

А. Б. Урюпин, А. С. Перегудов, К. А. Кочетков, Л. Н. Булатникова,
С. С. Киселев, Ю. С. Некрасов

ИССЛЕДОВАНИЕ КАЧЕСТВЕННОГО И КОЛИЧЕСТВЕННОГО СОСТАВА ЖИДКОСТЕЙ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СИГАРЕТ

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений имени А. Н. Несмеянова РАН, Москва, Россия

Изучен состав жидкостей для “электронных сигарет” без предварительной пробоподготовки методами одно- и двумерной гомо- и гетероядерной корреляционной спектроскопии ЯМР ^1H и ^{13}C и масс-спектрометрии с ионизацией электрораспылением (ESI-MS). Показано, что по совокупности основных компонентов исследованные смеси не относятся к табачной продукции.

Ключевые слова: жидкости для электронных сигарет; анализ; ядерный магнитный резонанс; масс-спектрометрия.

После патентования и начала крупномасштабного производства в КНР так называемых “электронных сигарет” (“е-сигарет”) прошло уже более 5 лет [1]. В подобного рода устройствах (“е-сигаретах”, “е-сигарах”, “е-трубках”) под действием струи вдыхаемого потребителем через мундштук воздуха генерируются бездымные частицы аэрозоля, имитирующие процесс курения (рис. 1) [2]. Свойства этого аэрозоля и его возможный физиологический эффект в существенной мере определяются химическим составом жидкостей, заправляемых производителем в сменные картриджи, поскольку температура при их распылении не превышает $55\text{ }^\circ\text{C}$ [3]. Доступные стандартные методики анализа состава жидкостей для картриджей “е-сигарет” не разработаны. Согласно различным источникам [1 – 4] эти жидкости, помимо обязательного парообразующего компонента — воды, могут содержать 1,2-пропиленгликоль, глицерин, никотин, “алкалоид табака” (смесь 4 основных алкалоидов табака, включая никотин и анабазин), “ароматизаторы” (в частности ментол, правомерность применения которого в табачной продукции ставится под сомнение Food and Drug Administration в США), а также этанол, раствор аммиака, антиоксидант (т.н. “*трет*-бутокситолуол”, который является, по-видимому, 3,5-ди-*трет*-бутил-4-гидрокситолуолом) и “эссенцию табака”, которая может содержать сотни веществ, экстрагированных из табачного сырья соответствующим растворителем. Чтобы объективно оценить медицинский эффект перехода к потреблению “е-сигарет” и его отдаленные последствия, а также избежать поспешных выводов об “улучшении здоровья курильщиков и их окружающих” [3], необходимо располагать более точными данными о составе веществ, формирующих аэрозоль. Как известно, вдыхание аэрозоля может влиять и на склонность к заболеванию туберкулезом, как это имеет место в случае курительных табачных изделий [4, 5]. Кроме того, упомянутый в числе возможных компонентов 1,2-пропиленгликоль проявляет токсический эффект на микроорганизмах [6], а в составе различных

рецептур обладает побочным действием на организм пациента [7]. Не исключено, что пропиленгликоль, как и глицерин, ингибирует действие ряда противотуберкулезных препаратов, в частности, этамбутола, который обладает способностью быстро проникать внутрь активно размножающихся клеток микобактерий, тормозить биосинтез арабиногалактана и липоарабиноманнана [8 – 10] — основных структурных компонентов клеточной стенки микобактерий, нарушая их клеточный метаболизм и препятствуя формированию клеточной стенки, что приводит к повышению ее проницаемости. Поэтому наличие в составе “е-сигарет” полиолов (1,2-пропиленгликоля и глицерина) с учетом напряженной эпидемической ситуации по туберкулезу и возросшей устойчивости возбудителя к лекарственным препаратам [11] в РФ вызывает тревогу.

В немногочисленных публикациях 2007 – 2010 гг., посвященных исследованию состава жидкостей для “е-сигарет” в качестве аналитических методов использовались газо-жидкостная хроматография (GC), самостоятельно или в сочетании с масс-спектрометрией (GC-MS), жидкостная хроматография — масс-спектрометрия (LC-MS), а также масс-спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой (ICP-MS) для определения содержания тяжелых металлов. Этими методами в составе жидкостей для одной из разновидностей “е-сигарет” “Ruyan” были обнаружены 1,2-пропиленгликоль (около 90 % от общей массы), вода (8,8 %), никотин (1,4 %), глицерин (0,1 %), а также следовые количества толуола, “бипиридина” (по-видимому имеется в виду β -бипиридил), никотирина (метаболита никотина), этанола и изопропанола [3]. С точки зрения Федерального закона № 268-ФЗ от 22.12.2008 “Технический регламент на табачную продукцию” смеси подобного состава, содержащиеся в “е-сигаретах”, не являются табачной продукцией, поэтому возникает проблема их позиционирования на потребительском рынке [12]. Согласно информации Food and Drug Administration жидкость для картриджей может также содержать примесь высокотоксичного диэтиленгликоля [6].

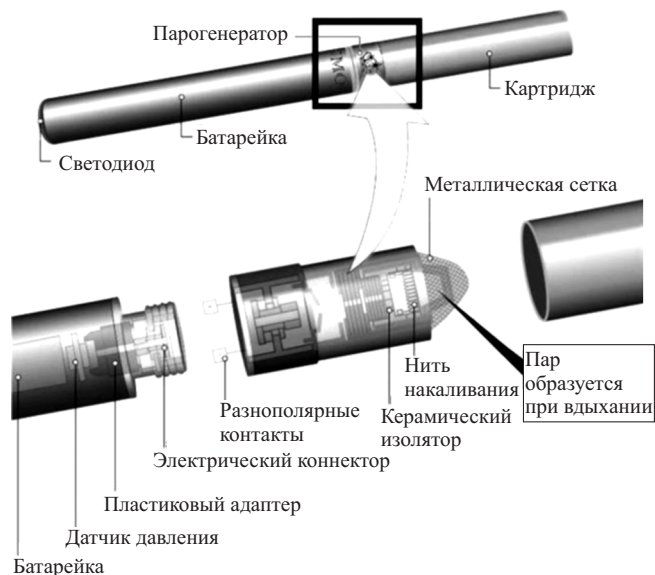


Рис. 1. Устройство электронной сигареты [2].

Использованные ранее варианты методов GC-MS и LC-MS, несмотря на их высокую чувствительность, требуют предварительной разработки методик хроматографического разделения смесей.

Вместе с тем в последние годы для анализа сложных смесей органических соединений, включая пищевую продукцию, с успехом применяется метод ЯМР (ядерного магнитного резонанса) в его современном варианте с использованием гомо- и гетеро-корреляции химических сдвигов протонов и других ядер [13 – 16]. Метод позволяет быстро идентифицировать основные компоненты смесей и провести количественный анализ [17] с учетом ограничений, накладываемых на их концентрации чувствительностью прибора.

Целью настоящей работы является оценка возможности использования метода ЯМР для определения без предварительной пробоподготовки химического состава жидкостей для “e-сигарет”, предлагаемых для реализации на территории России. Более чувствительный метод масс-спектрометрии с ионизацией электрораспылением (ESI-MS) опробован в качестве средства обнаружения тех компонентов, предполагаемые концентрации которых существенно ниже общепринятых при регистрации ЯМР-спектров.

Экспериментальная часть

В качестве объектов исследования использовали жидкости различного происхождения (табл. 1), предназначенные для заполнения картриджей “e-сигарет”. Для анализа отбирали аликвотные пробы, объем которых определялся требованиями метода.

Спектры ЯМР ^1H и $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ были зарегистрированы на спектрометре AvanceTM 600 фирмы Брукер (Германия) с использованием Z-градиентного датчика BBIZ (внутренняя катушка ^1H , внешняя катушка ^{13}C). Рабочая частота по протонам и ядрам ^{13}C составляет 600,22 и 150,925 МГц соответственно. Химические сдвиги

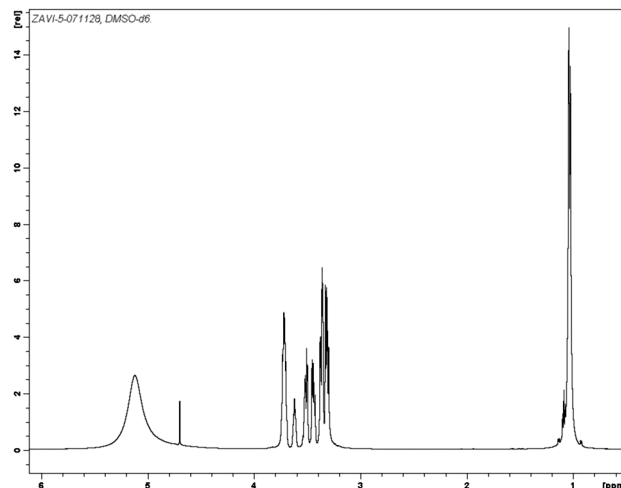


Рис. 2. Спектр 1D ^1H ЯМР образца 1 в ДМСО- d_6 .

(ХС) протонов и ядер ^{13}C для растворов в ДМСО- d_6 были определены соответственно относительно остаточного протонного сигнала растворителя (2,50 м.д.) или сигнала ДМСО- d_6 (39,9 м.д.) и пересчитаны к ТМС. Точность определения ХС не хуже 0,001 м.д. и 0,03 м.д. соответственно для протонных и углеродных спектров.

Одномерные (1D) спектры ЯМР ^{13}C записаны в режиме с широкополосной развязкой по протонам ($^{13}\text{C}\{-^1\text{H}\}$). Режим съемки: the inverse gated decoupling (для устранения влияния ЯЭО — ядерного эффекта Оверхаузера), большое число точек для накопления (64К) и достаточно длительные задержки между импульсами $d1 = 5 - 10$ с (для полного восстановления исходной намагниченности при 30° импульсе) позволял корректно сравнивать интенсивности сигналов.

Двумерные (2D) спектры гомо- и гетеро-корреляции химических сдвигов ядер ^1H и ^{13}C записаны в режимах COSY (Correlation Spectroscopy) и HMQC (Heteronuclear Multiple Quantum Coherence — гетероядерная многоквантовая корреляционная спектроскопия).

Масс-спектры с ионизацией электрораспылением (ESI-MS) регистрировали на тандемном масс-спектро-

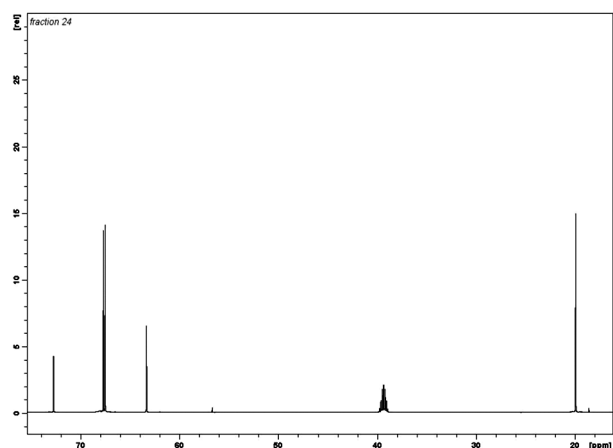


Рис. 3. Спектр 1D ^{13}C ЯМР образца 1 в ДМСО- d_6 .

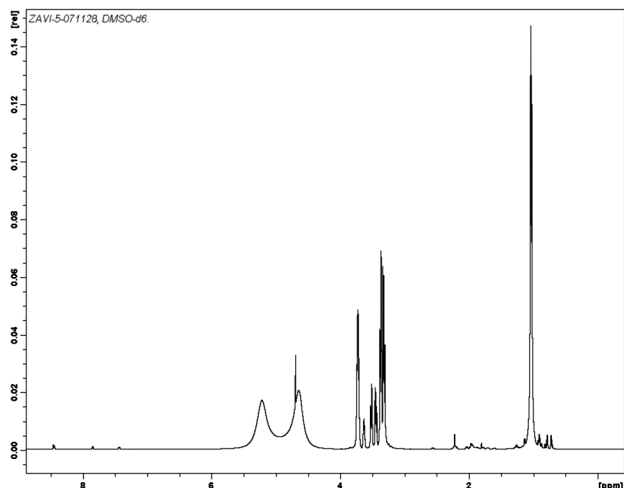


Рис. 4. Спектр 1D ^1H ЯМР образца 7.

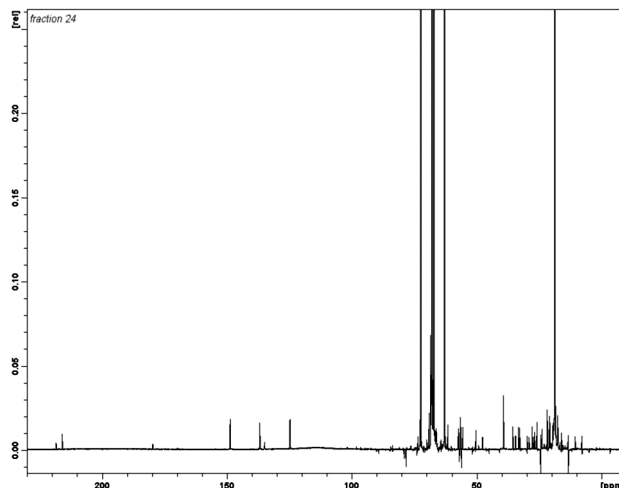


Рис. 5. Спектр 1D ^{13}C ЯМР образца 7.

метре Finnigan LCQ Advantage (США), оборудованном масс-анализатором с октапольной ионной ловушкой в режиме регистрации положительных ионов; распыляющий и осушающий газ — азот. Температура трансферного капилляра — 150 °С, потенциал между иглой распылителя и противоэлектродом — 4,5 кВ, энергия столкновений в режиме МС/МС (СЕ = 25 – 35 %). Растворы образцов в ацетонитриле (Merck) с концентрацией 0,5 % вводили в ионный источник через инжектор Reodyne с петлей на 5 мкл. Сбор и обработка данных осуществлялась с помощью программы XCalibur версии 1.3.

Содержание воды в образцах определяли кулонометрическим титрованием по Карлу Фишеру электрогенерированным йодом до заданной конечной точки с использованием биамперометрической индикаторной системы в анализаторе КАС-01МД (Редкинский филиал НИПК, Рязань, Тверской обл.) по методике, разработанной нами ранее [18].

Результаты и их обсуждение

Согласно патентным источникам [1], образцы жидкостей для “е-сигарет” могли содержать воду, наличие которой необходимо учитывать при осуществлении ЯМР-эксперимента (регистрация спектров в режиме подавления сигнала растворителя). Поэтому предварительно было установлено реальное содержание воды в исследуемых образцах; результаты анализа приведены в табл. 1.

Обращает на себя внимание относительно высокое содержание воды в образцах 2 и 7. Сопоставление с приведенными выше литературными данными, а также оценка внешнего вида жидкостей (темно-коричневый цвет) заставляют предположить, что в данном случае при составлении рецептуры производители использовали не химически чистый никотин, а непосредственно многокомпонентный водный экстракт табачного сырья.

Для наиболее характерных образцов 1 и 7, резко отличающихся содержанием воды, были зарегистрированы 1D ^1H - и ^{13}C -ЯМР спектры их концентрирован-

ных (50 %) растворов в дейтерированном диметилсульфоксиде (DMSO- d_6).

Спектр ^1H ЯМР раствора образца 1 в ДМСО- d_6 (рис. 2) помимо широкого сигнала спиртового гидроксила при 5,10 м.д., содержал узкий сигнал протонов воды при 4,70 м.д., а также группу сигналов, характерных для 1,2-пропиленгликоля: 1,03 (м.д., 3H, дублет метильной группы CH_3), 3,26 – 3,40 (м.д., 2H, мультиплет метиленовой группы CH_2) и 3,67 – 3,78 (м.д., ^1H , мультиплет метиновое протона CH) [19]. Кроме этого, ^1H ЯМР спектр содержал менее интенсивные сигналы — мультиплеты при 3,42 – 3,56 и 3,58 – 3,66 м.д.

В спектре ^{13}C ЯМР того же образца (рис. 3) наблюдались сигналы близкой интенсивности при 20,1; 67,6 и 67,7 м.д., что сравнимо со значениями химических сдвигов ядер ^{13}C 1,2-пропиленгликоля в растворе в дейтерохлороформе (CDCl_3), отнесенных к метильному (18,7 м.д.), метиленовому (67,7 м.д.) и метиновому углероду (68,2 м.д.) [20].

Вместе с тем имелись сигналы меньшей интенсивности со значениями химических сдвигов 63,5 и 72,8 м.д. (с соотношением 2:1), что близко к известным данным для глицерина [21].

Спектр ^1H ЯМР образца 7 (рис. 4) более сложный по сравнению со спектром образца 1. Помимо синглетов при 5,22 и 4,65 м.д., соответствующих гидроксильным группам, и 3 мультиплетов при 0,89 – 1,09, 3,23 – 3,37 и 3,63 – 3,73 м.д. с соотношением интенсивностей 3:2:1, отнесенных по аналогии с образцом 1 к 1,2-пропиленгликолю, а также 2 мультиплетов при 3,55 – 3,62 и 3,37 – 3,51 м.д. с соотношением интенсивностей 1:4, которые можно отнести к протонам CH - и CH_2 -групп глицерина соответственно, имелись менее интенсивные группы сигналов. По соотношению сигналов метиновых протонов 1,2-пропиленгликоля и глицерина можно заключить, что их количества в смеси относятся примерно, как 8:1. Не более 1 – 2 % от интенсивности сигналов основного компонента — 1,2-пропиленгликоля — составляли уширенные (в связи с высокой вязкостью образца) сигналы в области ароматических протонов при 8,43 м.д. (синглет), 8,41,

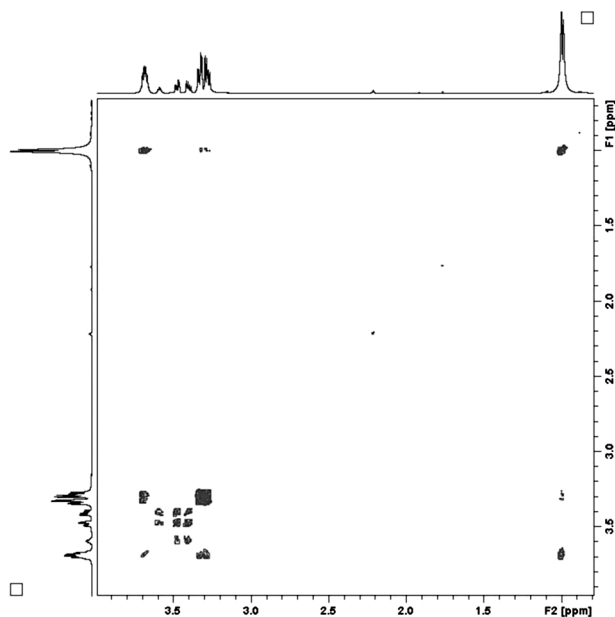


Рис. 6. 2D ЯМР-спектр корреляции COSY величин химических сдвигов $^1\text{H} - ^1\text{H}$ образца 7.

7,83, 7,81 м.д. (дублеты) и 7,38 – 7,43 м.д. (мультиплет), а также при 2,21 м.д. (синглет) и 1,85 – 1,95 м.д. (мультиплет), характерные для протонов пиридинового кольца (мультиплеты с центрами при 8,54, 8,49, 7,69, 7,26 м.д.). N-метильной группы (синглет 2,17 м.д.) и части метиленовых протонов (мультиплеты в интервале 1,70 – 1,90 м.д.) пирролидинового цикла никотина соответственно [15, 21 – 22].

Соотношение основных сигналов в спектре ^{13}C ЯМР образца 7 (рис. 5) согласуется с данными спектра ЯМР ^1H . Так, сигналы близкой интенсивности при 18,7, 67,1 и 67,9 м.д. относятся к вышеупомянутым метильному, метиленовому и метиновому углеродам 1,2-пропиленгликоля, а более слабые сигналы при 62,9

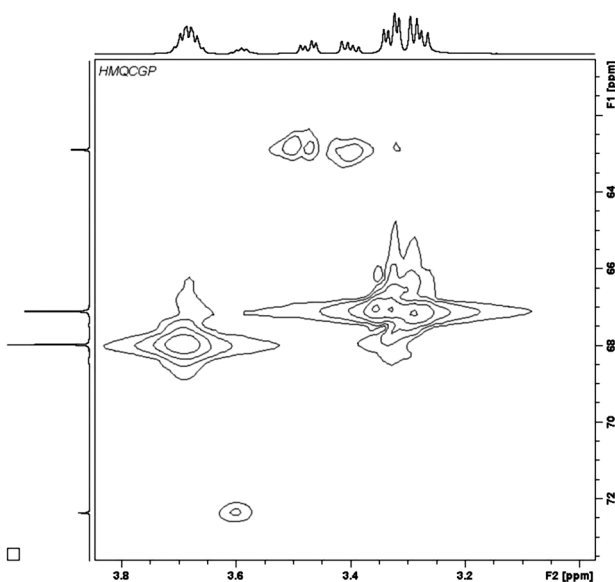


Рис. 8. 2D ЯМР-спектр корреляции HMQC величин химических сдвигов $^1\text{H} - ^{13}\text{C}$ образца 7 (увеличенный фрагмент).

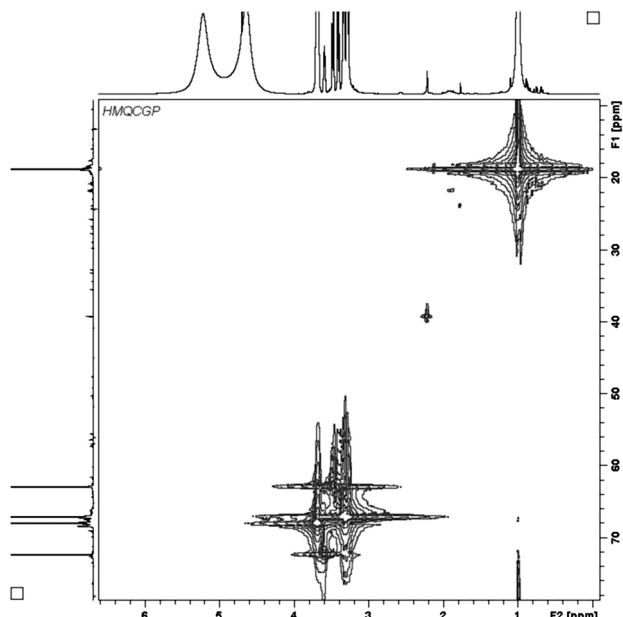


Рис. 7. 2D ЯМР-спектр корреляции HMQC величин химических сдвигов $^1\text{H} - ^{13}\text{C}$ образца 7.

и 72,3 м.д. с соотношением интенсивностей 2:1 — к метиленовым и метиновому атомам углерода глицерина.

Часть химических сдвигов слабых сигналов в диапазоне 20,0 – 150,0 м.д. удовлетворительно коррелирует с литературными данными для никотина [22], а также результатами наших прежних исследований (табл. 2) [15].

Часть других слабых сигналов может быть отнесена к возможному присутствию в смеси ароматизатора — ментола (табл. 3), однако для более надежного отнесения сигналов минорных компонентов была использована корреляционная спектроскопия.

На рис. 6 – 8 приведены 2D ЯМР спектры корреляции величин химических сдвигов $^1\text{H} - ^1\text{H}$ (рис. 6) и $^1\text{H} - ^{13}\text{C}$ образца 7, которые однозначно подтверждают отнесение сигналов 1,2-пропиленгликоля и глицерина, сделанное на основании 1D ЯМР ^1H и ^{13}C -спектров.

На рис. 7 прослеживается корреляция химических сдвигов протонов при третьем (C3) и четвертом (C4) атомах углерода и N-метильной группы пирролидино-

Таблица 1
Результаты определения содержания воды в образцах жидкостей для “е-сигарет”

№ образца	Предполагаемая страна происхождения	n (число навесок)	Содержание воды, $X_{\text{ср}} \pm \delta X$ (%) *
1	КНР	4	$4,8 \pm 0,1$
2	КНР	3	$20,6 \pm 0,9$
3	КНР	4	$0,40 \pm 0,02$
4	КНР	4	$2,8 \pm 0,1$
5	КНР	4	$1,8 \pm 0,1$
6	США	4	$2,8 \pm 0,1$
7	США	3	$19,5 \pm 0,7$

* Доверительный интервал определялся при $p = 0,95$.

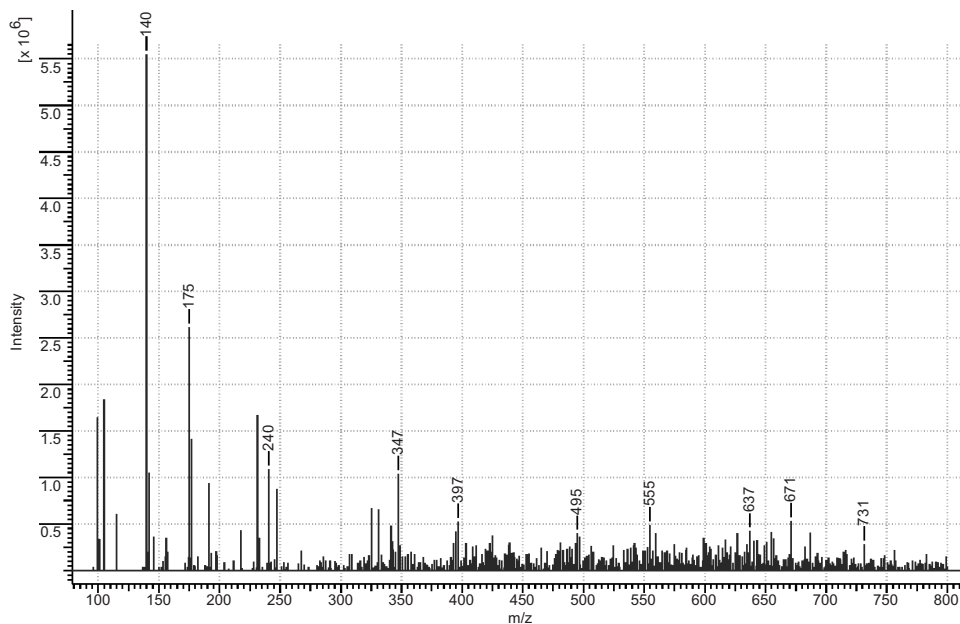


Рис. 9. Масс-спектр образца 1, усредненный по полному ионному току за время прохождения через анализатор.

вого кольца молекулы никотина с химическими сдвигами соответствующих атомов углерода, что подтверждает наличие в образце никотина [22]. Надежную картину в НМРС-спектре, подтверждающую наличие ментола, получить не удалось вследствие низкой концентрации ментола в образце (менее 0,01 %) и наложения с сигналами основных компонентов.

Тем не менее органолептическая оценка образца 7 свидетельствовала в пользу присутствия компонента с ароматом ментола.

Попытка идентификации компонентов, присутствующих в низких концентрациях, осуществлялась методом масс-спектрометрии [23].

Масс-спектр образца 1 (рис. 9) не содержал пика $m/z = 163$, соответствующего молекулярному иону никотина [22], что согласуется с данными ЯМР-спектрокопии. В отличие от ЯМР-спектра, в масс-спектре образца 1, как и в случае образцов 2 – 7, не наблюдались пики, отвечающие молекулярным ионам основных компонентов смеси — полиолов (1,2-пропиленгликоля

и глицерина). Этот эффект объяснялся ранее отсутствием в их молекулах групп, легко ионизируемых в условиях использованного рутинного варианта метода (электроспрей без добавки модификатора в элюент) [24]. Поэтому для регистрации полиолов необходимо видоизменить методику эксперимента.

Относительно интенсивные пики в масс-спектре образца 1 при $m/z = 175$ и 177 можно было связать с присутствием аскорбиновой кислоты ($M = 176$), (с учетом известных из дополнительных источников характеристик жидкости). В пользу этого свидетельствует МС/МС-спектр иона с $m/z = 177$, включающий набор пиков с $m/z = 135, 139, 146, 152, 159, 206, 218, 251, 257, 268, 360, 578$. Сигнал с $m/z = 159$ можно отнести к продукту отщепления гидроксигруппы, с $m/z = 218$ — к кластерному иону ($M + H^+ + CH_3CN$), с $m/z = 139$ — к продукту дегидратации.

Сигнал умеренной интенсивности при $m/z = 191$, вероятно, можно отнести к лимонной кислоте ($M = 192$).

Таблица 2
Сопоставление данных спектров ЯМР ^{13}C стандартного образца никотина и образца 7

Позиция атома углерода в молекуле никотина [22]	Величины химических сдвигов, м.д., в спектре никотина [15, 22]	Величины химических сдвигов, м.д., в спектре образца 7
C2	149,2 (149,6)	148,8
C6	148,3 (148,7)	148,6 (уширен)
C3	138,0 (138,8)	136,8
C4	136,0 (134,8)	134,8 (уширен)
C5	123,6 (123,6)	124,7
C7	68,5 (68,9)	68,4
C9	56,6 (57,0)	56,4
C12	(40,4)	39,2
C11	34,6 (35,3)	34,4
C10	22,3 (22,6)	21,8

Таблица 3
Сопоставление данных спектров ЯМР ^{13}C стандартного образца ментола и образца 7

Позиция атома углерода в молекуле ментола [22]	Величины химических сдвигов, м.д., в спектре ментола [13, 22]	Величины химических сдвигов, м.д., в спектре образца 7
C1	69,9 (71,5)	69,8
C2	49,9 (50,2)	50,2
C6	45,6 (45,1)	47,6
C4	34,8 (34,6)	35,5
C5	31,7 (31,6)	32,7
C7	25,5 (25,8)	25,7
C3	23,2 (23,2)	23,8
C10	22,7 (22,2)	22,9
C8	21,4 (21,0)	21,5
C9	16,4 (16,1)	16,5

Заметный ион с $m/z = 231$ относится предположительно к протонированному аддукту 1,2-пропиленгликоля ($M = 76$) и дигидромирценола ($M = 154$), поскольку в МС/МС спектре распадается с образованием иона $m/z = 155$. Дигидромирценол используется для имитации аромата цитрусовых в производстве потребительской продукции, включая, возможно, образец 1 [25].

Ион с $m/z = 347$ в том же режиме регистрации распадается до ионов $m/z = 245, 289$ и 329 , но для его отнесения будет использован прибор, позволяющий определить брутто-формулу неизвестного компонента смеси [26].

Как и в случае образца 1, не содержал заметного пика, соответствующего никотину, и масс-спектр образца 3, который отличается от спектров других образцов присутствием пиков при $m/z = 173, 261$ и 305 .

Напротив, образцы 2 и 4 – 7 характеризуются наличием в масс-спектре пиков при $m/z = 163$, свидетельствующих о присутствии в смеси никотина, что подтверждается сигналом $m/z = 204$ ($M + H^+ + CH_3CN$). Для тех же образцов характерны сигналы при $m/z = 179$ и 357 . Кроме того, в масс-спектре образца 2 заметны пики при $m/z = 130$ и 132 , а образца 4 — $m/z = 140, 189$ и 374 .

Вопреки ожиданиям, масс-спектр образца 7 не содержал пиков, соответствующих ментолу, вероятно, по тем же причинам, что и в случае полиолов.

В дальнейшем использованный вариант метода масс-спектрометрии с ионизацией электрораспылением будет усовершенствован для осуществления более полного анализа.

Что же касается метода ЯМР-спектроскопии, то он позволяет надежно определять без предварительной пробоподготовки компоненты жидкостей для “e-сигарет”, концентрация которых не менее 0,1 %.

Авторы выражают признательность В. Пашкову и С. Смирнову (компания “Contrust”) за предоставление образцов для исследования и И. Сыстеровой за рисунок устройства электронной сигареты.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хон Лик, Патент РФ RU 2336002 “Беспламенная электронная сигарета с распылением” (Опубликован 20.10.2008); Публикация PCT:WO 2004 / 080216 (2004).
2. И. Сыстеровой, *Электронные сигареты — инновация или мина замедленного действия*, Доклад 13.05.2010 на Конференции в рамках выставки “ТабакЭкспо 2010”, Медиагруп-

- па “Русский табак”, Москва (2010); [Электронный ресурс], Режим доступа: <http://www.rustabak.ru>.
3. M. Laugesen, *Conference of the Society for Research on Nicotine and Tobacco*, Dublin (2009), Poster 5 – 11, [Электронный ресурс], Режим доступа: <http://www.healthnz.co.nz>.
4. A. Trtchounian, M. Williams and P. Talbot, *Nicotine & Tobacco Res.*, **12**, 905 – 912 (2010).
5. В. В. Кривохиж, *Туберкулез. Современный взгляд на лечение и профилактику*, Весь, Санкт-Петербург (2006), с. 9.
6. *Inhaled propylene glycol in e-cigarettes not a safety concern*, *Health New Zealand News*, (22 September 2010); [Электронный ресурс], Режим доступа: <http://www.endsmoking.org.nz/News2010.htm>.
7. A. Kulo, K. Allegaert, J. de Hoon, et al., *Chromatogr.*, **73**(5), 463 – 470 (2012).
8. K. Takayama, J. O. Kilburn, *Antimicrob. Agents Chemother.*, **33**, 1493 – 1499 (1989).
9. K. Mikusova, R. A. Slayden, G. S. Besra, et al., *Antimicrob. Agents Chemother.*, **39**, 2484 – 2489 (1995).
10. R. E. Lee R. E., K. Mikusova, P. J. Brennan, et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **117**, 11829 – 11832 (1995).
11. К. А. Кочетков, Л. А. Свиридова, Г. А. Голубева и др., *Сб. тез. конференции РАМН “Фундаментальные науки — медицине”*, Москва (2011), сс. 170 – 171.
12. Popularity of e-cigarettes grows, *Tobacco J. International*, **5**, 44 (2010).
13. А. Б. Урюпин, А. С. Перегудов, *Tobacco Review*, № 1, 20 – 24 (2010).
14. Р. Фримэн, *Магнитный резонанс в химии и медицине*, URSS, Москва (2009), сс. 185 – 203.
15. А. Б. Урюпин, А. С. Перегудов, *Tobacco Review*, № 3, 18 – 23 (2009).
16. M. Koda, R. Furihata, F. Wei, et al., *Magn. Reson. Chem.*, **49**(11), 710 – 716 (2011).
17. I. Pelczer, *Magn. Reson. Chem.*, **47**(S1), S1(2009).
18. А. Б. Урюпин, Л. Н. Булатникова, К. А. Кочетков и др., *Tobacco Review*, № 2, 22 – 27 (2010).
19. Ю. С. Шабаров, *Органическая химия. Часть 1. Нециклические соединения*, Химия, Москва (1994), с. 320.
20. Э. Претч, Ф. Бюльманн, К. Аффельтер, *Определение строения органических соединений*, БИНОМ, Москва (2006), с. 123.
21. E. Pretsch, J. T. Clerc, *Spectra interpretation of organic compounds*, VCH Wiley Company (1997), p. 68.
22. S. Berger, D. Sicker, *Classics in Spectroscopy. Isolation and Structure Elucidation of Natural Products*, Wiley-VCH, Weinheim (2009), pp. 3 – 24, 373 – 388.
23. А. Т. Лебедев, *Масс-спектрометрия в органической химии*, БИНОМ, Москва, (2003), сс. 107 – 111.
24. Songmei Gao, D. M. Wilson, L. E. Edinboro, et al., *J. Liquid Chromatogr. Rel. Technol.*, **26**(20), 3413 – 3431 (2003).
25. ООО Леко Стайл, *Каталог душистых и вкусоароматических веществ*, (2009).
26. B. Kammerer, H. Scheible, G. Zurek, et al., *Xenobiotica*, **37**(3), 280 – 297 (2007).

Поступила 21.04.11

STUDYING QUALITATIVE AND QUANTITATIVE COMPOSITION OF FLUIDS FOR ELECTRONIC CIGARETTES

A. B. Uryupin, A. S. Peregudov, K. A. Kochetkov, L. N. Bulatnikova, S. S. Kiselev, and Yu. S. Nekrasov

Nesmeyanov Institute of Organoelemental Compounds, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

The composition of fluids intended for use in “electronic cigarettes” has been studied without preliminary preparation procedures by the methods of one- and two-dimensional homo- and heteronuclear correlation 1H and ^{13}C NMR spectroscopy, as well as electrospray ionization mass spectrometry (ESI-MS). It is established that, with respect to their main components, the mixtures under investigation belong to non-tobacco products.

Key words: Fluids for electronic cigarettes; chemical analysis; nuclear magnetic resonance; mass spectrometry