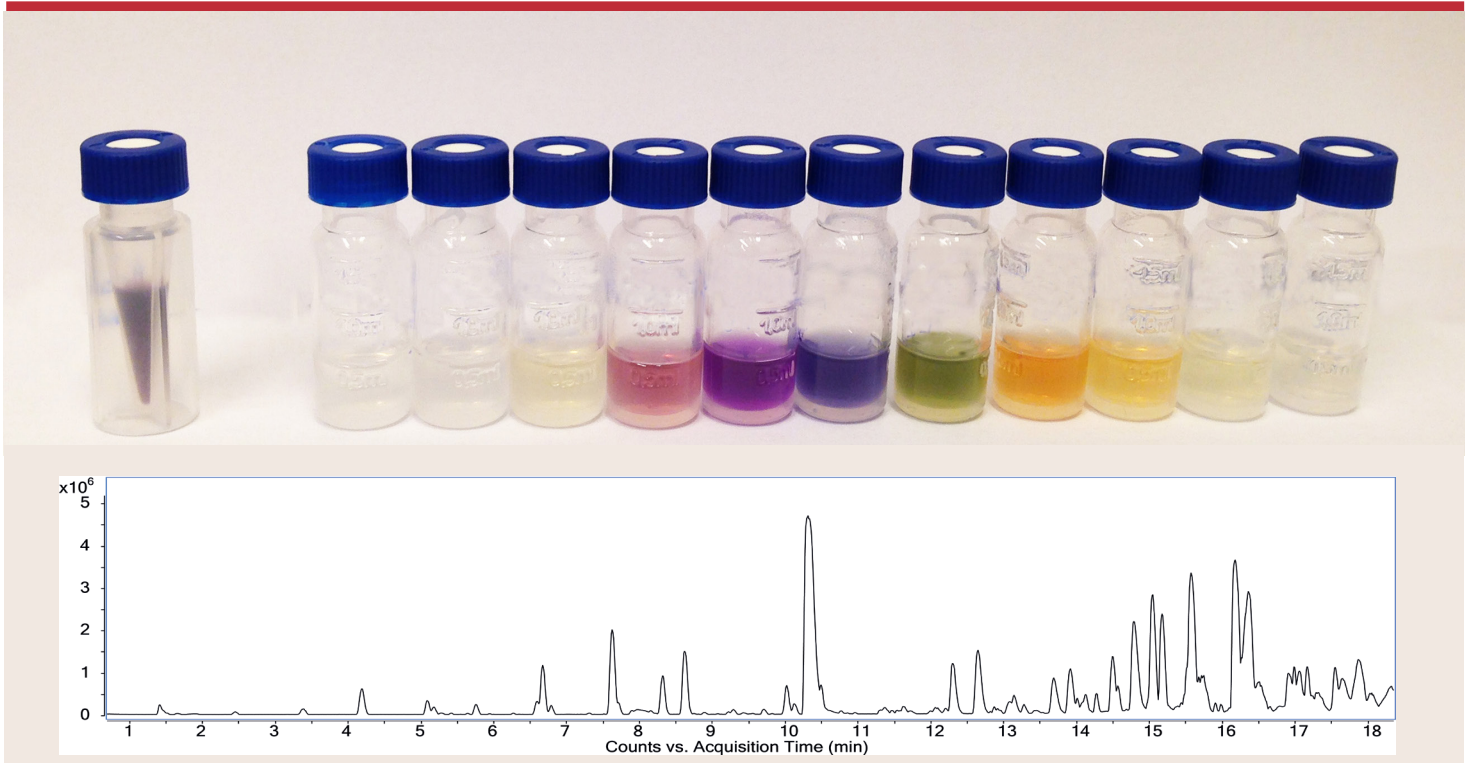


Linda Bengtström  
Sammenfatning af ph.d.-afhandling

.....

# Chemical identification of contaminants in paper and board food contact materials



## Resume' (summary in Danish)

Papir og pap anvendes til en række forskellige materialer i kontakt med fødevarer, såsom bagepapir, mikrobølge-popcorns poser og emballager til morgenmadsprodukter og fastfood. Trods den omfattende anvendelse, mangler der viden både om den kemiske sammensætning af forskellige fødevarekontaktmaterialer af pap og papir og de toksikologiske effekter af disse forbindelser.

Formålet med dette PhD-studie var at udvikle en rationel interdisciplinær strategi til screening og identifikation af kemiske stoffer i materialer af pap og papir med potentielt sundhedsskadelige effekter. Det første skridt i vores foreslåede strategi er at udvikle en omfattende ekstraktionsteknik, der er kompatibel med både analytisk kemiske og toksikologiske analyser. Til dette formål har vi udviklet en aktiv prøveudtagningsmetode til opsamling af små flygtige organiske forbindelser. Semi- og ikke-flygtige forbindelser blev ekstraheret i et reflux system med kogende ethanol.

Efter en indledende *in vitro* screenings-runde af 20 forskellige pap- og papirprøver blev fem prøver med positive virkninger udvalgt til fraktionering. Sure og basiske HPLC-fraktioner blev derefter testet i cellebaserede assays i en anden screeningsrunde. Fraktioneringen blev anvendt til at reducere antallet af forbindelser, der skal identificeres, samt at reducere eventuel matrix effekt i den massespektrometriske detektion.

Derefter blev fraktionerne analyseret ved gaskromatografi og væskechromatografi koblet til højtopløseligt massespektrometri. Disse to teknikker blev designet til at være så komplementære som muligt. Ved også at inkludere væskechromatografi i stedet for udelukkende at anvende gaskromatografi, er muligheden for at identificere forbindelser med potentielt sundhedsskadelige effekter styrket. Flere trin i den tentative gaskromatografiske identifikation kan automatiseres og på grund af standardiseringen muliggøres søgninger i store massespektrometriske biblioteker. Disse biblioteker mangler i væskechromatografi, og en stor del af den tentative identifikation skal derfor udføres manuelt. For at lette den tentative identifikation ved væskechromatografi opbyggede vi en database indeholdende præcise masser for ca. 2.100 kemiske forbindelser rapporteret at være forekommende i pap og papir. Resultater fra undersøgelsen viser, at både isotopforholdet og hits for de nøjagtige masser i databasen i høj grad forbedrer muligheden for en tentativ identifikation.

Ud fra en liste af tentativt identificerede forbindelser udarbejdet til de specifikke assays blev udvalgt stoffer til yderligere verifikation af identitet. Denne udvælgelse var baseret på tidligere rapporterede effekter, strukturelle ligheder med kendte ligander, og tilgængeligheden af standarder for identificerede forbindelser. Da enhver positiv identifikation fra databaser bør betragtes som tentativ, blev kromatografisk og massespektrometrisk sammenligning med analytiske standarder anvendt til at verificere identifikationen.

Ækvivalensfaktorer for de oprindeligt observerede toksikologiske effekter og fra summen af alle de verificerede forbindelser fra samme assay blev beregnet. Ud fra disse resultater, konkluderede vi at de oprindeligt observerede effekter på metabolismen af miljøfremmede stoffer kun i mindre grad kunne henføres til tre farvestoffer. De hormonforstyrrende effekter kunne i vid udstrækning kunne forklares ved tilstedeværelse af henholdsvis blødgørere i genbrugsfibre og ved lim anvendt i nye fibre.