OTIMIZAÇÃO DE METODOLOGIA ANALÍTICA PARA ANÁLISE DA COMPOSIÇÃO QUÍMICA DE CIGARROS ELETRÔNICOS

Iris Beatriz Buss dos Santos (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Eduardo Jorge Pilau (Coorientador), Simone Aparecida Galerani Mossini (Orientadora). E-mail: sagmossini@uem.br

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências da Saúde, Maringá, PR.

Farmácia, Avaliação e Análise Toxicológica

Palavras-chave: Cigarro eletrônico; cromatografia gasosa; Análise toxicológica.

RESUMO

Cigarros eletrônicos produzem vapor por meio do aquecimento de uma solução contendo nicotina e outros componentes químicos. Apesar da proibição pela Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA), os dispositivos eletrônicos para fumar (DEF) continuam a ser comercializados. Diante da necessidade de caracterizar a composição química desses dispositivos para analisar os riscos à saúde dos usuários, o presente estudo objetivou otimizar um método analítico para identificação dos componentes. O método proposto consistiu na extração dos compostos presentes no líquido dos cigarros eletrônicos, seguida de análise por Cromatografia Gasosa acoplada a Espectrometria de Massas (CG/EM). Os resultados permitiram a identificação de diferentes analitos nas amostras de DEF, demonstrando que a otimização da metodologia foi eficaz. Contudo, devido à complexidade da matriz, são necessários ensaios adicionais para validar e ampliar a aplicação do método.

INTRODUÇÃO

Os dispositivos eletrônicos para fumar (DEF), também conhecidos como cigarros eletrônicos, vape, pod, e-cigarette, são dispositivos que geram vapor por meio do aquecimento de uma solução que geralmente contém nicotina e outros produtos químicos (WALLEY et al., 2019). Apesar da ANVISA proibir a comercialização de DEF, estes continuam sendo comercializados de maneira ilegal (CAVALCANTE, et al., 2017). Tendo em vista a crescente utilização destes dispositivos, a otimização da metodologia analítica para análise de sua composição química faz-se imprescindível.

MATERIAIS E MÉTODOS

As amostras foram doadas por usuários para o projeto. Este trabalho fez parte do projeto de pesquisa aprovado pelo Comitê de Ética em Pesquisa Envolvendo Seres

Humanos da Universidade Estadual de Maringá (COPEP/UEM), CAAE 56482016.1.0000.0104, parecer n. 5.709.700.

O líquido presente nos *pods* foi separado em *vials* e submetido a banho-maria a 40°C e 70°C para viabilizar a extração e separação dos componentes voláteis presentes na amostra, isolando-os da glicerina. Para extração, cada v*ial* no banho-maria foi conectado a uma bomba peristáltica; a pressão gerada pela bomba extraiu os compostos voláteis para um cartucho acoplado, que os reteve para armazenamento. Ao cartucho foi adicionado metanol grau HPLC e os extratos obtidos foram injetados em cromatógrafo a gás ISQ TRACE 1300, acoplado a um espectrômetro de massas quadrupolo (ThermoScientific®), equipado com amostrador automático AI 1310. Para análise das amostras utilizou-se a coluna capilar Rxi®-5ms (5% fenilpolisilfenilenosiloxano) (30m x 0,25mm x 0,25µm) e hélio como gás de arraste. Para as determinações quantitativas do CG-EM empregou-se um PI (padrão Interno). As análises de EM ocorreram com ionização por impacto de elétrons (70eV) e no modo de monitoramento de seleção de íons (SIM). Os dados foram processados utilizando o software TraceFinder (Thermo Scientific). Para a obtenção dos cromatogramas, os dados brutos foram extraídos dos softwares e plotados no programa Microsoft Excel® 2010.

Por meios experimentais, alterações foram realizadas para ampliar a capacidade de detecção: o método extrativo foi reajustado, visando a característica volátil da amostra e a faixa de varredura (*scan*) foi ampliada de 10–350 para 10–400 unidades de massa atômica (*amu*), e o tempo de aquisição foi ajustado de 1,00 para 3,00 min, permitindo a detecção de compostos de maior massa molecular e maior abrangência na aquisição dos dados.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O método otimizado melhorou a separação cromatográfica e identificação de diferentes analitos. Na tabela 1 apresenta-se os principais analitos que foram identificados e confirmados, entre estes, Eucalyptol, L-menthone, Menthol acetate, (-)-carvone, P-menth-8-en-3-ol, Levomenthol, compatíveis com o perfil aromático do produto comercial Ignite Ice Mint®, cujo perfil cromatográfico é apresentado na figura 1.

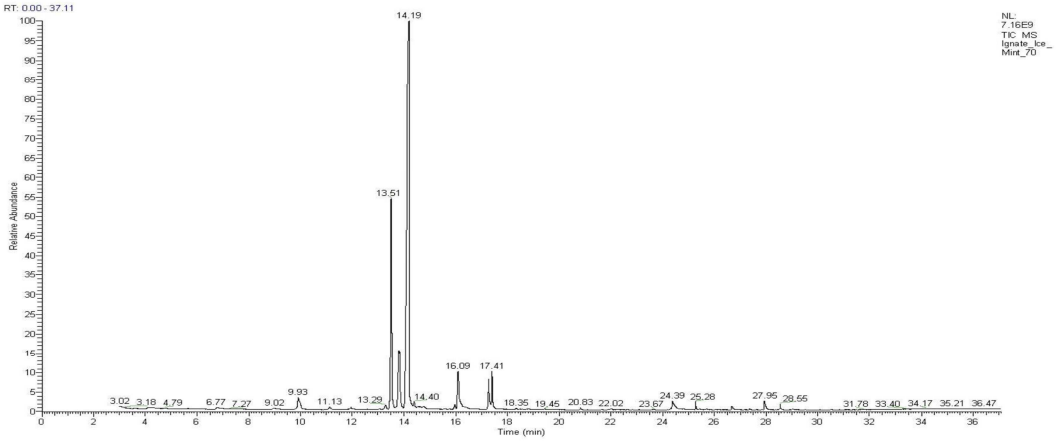


Figura 1- Cromatograma cigarro eletrônico Ignite Ice Mint®.

Tabela 1: Perfil obtido por EM em cigarro eletrônico Ignite Ice Mint®

Compostos	**TR* (min)**	***Íon Molecular***	**Íons fragmentos**	**Referência**
2-butoxyethanol	06.77	118	28, 05; 45,04; 57,09; 75,05;	HMDB0031327
Eucalyptol	9.93	154	28,06; 81,07; 111,07; 139,08;	HMDB0004472
P-menth-8-en-3-ol	13.29	154	28,03; 43,07; 55,04; 67,08;	HMDB0035825
L-menthone	13.51	154	69,03; 97,05; 112,06; 139,07;	HMDB0035162
Cyclohexanol, 1-methyl-4-(1-methylethyl)-	14.19	156	43,06; 55,05; 83,09; 97,10;	HMDB0037020
Levomenthol	14.40	156	55,06; 71, 05; 81,11; 95,10;	HMDB0003352
(-)-carvone	16.09	150	39,03; 54,05; 82; 93,07;	HMDB0035824
Menthol acetate	17.41	198	41,05; 43,04; 55,07; 81,08;	HMDB0041264
Diethyl Phthalate	24.39	222	105,07; 121,01; 149; 150,04;	HMDB0094660
Phthalic acid, diisobutyl Ester	27.95	278	57,07; 76,02; 104,02; 148,99;	HMDB0013835

Observou-se que a variação da temperatura no processo de extração (40 °C e 70 °C) influenciou nos analitos detectados, provavelmente por serem compostos de diferentes pontos de ebulição. Além disso, a distinção entre os analitos identificados nos dispositivos analisados sugere variações na composição dos e-líquidos, possivelmente relacionadas à marca, sabor, irregularidade e despadronização da composição ligada a venda ilegal dos cigarros eletrônicos. A presença ou ausência

de determinados analitos pode estar associada tanto à composição original quanto às condições de aquecimento durante o uso.
Quanto à relevância toxicológica dos compostos identificados, destaca-se o mentol (Levomenthol), cuja exposição pode afetar o epitélio brônquico humano e contribuir para alterações respiratórias (NAIR et al., 2020). Outros compostos identificados também apresentam potencial toxicológico relevante e merecem avaliação quantitativa e toxicológica adicional para melhor caracterização do risco.
As alterações no método extrativo contribuíram para melhoria na separação dos picos, reduzindo drasticamente a interferência da glicerina. A ampliação da faixa de varredura e o aumento do tempo de aquisição contribuíram para ampliar a quantidade de compostos detectados e favorecer a detecção de compostos de maior massa molecular. Esses resultados reforçam a complexidade da matriz analisada e a importância da otimização do método analítico, visando maior sensibilidade e reprodutibilidade na identificação dos compostos presentes.

CONCLUSÕES

A identificação e confirmação de diferentes analitos nas amostras analisadas indicam que as modificações realizadas contribuíram para o aprimoramento do método proposto. Contudo, mais estudos são necessários para caracterização integral do perfil químico dos cigarros eletrônicos, principalmente com a utilização de mais amostras, novas variações nas temperaturas de extração, buscando aperfeiçoamento do método extrativo e das condições cromatográficas.

AGRADECIMENTOS

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro que possibilitou a realização desse projeto.

REFERÊNCIAS

CAVALCANTE, T. M. et al. Conhecimento e uso de cigarros eletrônicos e percepção de risco no Brasil: resultados de um país com requisitos regulatórios rígidos. **Cadernos de Saúde Pública**, v. 33, n. suppl 3, 21 set. 2017.

Human Metabolome Database. Disponível em: <https://www.hmdb.ca/>. Acesso em: 23 ago. 2026.

NAIR, Vijayalekshmi *et al.* Menthol in electronic cigarettes: A contributor to respiratory disease? **Toxicology and Applied Pharmacology**, v. 407, p. 115238, 15 nov. 2020.

WALLEY, S. C. et al. A public health crisis: electronic cigarettes, vape, and JUUL. ***Pediatrics***, v. 143, n. 6, e20182741, jun. 2019. DOI: 10.1542/peds.2018-2741.