

## Povzetek

V okviru doktorskega dela sem razvil in validiral enostavno, poceni in občutljivo metodo za direktno določanje devetih analitov iz štirih skupin spojin v pijačah. Analite sem izbral na podlagi identifikacije v predhodno izvedeni migracijski študiji na polimernih tesnilih kronskih zamaškov in verjetnosti njihove prisotnosti v realnih vzorcih kot posledice migracije iz materialov za stik z živili. Spojine sem predkoncentriral s pomočjo mikroekstrakcije na trdno fazo (SPME) in jih analiziral s plinsko kromatografijo, sklopljeno s tandemsko masno spektrometrijo (GC-MS/MS).

Pri svojih raziskavah sem optimiziral naslednje SPME parametre: izbira stacionarne faze vlakna, vpliv dodatka NaCl, vpliv časa in temperature ekstrakcije ter vpliv matrice. V povezavi s slednjim sem s preprosto metodo GC-FID spremljal preostanek organskega topila v vzorcih in analiznih raztopinah. Ugotovil sem, da je z uporabo ultra inertne modifikacije stacionarne faze HP-5 kolone mogoče polarne spojine (parabene) določati brez derivatizacije, kar je ena izmed bistvenih prednosti razvite metode. Dokazal sem, da je cenovno dostopna kemikalija fenil diklorofosfat kot interni standard primerljiva in celo boljša alternativa izotopsko označenim analogom analitov. Meje zaznave metode SPME-GC-MS/MS so bile v območju 0,005 – 0,2 µg/L, relativni standardni odmiki v območju 0,8 – 5,4 % in točnost določitve za posamične analite 98 – 109 %.

V steklenicah, ki sem jih zaprl s kronskimi zamaški, sem izvedel migracijsko študijo v različnih topilih in modelnih raztopinah za preverjanje migracije iz embalaže, pri kateri sem izpostavil vzorce na 50 °C za dobo šestih mesecev in dokazal prehajanje nekaterih analitov v raztopine. Izvedel sem tudi migracijsko študijo s plastičnim fermentorjem, pri kateri sem z vzorčenjem ob različnih časovnih točkah dokazal, da je prisotnost butiliranega hidroksitoluena posledica migracije s kontaktne površine posode v modelno raztopino. Analiziral sem komercialno dostopne in domače vzorce alkoholnih pijač in kisov različnih starosti, v katerih sem določil tako sledove kot tudi večje koncentracije vseh analitov, razen *terc*-butilhidrokinona in tris(2-butoksietil)fosfata.

**Ključne besede:** materiali za stik z živili, kontaktna embalaža, migriranje spojin, SPME, GC-MS/MS, parabeni, fenolni antioksidanti, plastifikatorji