https://doi.org/10.31891/2307-5732-2025-359-83
УДК 543.544.5 : 543.42 : 543.06

ТКАЧУК ГАННА
Хмельницький національний університет
https://orcid.org/0000-0003-3502-0557
e-mail: tkachukha@khmnu.edu.ua
ТКАЧУК АНДРІЙ
Хмельницький національний університет
https://orcid.org/0000-0003-0865-9603
tkachukan@khmnu.edu.ua
СТРЕМЕЦЬКИЙ ОЛЕКСАНДР
Хмельницький національний університет
https://orcid.org/0000-0001-6137-4557
stremetskyiol@khmnu.edu.ua

ВИЗНАЧЕННЯ ВМІСТУ ОРГАНІЧНИХ ТА МІНЕРАЛЬНИХ РЕЧОВИН У САЖІ ДИМОХОДІВ

У роботі представлені результати дослідження хімічного складу сажі, відібраної з побутового димоходу. Метою дослідження було встановлення потенційної токсичності сажі та ідентифікація маркерів джерела горіння. Якісний та кількісний елементний аналіз методом рентгенофлуоресцентної спектроскопії підтвердив спалювання біомаси деревини і показав присутність потенційно токсичних металів, зокрема свинцю та цинку, що може вказувати на спалювання побутових відходів. Аналіз органічної фракції методом газової хроматографії з мас-спектрометричним детектуванням підтвердив, що походженням сажі є піроліз деревини, про що свідчить високий вміст левоглюкозану та похідних лігніну. Ідентифікація поліциклічних ароматичних вуглеводнів, таких як фенантрен і пірен, а також о-ксилен, підтверджує неповне згоряння палива при низьких температурах, діагностує часткове побутове спалювання сміття та утворення креозоту.

Ключові слова: *сажа, креозот, поліциклічні ароматичні вуглеводні, рентгенофлуоресцентна спектроскопія, газова хроматографія з мас-спектрометричним детектуванням.*

TKACHUK HANNA
TKACHUK ANDRII
STREMETSKYI OLEKSANDR
Khmelnytskyi National University

ANALYSIS OF ORGANIC AND MINERAL COMPONENTS IN CHIMNEY SOOT

The intensified use of solid biofuels, particularly wood, for residential heating has led to a significant increase in emissions of fine particulate matter and potentially hazardous substances, notably from domestic chimney combustion. This study addresses a critical environmental and public health issue by conducting a detailed chemical analysis of soot, which was collected from a residential chimney and presented predominantly as a dense, glossy, sticky resin – a hazardous form known as creosote. The primary objective was to establish the comprehensive elemental and organic chemical composition of this soot matrix to determine its potential toxicity and definitively identify the combustion source markers, particularly seeking evidence of uncontrolled domestic waste burning.

Two complementary analytical techniques were employed. X-ray Fluorescence Spectroscopy (XRF) was utilized for the qualitative and quantitative determination of the mineral and elemental composition, focusing on both light and heavy elements, including potentially toxic metals (PTMs). The XRF analysis revealed a mineral fraction primarily composed of potassium (46.764 %) and calcium (42.180 %), which are strong markers for the combustion of biomass (wood). However, the analysis also demonstrated the non-trivial presence of PTMs. Specifically, zinc (0.837 %) and lead (0.102 %) were detected. While zinc is associated with painted wood, both metals are common components of printing inks, certain plastics, and galvanized materials. Their combined presence strongly supports the hypothesis that municipal solid waste was co-incinerated with wood fuel. An elevated sulfur content (5.074 %) further reinforced this, suggesting the burning of plastics, rubber, or paper, in the absence of coal or peat usage.

For the organic profile, the soot extract was analyzed by Gas Chromatography-Mass Spectrometry (GC-MS). The experiment was conducted under two different temperature programs and flow split ratios (Regime 1: high split, high starting temperature; Regime 2: low split, low starting temperature) to ensure a comprehensive capture of both less volatile and highly volatile compounds. Regime 1, designed to analyze the structural backbone of the creosote, confirmed the source as wood pyrolysis by the massive dominance of levoglucosan, which is a major, stable thermal marker of cellulose pyrolysis. High concentrations of lignin-derived compounds were also found, including syringyl and guaiacyl derivatives, which are precursors to the condensed, resinous creosote fraction.

Keywords: *soot, creosote, polycyclic aromatic hydrocarbons, X-ray fluorescence spectroscopy, gas chromatography-mass spectrometry.*

Стаття надійшла до редакції / Received 27.10.2025
Прийнята до друку / Accepted 15.11.2025

Постановка проблеми

Сажа, що утворюється при спалюванні палива, особливо твердого біопалива, як-от деревина, у побутових димоходах, є значним джерелом викидів дрібнодисперсних частинок, поліциклічних ароматичних вуглеводнів (ПАВ) та потенційно токсичних металів (ПТМ). Ці речовини становлять загрозу якості атмосферного повітря в населених пунктах та безпосередньо впливають на здоров'я людей, спричиняючи респіраторні, серцево-судинні та онкологічні захворювання.

Більшість досліджень у цій сфері зосереджена на промислових відходах. Однак, у регіонах з активним використанням пічного опалення, побутові димоходи можуть бути домінуючим джерелом специфічних забруднювачів, склад яких тісно залежить від типу палива та умов горіння. Вивчення хімічного складу сажі з димоходів дозволяє створити "хімічний відбиток" побутового опалення. Це важливо для точного моніторингу та моделювання якості повітря, а також для розробки ефективних місцевих стратегій зменшення забруднення.

Знання елементного та органічного складу сажі відкриває шляхи для її безпечної утилізації або навіть переробки, оскільки сажа з побутових димоходів часто є результатом не лише спалювання чистої біомаси деревини, але й неконтрольованого спалювання побутових відходів (сміття), включаючи типографський папір, поліетилен та інші залишки. Спалювання поліетиленових пляшок за наявності інших компонентів сміття призводить до утворення високотоксичних хлорорганічних сполук, а спалювання типографського паперу, який містить фарби та важкі метали, значно збільшує вміст ПАВ та ПТМ у сажі та атмосферних викидах. Це основне джерело утворення надзвичайно токсичних діоксинів та фуранів.

Детальне вивчення хімічного складу сажі, особливо наявність специфічних маркерів синтетичних матеріалів, наприклад, стиролів, фталатів або високого вмісту свинцю/цинку, характерного для друкарських фарб, дозволяє діагностувати факт спалювання сміття у побуті. Це надає інструмент для екологічного моніторингу та формування політики поводження з відходами [1]. Більшість наукових моделей викидів базуються на чистому паливі – деревині, вугіллі. Таким чином, це дослідження заповнює пробіл, аналізуючи реалістичний склад викидів із приватного сектору, де змішування палива та відходів є поширеною, хоча й незаконною, практикою. Висока концентрація агресивних хімічних сполук – сірки, хлору, ПАВ, – при спалюванні сміття прискорює руйнування димохідних конструкцій та підвищує ризик пожежі через утворення більш щільних і липких відкладень сажі. Наявність у димоході сажі у вигляді блискучої смоли є індикатором специфічних, небезпечних умов горіння та хімічного складу. Сажа у вигляді блискучої смоли – це креозот, який пройшов повторну конденсацію та ущільнення. Це найбільш небезпечна і важковивідна форма сажі, що утворюється в димоходах. Креозот у формі смоли є горючим матеріалом з високою теплотворною здатністю. Його наявність різко підвищує ризик пожежі в димоході [2].

Таким чином, це дослідження хімії сажі є відповіддю на соціально-екологічну проблему неконтрольованого спалювання побутових відходів, що робить його актуальним для органів охорони здоров'я та природоохоронних інституцій.

Аналіз останніх джерел

Автори [1] проводили дослідження викидів при промислових роботах та спалюванні біомаси. При цьому утворювалися токсичні фенольні сполуки, які потрапляють в атмосферу, але розкладаються там, а автори [2] досліджували побутове спалювання деревини в дров'яних печах і викиди від них дрібних частинок в атмосферу. Дослідження проводили методом газової хроматографії з масспектроскопічним детектуванням (ГХ-МС). Основний акцент робився на відмінностях на викидах з дров’яних печей та камінів. Серед визначених методом ГХ-МС речовин були заміщені феноли, дитерпеноїди, левоглюкозан. Проте вміст елементарного вуглецю в масі дрібних частинок, як правило, вищий у димі з дров'яних печей, ніж у димі з камінів.

Сажа та зола як залишки після спалювання торф’яних брикетів в побутових котлах були проаналізовані хімічними та мінералогічними методами [3]. Було отримано зразки сажі, відкладеної у витяжних шляхах котлів. Піролізна ГХ-МС дозволила ідентифікувати органічні сполуки, що належать до двадцяти різних груп. Основні та мінорні елементи у торф’яних брикетах, коксі та сажі визначали за допомогою рентгенофлуоресцентної спектроскопії (РФС). Мінеральні фази в золі визначали за допомогою рентгенівської дифракції. Отримані результати аналізу використовували для характеристики технологічних умов горіння. Відкладення сажі з більш сучасних котлів з підвищеною температурою горіння містять більше органічних сполук, які вказують на висококарбонізовану целюлозу.

Коли спалюють органічну речовину, горіння деревини виробляє найбільшу кількість ПАВ порівняно з іншими джерелами викопної енергії, такими як нафта, вугілля чи газ [4]. Викиди від спалювання деревини набувають особливого інтересу через зростаюче використання деревини як відновлюваного джерела енергії для опалення житлових приміщень. Отримані дані вказують на те, що існують специфічні для деревини профілі ПАВ, і за застосованих умов дрова ялини виробляли найменш токсичну сажу.

Для вивчення фізичних і хімічних характеристик твердих побутових відходів (ТПВ) застосовувалися проксимальний та елементний аналіз [5]. Елементний хімічний аналіз було проведено за допомогою РФ аналізатора. Суміш відходів піддавали піролізу у вертикальному реакторі періодичної дії при температурі та часі в діапазоні 200–600 °C та 20–60 хв. Термічний розклад ТПВ генерувало три основні продукти: піролітичну олію, кокс та газову суміш. Отримана олія була проаналізована на склад та охарактеризована за допомогою ГХ-МС. Було ідентифіковано приблизно 28 основних хімічних сполук.

Метою роботи є: встановлення елементного та органічного хімічного складу сажі, відібраної з побутового димоходу, для визначення її потенційної токсичності та ідентифікації маркерів джерела горіння.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити наступні задачі: провести якісний та кількісний елементний аналіз сажі за допомогою РФС з особливою увагою до вмісту важких та легких елементів, включаючи ПТМ; визначити органічний профіль екстрагованих компонентів сажі методом ГХ-МС, ідентифікуючи ключові класи сполук, зокрема піролітичні маркери, як-от похідні лігніну/целюлози та ПАВ; проаналізувати вплив різних температурних режимів ГХ-МС, що відповідали різним умовам екстракції та аналізу на якість ідентифікації органічних компонентів; на основі отриманих даних оцінити характер палива, що спалювалося, використовуючи специфічні органічні маркери.

Виклад основного матеріалу

З метою якісного елементного аналізу сажу побутового димоходу, яка при відборі переважно мала вигляд чорної блискучої смоли, досліджували за допомогою спектрометра енергій рентгенівського випромінювання Elvax Pro. Для отримання спектрів важких та легких елементів застосовували налаштування

для звичайних та легких задач, параметри яких наведені в табл. 1. Для виконання легких задач робочу камеру продували гелієм [6, 7]. Обробка результатів дослідження відбувалася з використанням спеціалізованого програмного забезпечення, яке постачається разом зі спектрометром. Результати РФС дослідження сажі показані в табл. 2 і на рис. 1. Визначення калію у кількості 46,764 % є домінуючим маркером спалювання деревини. Кальцій 42,180 % є ключовим компонентом золи деревини, але може походити і від будівельного пилу, ґрунту, або хімічних добавок. Його висока концентрація разом із калієм є чітким маркером біомаси. Цікавий показник сірки у сажі: хоча невелика кількість сірки й присутня в біомасі, така значна її концентрація 5,074 % може вказувати на спалювання деяких видів побутових відходів, особливо пластиків, гуми або паперу з друкарськими фарбами, у тому випадку, якщо виключити використання вугілля чи торфу та засобів для чищення димоходів. Дуже невелика частина сірки може бути у формі сірковмісних органічних сполук, таких як тіоестери, а саме, тіо-S-гептилестер пропіонат, визначений ГХ-МС-аналізом які можуть бути залишками неповного згоряння побутових відходів.

Таблиця 1

Параметри випромінювача спектрометра

Напруга і фільтри			Струми і стабілізація завантаження		
Параметри	Задача		Параметри	Задача	
	Звичайна	Легка		Звичайна	Легка
Напруга, кВ	45	10	Струм трубки, мкА	270	25
Фільтр, мкм	Ni, 300 + Al, 300	Без фільтра	Стабілізація, імп/с	99000	235000

Таблиця 2

Результати РФС-дослідження сажі

Ат.номер	Елемент	Серія	Інтенсивність	Вміст
19	K	K	301322	46.764 ± 0.232%
20	Ca	K	178730	42.180 ± 0.337%
16	S	K	268917	5.074 ± 0.028%
26	Fe	K	45095	2.727 ± 0.032%
14	Si	K	37496	2.315 ± 0.038%
30	Zn	K	51569	0.837 ± 0.010%
82	Pb	L	7872	0.102 ± 0.007%

У сажі було визначене залізо 2,727 %, яке є поширеним елементом у ґрунті, пилу, а також у мінеральних домішках деревини, а може також походити від корозії металевих частин димоходу або печі. Силіцій 2,315 % є ключовим елементом піску та ґрунту. Його наявність вказує на те, що паливо було забруднене землею, піском або пилом, що часто трапляється з погано очищеною деревиною.

Серед елементного складу сажі були виявлені також ПТМ цинк 0,837 % і свинець 0,102 %. Цинк є поширеним маркером спалювання фарбованої деревини. Він широко використовується в друкарських фарбах як білий пігмент, у деяких пластиках, або як покриття для оцинкованого металу. Його концентрація підтримує висновок про спалювання побутових відходів у вигляді сміття. Свинець є високотоксичним металом, який використовувався у старих фарбах, типографських чорнилах та деяких пластикових стабілізаторах. Його виявлення, навіть у низькій концентрації, є прямим доказом потенційної токсичності сажі та, ймовірно, спалювання забрудненої або обробленої деревини чи відходів.

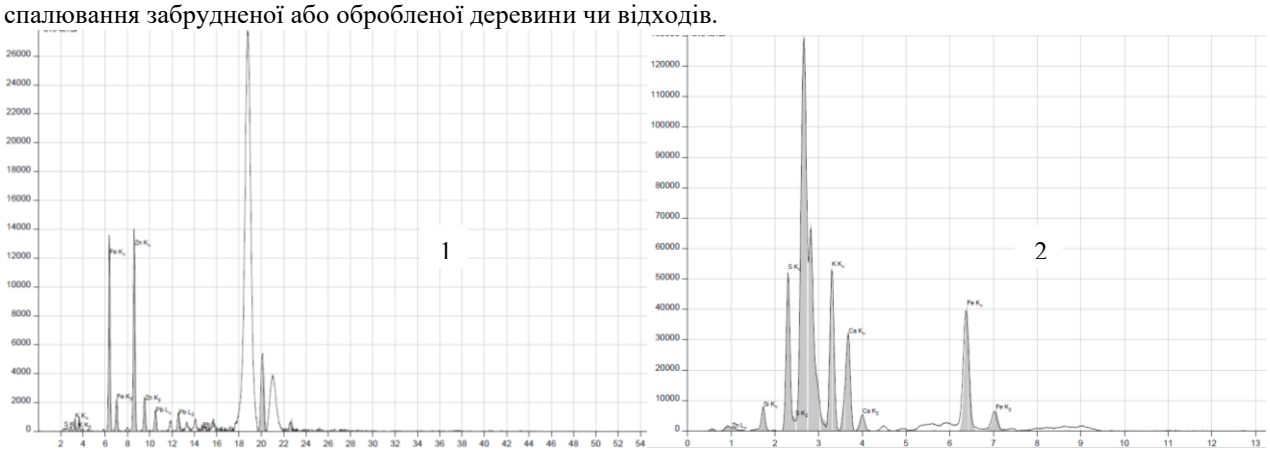

Рис. 1. РФС-спектри сажі: 1 – важкі елементи, 2 – легкі елементи

Для проведення дослідження методом ГХ сажу подрібнювали у керамічній ступці відбирали 0,2 г з допомогою аналітичних ваг AS-220/C, заливали 2 см^3 розчинника такого складу: ацетон 50 %, гексан 20 %, хлористий метилен 20 %, метанол 10 %. Розчинні сполуки екстрагували протягом 3 год, отриманий розчин

фільтрували та досліджували методом ГХ-МС з допомогою приладу GCMS-QP2020 EI Shimadzu. Капілярна колонка Rxi-5ms, довжина 30 м, діаметр 0,25 мм, фаза 0,25 мкм, сталий потік 1,5 мл/хв, газ-носій гелій; інжектор – автоінжектор AOC 20i, температура випарника 250 °C, детектор – мас-селективний, температура інтерфейсу 280 °C, іонізація – електронним ударом, енергія іонізації 70 еВ, температура іонного джерела 230 °C; температура квадруполя 150 °C.

Експеримент проводили в двох температурних режимах роботи термостата хроматографа з різними коефіцієнтами поділу потоку та об'ємом проби: 1) початкова температура 120 °C, підвищення температури до 300 °C протягом 18 хв та витримка 300 °C протягом 12 хв. Об'єм проби 1 мкл, коефіцієнт поділу потоку 50; 2) початкова температура 60 °C, витримка 2 хв, підвищення температури до 300 °C протягом 16 хв та витримка 300 °C протягом 12 хв. Об'єм проби 2 мкл, коефіцієнт поділу потоку 5.

Аналіз мас-хроматограм проводили за допомогою програмного забезпечення GCMSsolution, із використанням баз даних мас-спектрів NIST 2014, NIST 2017, SWDRUG 3.6 та програмного забезпечення NIST MS Search Program з використанням баз даних мас-спектрів CaymanSpectralLibrary_v10192019, dd2015.

Результати ГХ-МС сажі показані на рис. 2 і 3 при обох температурних режимах 1 і 2 відповідно. Результати ГХ-МС, отримані в режимі 1 та режимі 2, відрізняються насамперед профілем ідентифікованих сполук, що відображає різну чутливість методу до летких та нелетких компонентів сажі. Ця різниця зумовлена зміною ключових параметрів аналізу: високої початкової температури та високого коефіцієнту поділу потоку та низької початкової температури і низького коефіцієнту поділу потоку. Високий поділ (50:1) означає, що лише 2 % проби потрапляє на колонку. Це зменшує навантаження на колонку, але може призвести до втрати низькоконцентрованих летких сполук, Тому цей режим краще підходить для ідентифікації основних будівельних блоків креозоту – продуктів піролізу целюлози та лігніну. Низький поділ (5:1) означає, що 17 % проби потрапляє на колонку. Це збільшує чутливість до летких сполук і дозволяє краще побачити маркери спалювання сміття та розчинників. Ось чому левоглюкозан, виявлений в режимі 1 має відносний вміст 27,19 %, у режимі 2 представлений лише у слідових кількостях, о-ксилен, навпаки, в режимі 1 не виявлений, а в режимі 2 його відносний вміст 14,19 % тощо. Таким чином, режим 1 показав структурну основу сажі – креозоту з домінуванням важких біомаркерів, тоді як режим 2 виявив леткі токсичні домішки, які є критичними для діагностики спалювання сміття.

Peak#	R.Time	I.Time	F.Time	Area	Area%	Height	Height%	A/H	Mark	Name
1	2.241	2.227	2.290	73213	1.22	40375	1.43	1.81	MI	Catechol
2	2.306	2.293	2.333	93678	1.57	95120	3.36	0.98	MI	1,4:3,6-Dianhydro-.alpha.-d-glucopyranose
3	2.561	2.537	2.603	32529	0.54	17791	0.63	1.83	MI	
4	2.671	2.653	2.703	66793	1.12	45197	1.60	1.48	MI	1,2-Benzenediol, 3-methoxy-
5	2.739	2.697	2.787	79208	1.32	32616	1.15	2.43	MI	
6	2.838	2.817	2.890	106696	1.78	43809	1.55	2.44	MI	
7	3.030	3.007	3.057	41157	0.69	27947	0.99	1.47	MI	1,2,4-Cyclopentanetriol
8	3.237	3.213	3.293	509248	8.51	328982	11.63	1.55	MI	Phenol, 2,6-dimethoxy-
9	3.304	3.293	3.350	40940	0.68	23035	0.81	1.78	MI	
10	3.395	3.353	3.443	106682	1.78	47488	1.68	2.25	MI	1,6-Anhydro-.beta.-d-talopyranose
11	3.588	3.553	3.637	53812	0.90	19526	0.69	2.76	MI	
12	3.803	3.767	3.837	33163	0.55	13490	0.48	2.46	MI	CH3C(O)CH2CH2OH
13	3.856	3.830	3.890	82704	1.38	57217	2.02	1.45	MI	
14	3.978	3.963	4.000	19286	0.32	12630	0.45	1.53	MI	.beta.-D-Glucopyranose, 1,6-anhydro-
15	4.033	4.013	4.087	368250	6.16	253857	8.97	1.45	MI	3,5-Dimethoxy-4-hydroxytoluene
16	4.111	4.087	4.180	56165	0.94	27090	0.96	2.07	MI	trans-Isoeugenol
17	4.199	4.187	4.243	42155	0.70	26106	0.92	1.61	MI	
18	4.357	4.320	4.457	1626361	27.19	419450	14.82	3.88	MI	.beta.-D-Glucopyranose, 1,6-anhydro-
19	4.478	4.457	4.533	88252	1.48	34828	1.23	2.53	MI	Apocynin
20	4.766	4.743	4.807	354771	5.93	242413	8.57	1.46	MI	Benzene, 1,2,3-trimethoxy-5-methyl-
21	4.821	4.810	4.840	8793	0.15	9371	0.33	0.94	MI	
22	4.863	4.843	4.880	53417	0.89	36763	1.30	1.45	MI	Guaiacol, 4-butyl-
23	4.900	4.883	4.990	378246	6.32	212780	7.52	1.78	MI	1,3-Di-O-acetyl-.alpha.-.beta.-d-ribopyranose
24	5.190	5.167	5.237	41771	0.70	19542	0.69	2.14	MI	Tyrosol, acetate
25	5.417	5.387	5.490	239742	4.01	85420	3.02	2.81	MI	
26	5.519	5.490	5.557	87212	1.46	54407	1.92	1.60	MI	(E)-2,6-Dimethoxy-4-(prop-1-en-1-yl)phenol
27	5.584	5.557	5.623	141778	2.37	96462	3.41	1.47	MI	Homosyringaldehyde
28	5.800	5.777	5.860	54987	0.92	22328	0.79	2.46	MI	Propionic acid, thio-, S-heptyl ester
29	6.059	6.020	6.080	41093	0.69	18436	0.65	2.23	MI	
30	6.178	6.157	6.217	41433	0.69	17513	0.62	2.37	MI	Benzaldehyde, 4-hydroxy-3,5-dimethoxy-
31	6.526	6.507	6.567	66529	1.11	36371	1.29	1.83	MI	(E)-2,6-Dimethoxy-4-(prop-1-en-1-yl)phenol
32	6.717	6.697	6.740	13054	0.22	8991	0.32	1.45	MI	
33	6.872	6.840	6.960	188441	3.15	79624	2.81	2.37	MI	Ethanone, 1-(4-hydroxy-3,5-dimethoxyphenyl
34	7.026	7.003	7.050	20541	0.34	13117	0.46	1.57	MI	9H-Fluoren-9-one
35	7.228	7.203	7.307	235146	3.93	96624	3.41	2.43	MI	Syringylacetone
36	7.418	7.373	7.480	84973	1.42	35934	1.27	2.36	MI	Phenanthrene
37	7.788	7.737	7.840	94604	1.58	41805	1.48	2.26	MI	1-Propanone, 1-(4-hydroxy-3,5-dimethoxyphe
38	9.000	8.960	9.027	34092	0.57	17702	0.63	1.93	MI	Palmitic Acid
39	9.299	9.273	9.320	10095	0.17	9227	0.33	1.09	MI	7-Hydroxycadalene
40	9.485	9.463	9.527	30335	0.51	16228	0.57	1.87	MI	
41	10.140	10.107	10.190	91112	1.52	34812	1.23	2.62	MI	Pyrene
42	10.619	10.587	10.677	89902	1.50	31323	1.11	2.87	MI	Pyrene
43	15.115	15.083	15.163	58441	0.98	26026	0.92	2.25	MI	
				5980800	100.00	2829773	100.00			

Рис. 2. Результати ГХ-МС аналізу сажі при температурному режимі 1

Інтерпретуючи органічний профіль екстрактів сажі методом ГХ-МС, виявлені органічні речовини можна умовно поділити на наступні групи: маркери піролізу целюлози, маркери піролізу лігніну, ПАВ, маркери спалювання побутових синтетичних відходів, інші органічні сполуки. Домінуюча присутність:1,6-ангідроβ-d-глюкопіранози або левоглюкозану є одним із найбільш важливих та стабільних маркерів спалювання целюлози

Його високі значення особливо у піку 18, що становить 27,19 % у першому режимі підтверджують, що основним паливом була деревина. Похідні фенолу, гваяколу та сирингілу, як, наприклад, 2,6-диметоксифенол, 3,5-диметокси-4-гідрокситолуен, гомосирингальдегід, сирингилацетон, – є продуктами термічного розкладу лігніну – полімеру, що формує стінки рослинних клітин. Співвідношення гваяколових і сирингілових похідних може допомогти ідентифікувати тип деревини, яку використовували. Кетони та альдегіди сирингілового ряду разом із 2,6-диметоксифенолом, є високолеткими, липкими сполуками, які активно беруть участь у конденсації, утворюючи смолисту фракцію креозот.

ak#	R.Time	I.Time	F.Time	Area	Area%	Height	Height%	A/H	Mark	Name
1	2.336	2.320	2.427	4490652	4.07	3674779	6.03	1.22	MI	2-Pentanone, 4-hydroxy-4-methyl-
2	2.673	2.643	2.743	990874	0.90	660503	1.08	1.50	MI	Benzene, 1,3-dimethyl-
3	2.948	2.903	3.030	15654057	14.19	11307683	18.54	1.38	MI	o-Xylene
4	4.088	4.067	4.113	754720	0.68	401401	0.66	1.88	MI	Phenol
5	5.261	5.233	5.333	1482241	1.34	600363	0.98	2.47	MI	Phenol, 3-methyl-
6	5.461	5.423	5.567	3470411	3.15	824685	1.35	4.21	MI	Cyclopropyl carbinol
7	6.741	6.693	6.787	7636277	6.92	2106074	3.45	3.63	MI	Catechol
8	6.823	6.800	6.893	3334433	3.02	959862	1.57	3.47	MI	1,4:3,6-Dianhydro-.alpha.-d-glucopyranose
9	7.362	7.333	7.453	4848777	4.40	1728779	2.83	2.80	MI	1,2-Benzenediol, 3-methoxy-
10	7.741	7.703	7.823	3740479	3.39	1134964	1.86	3.30	MI	1,2-Benzenediol, 4-methyl-
11	8.241	8.190	8.267	11801070	10.70	6567828	10.77	1.80	MI	Phenol, 2,6-dimethoxy-
12	9.136	9.097	9.153	7080113	6.42	4622896	7.58	1.53	MI	3,5-Dimethoxy-4-hydroxytoluene
13	9.164	9.153	9.197	1125784	1.02	984858	1.61	1.14	MI	trans-Isoeugenol
14	9.539	9.510	9.590	1756805	1.59	968256	1.59	1.81	MI	Apocynin
15	9.842	9.803	9.883	8371477	7.59	4526540	7.42	1.85	MI	Benzene, 1,2,3-trimethoxy-5-methyl-
16	9.909	9.887	9.940	1677053	1.52	1169865	1.92	1.43	MI	2-Propanone, 1-(4-hydroxy-3-methoxyphenyl)
17	10.066	10.017	10.083	1478228	1.34	702111	1.15	2.11	MI	
18	10.147	10.097	10.147	525903	0.48	301867	0.49	1.74	MI	
19	10.181	10.147	10.227	2736859	2.48	1394661	2.29	1.96	MI	Butyric acid, 4-(m-hydroxyphenyl)-
20	10.356	10.313	10.373	1620358	1.47	710985	1.17	2.28	MI	
21	10.387	10.373	10.427	403940	0.37	286840	0.47	1.41	MI	
22	10.483	10.467	10.513	2522140	2.29	1761218	2.89	1.43	MI	(E)-2,6-Dimethoxy-4-(prop-1-en-1-yl)phenol
23	10.539	10.513	10.560	2677544	2.43	2255103	3.70	1.19	MI	Homosyringaldehyde
24	11.285	11.250	11.310	2500778	2.27	1763223	2.89	1.42	MI	(E)-2,6-Dimethoxy-4-(prop-1-en-1-yl)phenol
25	11.587	11.553	11.627	3650135	3.31	1812314	2.97	2.01	MI	Ethanone, 1-(4-hydroxy-3,5-dimethoxyphenyl)
26	11.860	11.790	11.910	5884849	5.33	2019644	3.31	2.91	MI	Syringylacetone
27	11.989	11.960	12.010	1657412	1.50	1243008	2.04	1.33	MI	Phenanthrene
28	12.254	12.217	12.283	1942939	1.76	1168223	1.92	1.66	MI	1-Propanone, 1-(4-hydroxy-3,5-dimethoxyphe
29	13.129	13.093	13.150	1548033	1.40	1228494	2.01	1.26	MI	n-Hexadecanoic acid
30	14.021	14.000	14.057	1281419	1.16	995408	1.63	1.29	MI	Pyrene
31	14.387	14.360	14.410	1669978	1.51	1105703	1.81	1.51	MI	Pyrene
				110315738	100.00	60988138	100.00			

Рис. 3. Результати ГХ-МС аналізу сажі при температурному режимі 2

Серед ПАВ виявлені основні наступні речовини: фенантрен та пірен-9Н-флуорен-9-он та їхні похідні, які є канцерогенними та мутагенними забруднювачами. Їхня присутність підтверджує неповне згоряння органічного палива. 7-Гідроксикадален є дитерпеноїдом та маркером хвойної деревини. О-ксилен є маркером нафтопродуктів та пластику, і може утворюватися при піролізі деяких пластиків, наприклад, полістиролу. Його високий відносний вміст близько 14 % у другому режимі разом із виявленням Pb та Zn методом РФС підтримує гіпотезу про спалювання сміття. Пальмітинова кислота є типовою жирною кислотою, може мати походження з залишків палива та жирів. Циклопропілкарбінол є продуктом піролізу, діацетоновий спирт може бути продуктом реакції в екстракті, сірковмісна сполука, може мати походження з деревини [4].

Органічний розчинник, який був використаний: ацетон, гексан, хлористий метилен, метанол, є ефективним, але все ж таки не екстрагує всю матрицю смоли. Частина найбільш в'язких і полімеризованих фракцій залишається на фільтрі. Креозот містить дуже важкі органічні молекули, такі, як високомолекулярні ПАВ, висококиплячі смоли, які можуть не випаровуватися або частково розкладатися в інжекторі ГХ-МС при 250 °С.

Щоб зробити більш повний висновок про походження сажі побутового димоходу потрібно провести подальші дослідження, а саме, визначення точної концентрації кожного ПАВ що для оцінки їхнього ризику для здоров'я, наприклад, бензо[а]пірену, розділення органічної фракції на більш специфічні фракції: нейтральну, кислотну, основну перед ГХ-МС аналізом для зменшення матричного ефекту та кращої ідентифікації, визначення конкретного типу деревини, що спалювалася, на основі співвідношення органічних маркерів (S/G ratio), визначення розміру, форми частинок та їхньої внутрішньої структури методом скануючої електронної мікроскопії тощо.

Висновки

1. Проведений аналіз сажі підтвердив її складний вміст, що включає високі концентрації мінеральних елементів та низку органічних токсикантів.
2. РФС-аналіз показав, що мінеральна частина сажі переважно складається з калію та кальцію, що є маркером спалювання біомаси деревини. Водночас виявлено присутність ПТМ, таких як свинець та цинк, що певною мірою вказує на спалювання сміття.
3. ГХ-МС-аналіз органічної фракції підтвердив, що джерелом сажі є піроліз та неповне згоряння деревини, про що свідчить домінування левоглюкозану та великої кількості похідних лігніну.
4. Виявлення ПАВ, таких як фенантрен та пірен, підтверджує, що сажа з побутового димоходу є небезпечним джерелом забруднення повітря канцерогенними органічними сполуками.
5. Порівняння двох режимів ГХ-МС свідчить про чутливість ідентифікації органічних компонентів до умов аналізу, що підкреслює необхідність оптимізації методик для повного профілювання сажових матриць.

6. Наявність ПАВ та фенолів підтверджує, що фізична форма сажі – блискуча смола креозот, є результатом неповного згоряння при низьких температурах.

Література

1. Sources of Fine Organic Aerosol: Pine, Oak, and Synthetic Log Combustion in Residential Fireplaces / W. F. Rogge, L. M. Hildemann, M. A. Mazurek та ін. // Environmental Science & Technology. – 1998. – Vol. 32, No 1. – P. 13–22. – DOI: 10.1021/es960930b.

2. Fine, P. M. Chemical Characterization of Fine Particle Emissions from the Wood Stove Combustion of Prevalent United States Tree Species / P. M. Fine, G. R. Cass, B. R. T. Simoneit // Environmental Engineering Science. – 2004. – Vol. 21, No 6. – P. 705–721. – DOI: 10.1089/ees.2004.21.705.

3. Růžičková, J. Chemical and Mineralogical Composition of Soot and Ash from the Combustion of Peat Briquettes in Household Boilers / J. Růžičková, M. Kucbel, H. Raclavská та ін. // Energies. – 2019. – Vol. 12, No 19. – P. 3784. – DOI: 10.3390/en12193784.

4. Wood-Specific Polycyclic Aromatic Hydrocarbon (PAH) Patterns in Soot Using Gas Chromatography-Atmospheric Pressure Laser Ionization-Mass Spectrometry (GC-APLI-MS) / C. Achten, F. Beer, C. Stader, S. Brinkhaus // – 2015. – DOI: 10.1002/ajh.24314.

5. Characterisation and gas chromatography-mass spectrometry analysis of products from pyrolysis of municipal solid waste using a fixed-bed reactor / O. Tursunov, I. Karimov, N. Abduganiyev та ін. // Journal of Ecological Engineering. – 2025. – Vol. 26, No 3. – P. 157–170. – DOI: 10.12911/22998993/203363.

6. Tkachuk, H. S. Investigation of quality of golden jewelery by X-ray fluorescent method / H. S. Tkachuk, O. Yu. Navrotska // Technologies and strategies for the implementation of scientific achievements : collection of scientific papers «SCIENTIA» with Proceedings of the I International Scientific and Theoretical Conference (Vol. 2), May 27, 2022. – Stockholm, Kingdom of Sweden : European Scientific Platform, 2022. – P. 36–37. – ISBN 979-8-88526-802-8. – DOI 10.36074/scientia-27.05.2022.

7. Tkachuk, H. S. Research of the composition of golden and silver products by the X-ray fluorescent method / H. S. Tkachuk, O. Yu. Navrotska // Scientific Collection «InterConf», (176): with the Proceedings of the 3rd International Scientific and Practical Conference «Modern Directions and Movements in Science» (October 26 –28, 2023; Luxembourg, Grand Duchy of Luxembourg) / comp. by LLC SPC «InterConf». – Luxembourg : Progress Publishers, 2023. – P. 162–166. – ISBN 978-2-87996-927-5 (series).

References

1. Sources of Fine Organic Aerosol: Pine, Oak, and Synthetic Log Combustion in Residential Fireplaces / W. F. Rogge, L. M. Hildemann, M. A. Mazurek та ін. // Environmental Science & Technology. – 1998. – Vol. 32, No 1. – P. 13–22. – DOI: 10.1021/es960930b.

2. Fine, P. M. Chemical Characterization of Fine Particle Emissions from the Wood Stove Combustion of Prevalent United States Tree Species / P. M. Fine, G. R. Cass, B. R. T. Simoneit // Environmental Engineering Science. – 2004. – Vol. 21, No 6. – P. 705–721. – DOI: 10.1089/ees.2004.21.705.

3. Růžičková, J. Chemical and Mineralogical Composition of Soot and Ash from the Combustion of Peat Briquettes in Household Boilers / J. Růžičková, M. Kucbel, H. Raclavská та ін. // Energies. – 2019. – Vol. 12, No 19. – P. 3784. – DOI: 10.3390/en12193784.

4. Wood-Specific Polycyclic Aromatic Hydrocarbon (PAH) Patterns in Soot Using Gas Chromatography-Atmospheric Pressure Laser Ionization-Mass Spectrometry (GC-APLI-MS) / C. Achten, F. Beer, C. Stader, S. Brinkhaus // – 2015. – DOI: 10.1002/ajh.24314.

5. Characterisation and gas chromatography-mass spectrometry analysis of products from pyrolysis of municipal solid waste using a fixed-bed reactor / O. Tursunov, I. Karimov, N. Abduganiyev та ін. // Journal of Ecological Engineering. – 2025. – Vol. 26, No 3. – P. 157–170. – DOI: 10.12911/22998993/203363.

6. Tkachuk, H. S. Investigation of quality of golden jewelery by X-ray fluorescent method / H. S. Tkachuk, O. Yu. Navrotska // Technologies and strategies for the implementation of scientific achievements : collection of scientific papers «SCIENTIA» with Proceedings of the I International Scientific and Theoretical Conference (Vol. 2), May 27, 2022. – Stockholm, Kingdom of Sweden : European Scientific Platform, 2022. – P. 36–37. – ISBN 979-8-88526-802-8. – DOI 10.36074/scientia-27.05.2022.

7. Tkachuk, H. S. Research of the composition of golden and silver products by the X-ray fluorescent method / H. S. Tkachuk, O. Yu. Navrotska // Scientific Collection «InterConf», (176): with the Proceedings of the 3rd International Scientific and Practical Conference «Modern Directions and Movements in Science» (October 26 –28, 2023; Luxembourg, Grand Duchy of Luxembourg) / comp. by LLC SPC «InterConf». – Luxembourg : Progress Publishers, 2023. – P. 162–166. – ISBN 978-2-87996-927-5 (series).