goriva.

Diferencijalni spektri potvrđuju da je signal na m/z 57 najstabilniji i najpouzdaniji marker, dok aromatski signali imaju dodatnu, ali sekundarnu dijagnostičku vrednost.

IV. ZAKLJUČAK

U ovom radu izvršena je sistematska eksperimentalna i analitička studija produkata sagorevanja različitih građevinskih i podnih materijala (cigla, laminat, laminat Hartley, tepison Duga, tarket Rumba i vinil) primenom masene spektrometrije, kako u neutralnim uslovima, tako i u prisustvu dizel goriva kao potencijalnog ubrzivača sagorevanja. Istraživanje je obuhvatilo širok spektar mineralnih, polimernih i tekstilnih matrica koje se često sreću u realnim požarnim scenarijima, čime je obezbeđena visoka forenzička relevantnost dobijenih rezultata, u skladu sa savremenim pristupima analizi požarnih ostataka [2], [3].

Posebna pažnja posvećena je primeni metode oduzimanja pozadinskih signala, pri čemu su maseni spektri uzoraka korigovani u odnosu na referentni spektar prazne neutralne plastične komore.

Analiza referentnog spektra pokazala je da pozadinski signal potiče pre svega od osnovnih komponenti ambijentalnog vazduha i niskomolekulskih fragmenata, bez prisustva karakterističnih signala naftnih derivata, što je u saglasnosti sa literaturnim podacima o niskom doprinosu matrice i okoline u PTR-MS i GC-MS analizama [1], [3].

Sagorevanje svih ispitivanih uzoraka u prisustvu dizel goriva dovelo je do pojave izraženih i reproduktivnih masenih obrazaca karakterističnih za dizel gorivo. U svim slučajevima detektovani su dominantne alifatske fragmentacione neutralne vrste koje pri EI jonizaciji daju fragmente na m/z 43 i 57, viši alkanski fragmenti u oblasti m/z 69–71, kao i aromatski signal na m/z 91, uz prateće signale u regionu m/z 77–78. Njihova istovremena pojava predstavlja karakterističan dijagnostički obrazac tipičan za dizel gorivo, što je u skladu sa ranijim istraživanjima koja identifikuju m/z 57 i 71 kao ključne markere petrolejskih destilata [19], kao i sa PTR-MS analizama VOC profila akceleranata [3], dok je dodatno potvrđena poređenjem sa referentnim spektrima iz NIST baze podataka [20].

Diferencijalni maseni spektri pokazali su da navedeni fragmenti nisu prisutni u neutralnim uslovima, već potiču od sagorevanja dizel goriva. Ovakav pristup odgovara principima forenzičke identifikacije zapaljivih tečnosti, gde se

karakteristični fragmenti izdvajaju iz kompleksne matrice putem analitičkih metoda kao što su GC-MS i srodne tehnike [2], [19].

Uparedna analiza svih ispitivanih uzoraka pokazala je visok stepen konzistentnosti rezultata, što ukazuje na robusnost primenjene metodologije. Iako pojedine matrice doprinose dodatnim fragmentima usled pirolize, oni ne maskiraju ključne markere dizel goriva, što je u skladu sa nalazima da efekti matrice imaju ograničen uticaj na osnovni „fingerprint“ akceleranata [1], [3].

Dobijeni rezultati takođe su u skladu sa savremenim pristupima klasifikacije zapaljivih tečnosti, gde se prisustvo n-alkana i karakterističnih fragmenata koristi kao osnov za razlikovanje između različitih tipova goriva, uključujući dizel i kerozin [19], [21].

Na osnovu sveobuhvatne analize može se zaključiti da masena spektrometrija, u kombinaciji sa diferencijalnom analizom spektra, predstavlja pouzdanu i selektivnu metodu za identifikaciju dizel goriva u produktima sagorevanja, uz neophodno uzimanje u obzir doprinosa ambijentalnog vazduha tokom merenja. Ovaj zaključak je u skladu sa literaturom koja potvrđuje visoku analitičku vrednost kombinovanih tehnika (GC-MS, DART-MS, PTR-MS) u forenzičkoj analizi požarnih ostataka [1], [3].

Primena diferencijalne analize omogućava efikasno uklanjanje pozadinskih signala i povećava pouzdanost interpretacije, što je posebno značajno u složenim i degradiranim uzorcima, kako je istaknuto i u savremenim forenzičkim studijama [1], [2].

Na taj način, rad daje značajan doprinos razvoju forenzičkih metoda za identifikaciju ubrzivača sagorevanja, potvrđujući da definisani dijagnostički signali (m/z 43, 57 i 91) predstavljaju pouzdane indikatore prisustva dizel goriva, nezavisno od tipa matrice i uslova sagorevanja.

REFERENCE/LITERATURA

- [1] W. Dong, N. S. Chong, Q. A. Thanni, P. de Boves Harrington and M. Zhang, “Analysis of oil-based ignitable liquid residues by GC-MS and DART-MS,” *Forensic Chemistry*, 2025, article 100701.
- [2] K. Evans-Nguyen and K. Hutches, *Forensic analysis of fire debris and explosives*, Switzerland: Springer, 2019, pp. 227–255.
- [3] C. Whyte, K. P. Wyche, M. Kholia, A. M. Ellis and P. S. Monks, “Fast fingerprinting of arson accelerants by proton transfer reaction time-of-flight mass spectrometry,” *International Journal of Mass Spectrometry*, vol. 263, no. 2–3, pp. 222–232, 2007.
- [4] R. Radovanovic and L. Miladinović, “Criminal investigations and expertise of traces of deliberately set fires and explosions using modern forensic methods and technical systems,” presented at the International Engineering Conference, Novi Sad, Serbia, 2024.
- [5] Ministarstvo unutrašnjih poslova Republike Srbije, Direkcija policije, Uprava za analitiku, Odeljenje za statističku analitiku i kriminalističko-operativne evidencije, Statistički podaci o požarima i eksplozijama u Republici Srbiji 2014–2024, Beograd, Srbija, 2025.
- [6] B. Falatová, M. Ferreira-González, J. L. P. Calle, J. Á. Álvarez and M. Palma, “Discrimination of ignitable liquid residues in burned petroleum-derived substrates by using HS-MS eNose and chemometrics,” *Sensors*, vol. 21, no. 3, p. 801, 2021.
- [7] V. Sedwick, A. Leal, G. A. Barding Jr, K. Nelson, D. Pollard and A. B. Kanu, “Combining gas chromatography-mass spectrometry and principal component analysis to facilitate complete detection and identification of ignitable liquids,” *The Chemical Educator*, vol. 27, no. 1, pp. 33–43, 2022.
- [8] S. Ranjan, R. O. Y. Chaitali and S. K. Sinha, “Gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS): a comprehensive review of synergistic combinations and their applications in the past two decades,” *Journal of*

Analytical Sciences and Applied Biotechnology, vol. 5, no. 2, pp. 72–85, 2023.

- [9] A. M. Stojić, "Analiza raspodela i dinamike isparljivih organskih jedinjenja i aerosola u troposferi," doktorska disertacija, Univerzitet u Beogradu, Srbija, 2015.
- [10] N. Selaković, N. Puač, D. Maletić, G. Malović and Z. Petrović, "Time-resolved mass spectrometry of positive ions originated from atmospheric-pressure plasma jet," APS Gaseous Electronics Conference, 2013.
- [11] D. Maletić, N. Puač, S. Lazović, G. Malović, T. Gans, V. Schulz-von der Gathen and Z. Lj. Petrović, "Detection of atomic oxygen and nitrogen created in a radio-frequency-driven micro-scale atmospheric pressure plasma jet using mass spectrometry," Journal of Physics D: Applied Physics, 2012
- [12] ASTM E1412-19, "Standard practice for separation of ignitable liquid residues from fire debris samples by passive headspace concentration with activated charcoal," ASTM International, 2019. <https://www.astm.org>
- [13] ASTM E1618-19, "Standard test method for ignitable liquid residues in extracts from fire debris samples by gas chromatography-mass spectrometry," ASTM International, 2019. <https://www.astm.org>
- [14] S. Gupta and N. Samal, "Application of direct analysis in real-time mass spectrometry (DART-MS) in forensic science: a comprehensive review," Egyptian Journal of Forensic Sciences, vol. 12, no. 1, p. 17, 2022.
- [15] M. E. Sigman and M. R. Williams, "Chemometric applications in fire debris analysis," Wiley Interdisciplinary Reviews: Forensic Science, vol. 2, no. 5, e1368, 2020.
- [16] F. C. Barnett, M. Bailey and M. Zhang, "Detection and classification of ignitable liquid residues in the presence of matrix interferences by using direct analysis in real time mass spectrometry," Journal of Forensic Sciences, vol. 64, no. 5, pp. 1486–1494, 2019.
- [17] M. R. Goodman, E. A. Kaley and E. E. Finney, "Forensic analysis of biodiesel", Forensic Science International, vol. 263, pp. 10–26, 2016.
- [18] Y. Low, E. Tyrrell, E. Gillespie and C. Quigley, "Recent advancements and moving trends in chemical analysis of fire debris," Forensic Science International, vol. 345, article 111623, 2023.
- [19] R. Rella, A. Sturaro, G. Parvoli, D. Ferrara and L. Doretta, "Accelerant identification in fire debris by TCT GC-MS," Journal of Analytical and Applied Pyrolysis, 2002.
- [20] National Institute of Standards and Technology (NIST), "NIST Mass Spectral Library," Gaithersburg, MD, USA.
- [21] C. Park, W. Park, S. Jeon, S. Lee and J. B. Lee, "Application of machine learning model for fire accelerant classification from GC-MS data," Analytical Science and Technology, vol. 34, pp. 231–239, 2021.

ABSTRACT

This paper presents an experimental analysis of combustion products of various building materials in the presence of diesel fuel as an accelerant, using mass spectrometry. The investigated samples included brick, laminate, carpet, vinyl flooring (tarket), and vinyl.

Combustion in the presence of diesel fuel resulted in the appearance of characteristic mass spectral patterns of the accelerant, with dominant signals at m/z 43 and 57 regions, as well as in the higher mass ranges m/z 69–71 and m/z 91, which can be associated with fragmentation of aliphatic and aromatic components of diesel fuel.

The application of differential mass spectral analysis enabled the isolation of signals originating from combustion products in the presence of the accelerant, while effectively removing the influence of atmospheric gases.

Special consideration was given to the fact that the detected signals originate from neutral species sampled from the gas phase, which are subsequently ionized within the mass spectrometer.

The obtained results indicate that the combination of mass spectrometry and differential analysis represents a reliable approach for identifying the presence of diesel fuel in complex fire debris.

Application of mass spectrometry in the forensic identification of diesel fuel in combustion products

Lazar Miladinović

Nenad Selaković

Radovan Radovanović

Nevena Puač