



ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ

(12) ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ К ПАТЕНТУ

(52) СПК

A24B 15/167 (2023.02); A24F 40/10 (2023.02); A61K 31/465 (2023.02)

(21)(22) Заявка: 2021112077, 31.10.2019

(24) Дата начала отсчета срока действия патента:
31.10.2019

Дата регистрации:
26.10.2023

Приоритет(ы):

(30) Конвенционный приоритет:
01.11.2018 GB 1817866.5;
03.05.2019 GB 1906242.1

(43) Дата публикации заявки: 27.10.2022 Бюл. № 30

(45) Опубликовано: 26.10.2023 Бюл. № 30

(85) Дата начала рассмотрения заявки РСТ на
национальной фазе: 27.04.2021

(86) Заявка РСТ:
GB 2019/053096 (31.10.2019)

(87) Публикация заявки РСТ:
WO 2020/089641 (07.05.2020)

Адрес для переписки:
101000, Москва, ул. Мясницкая, 13, стр. 5, ООО
"Союзпатент", С.Б. Фелициной

(72) Автор(ы):

КЭБОТ, Росс (GB)

(73) Патентообладатель(и):

НИКОВЕНЧЕРС ТРЕЙДИНГ ЛИМИТЕД
(GB)

(56) Список документов, цитированных в отчете
о поиске: US 2016/0198759 A1, 14.07.2016. RU
2634886 C1, 07.11.2017. RU 2279871 C2,
20.07.2006. US 2008/0138399 A1, 12.06.2008. WO
2007/138462 A2, 06.12.2007.

(54) СПОСОБНАЯ ОБРАЗОВЫВАТЬ АЭРОЗОЛЬ КОМПОЗИЦИЯ

(57) Реферат:

Группа изобретений относится к способной образовывать аэрозоль композиции для устройства обеспечения аэрозоля, способу формирования аэрозоля, электроннои системе обеспечения аэрозоля и к способу улучшения органолептических свойств превращенной в аэрозоль композиции. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля содержит: (i) воду в количестве по меньшей мере 70 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции; (ii) одно или несколько вкусоароматических

веществ, которые подлежат инкапсулированию; (iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; (iv) никотин в количестве не более чем 6 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции; при этом в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль. Группа изобретений развита в зависимых пунктах формулы. Технический

результат – создание композиции с улучшенными
органолептическими свойствами, снижение вреда

от компонентов, которые образуют токсичные
вещества. 6 н. и 28 з.п. ф-лы, 1 табл., 1 пр., 4 ил.

R U 2 8 0 6 1 1 1 C 2

R U 2 8 0 6 1 1 1 C 2



FEDERAL SERVICE
FOR INTELLECTUAL PROPERTY

(12) **ABSTRACT OF INVENTION**

(52) CPC

A24B 15/167 (2023.02); A24F 40/10 (2023.02); A61K 31/465 (2023.02)(21)(22) Application: **2021112077, 31.10.2019**(24) Effective date for property rights:
31.10.2019Registration date:
26.10.2023

Priority:

(30) Convention priority:
01.11.2018 GB 1817866.5;
03.05.2019 GB 1906242.1(43) Application published: **27.10.2022 Bull. № 30**(45) Date of publication: **26.10.2023 Bull. № 30**(85) Commencement of national phase: **27.04.2021**(86) PCT application:
GB 2019/053096 (31.10.2019)(87) PCT publication:
WO 2020/089641 (07.05.2020)Mail address:
101000, Moskva, ul. Myasnitskaya, 13, str. 5, OOO
"Soyuzpatent", S.B. Felitsinoj

(72) Inventor(s):

CABOT, Ross (GB)

(73) Proprietor(s):

NICOVENTURES TRADING LIMITED (GB)(54) **AEROSOL CREATING COMPOSITION**

(57) Abstract:

FIELD: aerosol creating composition.

SUBSTANCE: group of inventions relates to an aerosol-creating composition for an aerosol supply device, an aerosol generation method, an electronic aerosol supply system, and a method for improving the organoleptic properties of an aerosolized composition. The aerosol creating composition for the aerosol providing device comprises: (i) water in an amount of at least 70% by weight based on the weight of the aerosol creating composition; (ii) one or more flavours to be encapsulated; (iii) one or more encapsulating

materials; (iv) nicotine in an amount of not more than 6% by weight, based on the weight of the aerosol creating composition; wherein, in presence of water, the binding energy of said one or more encapsulating materials with said one or more flavouring substances to be encapsulated is from -0.5 to -8 kcal/mol. The group of inventions is developed in dependent claims.

EFFECT: creation of a composition with improved organoleptic properties, reduction of harm from components that form toxic substances.

34 cl, 1 tbl, 1 ex, 4 dwg

Область техники, к которой относится изобретение

Настоящее раскрытие относится к способной образовывать аэрозоль композиции, способу ее изготовления, контейнеру, содержащему эту композицию, устройству, содержащему эту композицию, а также способам и применению такой композиции.

Уровень техники

Электронные системы обеспечения аэрозоля, такие как электронные сигареты, обычно содержат резервуар с жидкостью, которая подлежит испарению, обычно содержащей никотин. Когда пользователь делает вдох через такое устройство, нагреватель активируется так, чтобы испарять небольшое количество жидкости, которая в результате вдыхается пользователем.

Использование электронных сигарет в Великобритании быстро растет, и, по оценкам, в настоящее время в Великобритании ими пользуется более миллиона человек.

Одна из проблем, с которой сталкиваются при создании таких систем, состоит в том, чтобы обеспечить из устройства обеспечения аэрозоля аэрозоль для вдыхания, который обеспечивает потребителям приемлемое впечатление. Некоторые потребители могут предпочитать электронные сигареты, вырабатывающие аэрозоль, очень близко «имитирующий» дым, вдыхаемый из табачной продукции, такой как сигарета. Аэрозоли из электронных сигарет и дым из табачной продукции, такой как сигареты, создают у пользователя сложную цепочку вкусо-ароматических ощущений во рту, впитывания никотина во рту и горле с последующим впитыванием никотина в легких. Данные различные аспекты описываются пользователями в терминах вкусоароматического ощущения, интенсивности/качества, воздействия, раздражения/мягкости и удовлетворенности от никотина. Никотин вносит свой вклад в некоторые из данных факторов и сильно ассоциирован с такими факторами, как воздействие, раздражение и мягкость; эти параметры легко воспринимаются потребителями, и электронные сигареты могут обеспечить потребителям чрезмерно выраженные или чрезмерно слабые указанные ощущения в зависимости от индивидуальных предпочтений.

Удовлетворенность от никотина особенно сложна, поскольку она представляет собой результат как количества и скорости, с которыми никотин впитывается из слизистой оболочки рта, обычно это никотин в паровой фазе, так и количества и скорости, с которыми никотин впитывается из легких, обычно это никотин в дисперсной фазе вдыхаемого аэрозоля. Каждый из данных факторов и их баланс могут вносить большой вклад в приемлемость электронной сигареты для потребителя. Поэтому для производителей электронных сигарет желательным является предложение средств оптимизации совокупного восприятия курения электронной сигареты.

Еще одна проблема, с которой сталкиваются такие системы это постоянный спрос на снижение вреда. Вред от сигарет и устройств электронных сигарет в первую очередь связан с токсичными веществами. Следовательно, существует желание уменьшить количество или удалить компоненты, которые могут образовывать токсичные вещества.

Раскрытие изобретения

В одном аспекте предлагается способная образовывать аэрозоль композиция, содержащая:

(i) воду;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат

инкапсулированию;

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; а также

(iv) никотин;

в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких

инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

В одном аспекте предлагается способная образовывать аэрозоль композиция, содержащая:

(i) воду

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; и

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов, имеющих растворимость в воде, составляющую по меньшей мере 50% растворимости в воде указанного одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; а также

(iv) никотин.

В одном аспекте предлагается способ формирования аэрозоля, при этом способ включает перевод в аэрозольное состояние способной образовывать аэрозоль композиции, содержащей

(i) воду;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; и

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов;

в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

В одном аспекте предлагается заключенная в контейнере способная образовывать аэрозоль композиция, содержащая:

(a) контейнер; а также

(b) способную образовывать аэрозоль композицию, содержащую:

(i) воду;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию;

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; а также

(iv) никотин;

в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

В одном аспекте предлагается электронная система обеспечения аэрозоля, содержащая:

(a) генератор аэрозоля, предназначенный для перевода в аэрозольное состояние композиции, предназначенной для целей вдыхания пользователем электронной системы обеспечения аэрозоля;

(b) источник электропитания, содержащий гальванический элемент или батарею, предназначенный для снабжения генератора аэрозоля энергией;

(c) способную образовывать аэрозоль композицию, содержащую:

(i) воду;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; и

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов;

в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

В одном аспекте предлагается способ улучшения органолептических свойств превращенной в аэрозоль композиции, при этом способ включает стадии перевода в аэрозольное состояние способной образовывать аэрозоль композиции, содержащей:

(i) воду;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; и

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов;

в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

Осуществление изобретения

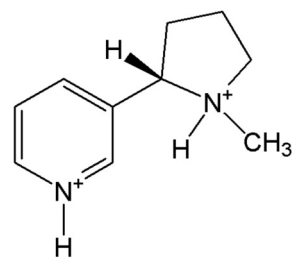
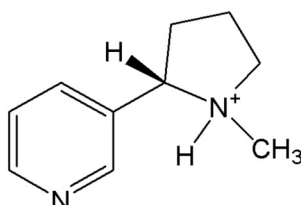
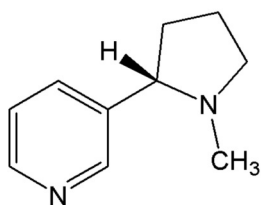
Как обсуждается в данном документе, в одном аспекте обеспечивается способная образовывать аэрозоль композиция, содержащая (i) воду; (ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; (iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; а также (iv) никотин; в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

Авторы изобретения обнаружили, что может быть обеспечена выгодная система, в которой в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

Авторы изобретения обнаружили, что путем выбора одного или нескольких инкапсулирующих материалов вместе с выбором одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, таким образом, чтобы эти два материала обладали требуемой энергией связывания, обеспечивается выгодная система доставки вкусоароматического вещества. В частности, такая система доставки вкусоароматического вещества связывает вкусоароматическое вещество достаточно сильно, чтобы он доставлялся при использовании, но не настолько сильно, чтобы он не отделялся при использовании от инкапсулирующего материала. Таким образом, вкусоароматическое вещество может доставляться стабильно, в то же время обеспечивая сильное высвобождение вкусоароматического вещества для конечного пользователя.

Как понятно специалисту в данной области, никотин может существовать в непротонированной форме, монопротонированной форме или дипротонированной форме. Структуры каждой из этих форм представлена ниже.

5



10

Непротонированный
никотин

Монопротонированный
никотин

Дипротонированный
никотин

15

Ссылка в описании на протонированную форму означает как монопротонированный никотин, так и дипротонированный никотин. Ссылка в описании на количества в протонированной форме означает объединенное количество монопротонированного никотина и дипротонированного никотина. Кроме того, когда сделана ссылка на полностью протонированную композицию, следует понимать, что в любой момент времени могут присутствовать очень незначительные количества непротонированного никотина, например, менее чем 1% непротонированного никотина.

20

Для простоты ссылки, эти и другие аспекты настоящего изобретения теперь обсуждаются под соответствующими заголовками разделов. Однако идеи каждого раздела не обязательно ограничиваются каждым конкретным разделом.

Энергия связывания

25

Как обсуждается здесь, в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

30

В одном аспекте энергия связывания может быть определена путем молекулярного моделирования и, в частности, с использованием докинга, выполняемого в Autodock 4.2 [The Scripps Research Institute, La Jolla, CA, USA] (Morris, G. M., Huey, R., Lindstrom, W., Sanner, M. F., Belew, R. K., Goodsell, D. S., & Olson, A. J. (2009). Autodock4 and AutodockTools4: automated docking with selective receptor flexibility. J. Computational Chemistry, 2785-2791). Докинг, выполненный в Autodock 4.2, может быть выполнен с использованием следующих настроек:

35

Расстояние между точками сетки (Ангстрем): 0,375

Количество точек сетки в каждом декартовом направлении

x: 40

y: 40

z: 40

Заданное пользователем начальное положение для лиганда: случайное

40

Начальное относительное двугранное смещение: случайное

Заданные пользователем начальные относительные внутренние углы (диэдры): случайные

Параметр поиска стыковки: генетический алгоритм (GA)

Количество запрошенных стыковок GA: 10 исследований

45

Численность популяции: 150

Максимальное количество оценок: 2500000

Максимальное количество лучших индивидов, которые автоматически выживают:

Скорость мутации гена: 0,02

Скорость кроссовера: 0,08

Режим кроссовера GA: "twopt"

Среднее значение распределения Коши для генной мутации (альфа-параметр): 0

5 Изменение распределения Коши для генной мутации (бета-параметр): 1

Количество поколений для отбора худших особей: 10

Выход стыковки: Lamarckian (Ламарка) GA

10 В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -1 до -8 ккал/моль.

В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -1,5 до -8 ккал/моль.

15 В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -2 до -8 ккал/моль.

В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -2,5 до -8 ккал/моль.

20 В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -3 до -8 ккал/моль.

В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

25 веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -3,5 до -8 ккал/моль.

В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -4 до -8 ккал/моль.

30 В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -4,5 до -8 ккал/моль.

В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

35 веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -5 до -8 ккал/моль.

В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -5 до -7,5 ккал/моль.

40 В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -5 до -7 ккал/моль.

В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -7,5 ккал/

45 моль. В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -7 ккал/моль.

В одном аспекте в присутствии воды энергия связывания одного или нескольких инкапсулирующих материалов с одним или несколькими вкусоароматическими

составляющем по меньшей мере 65 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте вода присутствует в количестве, составляющем по меньшей мере 70 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте вода присутствует в количестве, составляющем по меньшей мере 75 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте вода присутствует в количестве, составляющем по меньшей мере 80 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте вода присутствует в количестве, составляющем по меньшей мере 85 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте вода присутствует в количестве, составляющем по меньшей мере 90 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте вода присутствует в количестве, составляющем по меньшей мере 95 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте вода присутствует в количестве, составляющем по меньшей мере 99 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

[illegible]

Использование воды позволяет заменить часть или весь глицерин, пропиленгликоль, 1,3-пропандиол и их смеси, обычно используемые в электронных сигаретах. В одном аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин, пропиленгликоль, 1,3-пропандиол и их смеси в общем количестве не более чем 10 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин, пропиленгликоль,

более чем 0,01 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте способная образовывать аэрозоль композиция не содержит глицерина, пропиленгликоля, и их смесей.

В одном аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин в количестве не более чем 10 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В другом аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин в количестве не более чем 8 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В третьем аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин в количестве не более чем 5 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В четвертом аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин в количестве не более чем 2 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В пятом аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин в количестве не более чем 1 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В шестом аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин в количестве не более чем 0,5 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В седьмом аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин в количестве не более чем 0,2 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В восьмом аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин в количестве не более чем 0,1 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В девятом аспекте способная образовывать аэрозоль композиция содержит глицерин в количестве не более чем 0,01 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В десятом аспекте способная образовывать аэрозоль композиция не содержит глицерина.

[illegible]

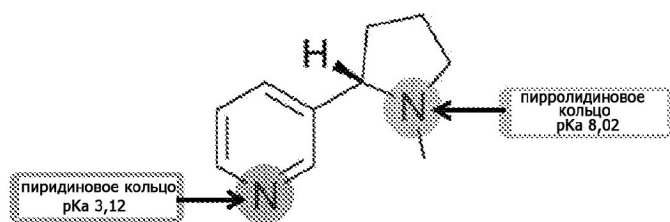
[illegible]

Композиция содержит никотин в протонированной форме. Композиция может содержать никотин в непротонированной форме. В одном аспекте композиция содержит никотин в непротонированной форме и никотин в монопротонированной форме. В

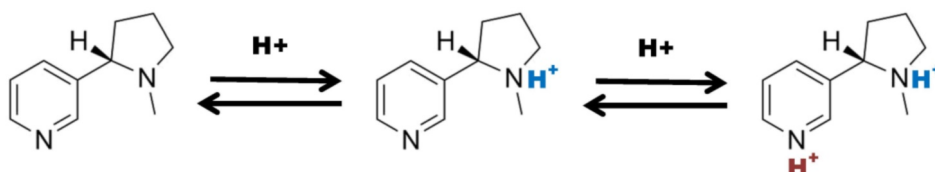
присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 60 до 95 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 65 до 95 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 70 до 95 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 75 до 95 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 80 до 95 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 85 до 95 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 90 до 95 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме.

В одном аспекте от 50 до 99 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 55 до 99 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 60 до 99 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 65 до 99 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 70 до 99 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 75 до 99 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 80 до 99 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 85 до 99 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме. В одном аспекте от 90 до 99 мас.% никотина, присутствующего в композиции, находится в протонированной форме.

Подходящие количества никотина, присутствующего в композиции в протонированной форме, приведены в настоящем документе. Данные количества могут быть легко рассчитаны специалистами в данной области техники. Никотин, представляющий собой 3-(1-метилпирролидин-2-ил)пиридин, является двухосновным основанием, характеризующимся значениями рКа 3,12 для пиридинового кольца и 8,02 для пирролидинового кольца. Он может существовать в рН-зависимой протонированной (моно- и ди-) и непротонированной (свободное основание) формах, которые характеризуются различной биодоступностью.



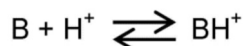
Распределение протонированного и непротонированного никотина будет варьироваться при различных повышениях рН.



Доля непротонированного никотина будет преобладать при высоких значениях рН, в то время как снижение рН будет приводить к увеличению доли протонированного

никотина (моно- или ди- в зависимости от значения pH). В случае известности относительной доли протонированного никотина и совокупного количества никотина в образце можно рассчитать абсолютное количество протонированного никотина.

Относительная доля протонированного никотина в композиции может быть рассчитана с использованием уравнения Гендерсона-Гассельбаха, которое описывает значение pH как производную величину от уравнения константы диссоциации кислоты, и которое широко используется в химических и биологических системах. Рассматривается следующее далее равновесие:



Уравнение Гендерсона-Гассельбаха для данного равновесия представляет собой:

$$pH = pKa + \log \frac{[B]}{[BH^+]}$$

где [B] представляет собой количество непротонированного никотина (то есть свободного основания), [BH⁺] представляет собой количество протонированного никотина (то есть сопряженной кислоты), а pKa представляет собой справочное значение pKa для атома азота пирролидинового кольца никотина (pKa = 8,02). Относительная доля протонированного никотина может быть выведена из альфа-величины для непротонированного никотина, рассчитываемой из уравнения Гендерсона-Гассельбаха в виде:

$$\% \text{ протонированного никотина} = 100 - \left\{ \frac{\frac{[B]}{[BH^+]}}{1 + \frac{[B]}{[BH^+]}} * 100 \right\}$$

Определение значений pKa для растворов никотина может быть осуществлено с использованием базового подхода, описанного в публикации «Spectroscopic investigations into the acid-base properties of nicotine at different temperatures», Peter M. Clayton, Carl A. Vas, Tam T. T. Bui, Alex F. Drake и Kevin McAdam, Anal. Methods, 2013, 5, 81-88.

Кислота

В одном аспекте способная образовывать аэрозоль композиция дополнительно содержит кислоту. Кислота может быть любой подходящей кислотой. В одном аспекте кислота представляет собой органическую кислоту. В одном аспекте кислота представляет собой карбоновую кислоту. В одном аспекте кислота представляет собой органическую карбоновую кислоту.

В одном аспекте кислота выбрана из группы, состоящей из уксусной кислоты, молочной кислоты, муравьиной кислоты, лимонной кислоты, бензойной кислоты, пировиноградной кислоты, леволиновой кислоты, янтарной кислоты, винной кислоты, сорбиновой кислоты, пропионовой кислоты, фенилуксусной кислоты и их смесей. В одном аспекте кислота выбрана из группы, состоящей из лимонной кислоты, бензойной кислоты, леволиновой кислоты, молочной кислоты, сорбиновой кислоты и их смесей. В одном аспекте кислота выбрана из группы, состоящей из лимонной кислоты, бензойной кислоты, леволиновой кислоты и их смесей. В одном аспекте кислота представляет собой по меньшей мере лимонную кислоту. В одном аспекте кислота состоит из лимонной кислоты.

В одном аспекте кислота выбрана из кислот, имеющих pKa от 2 до 5. В одном аспекте

кислота представляет собой слабую кислоту. В одном аспекте кислота представляет собой слабую органическую кислоту.

[illegible]

20 Молярное соотношение кислоты к никотину может быть выбрано по желанию. В
одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 5:1 до 1:5. В
одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 4:1 до 1:4. В
одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 3:1 до 1:3. В
одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 2:1 до 1:2. В
25 одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 1,5:1 до 1:1,5.
В одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 1,2:1 до 1:
1,2. В одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 5:1 до
1:1. В одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 4:1 до
1:1. В одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 3:1 до
30 1:1. В одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 2:1 до
1:1. В одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 1,5:1
до 1:1. В одном аспекте молярное соотношение кислоты к никотину составляет от 1,2:1
до 1:1.

В одном аспекте общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, составляет не более чем 5 мольных эквивалентов в расчете на никотин. В одном аспекте общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, составляет не более чем 4 мольных эквивалентов в расчете на никотин. В одном аспекте общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, составляет не более чем 3 мольных эквивалентов в расчете на никотин. В одном аспекте общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, составляет не более чем 2 мольных эквивалентов в расчете на никотин. В одном аспекте общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, не превышает 1 моль-эквивалента в расчете на никотин.

В одном аспекте общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, составляет не менее чем 0,01 мольных эквивалента в расчете на никотин. В одном аспекте общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, составляет не менее чем 0,05 мольных эквивалентов в расчете на никотин. В одном аспекте общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, составляет не менее чем 0,1 мольных эквивалентов в расчете на никотин. В одном аспекте общее содержание кислоты,

[illegible]

Количество кислоты и растворимость кислоты могут быть выбраны таким образом,

чтобы данное количество кислоты растворялось в воде. В одном аспекте при 20°C в воде растворяется по меньшей мере 20% кислоты. В одном аспекте при 25°C в воде растворяется по меньшей мере 20% кислоты. В одном аспекте при 30°C в воде растворяется по меньшей мере 20% кислоты. В одном аспекте при 20°C в воде растворяется по меньшей мере 35% кислоты. В одном аспекте при 20°C по меньшей мере 40% кислоты растворяется в воде. В одном аспекте при 20°C в воде растворяется по меньшей мере 45% кислоты. В одном аспекте при 20°C по меньшей мере 50% кислоты растворяется в воде. В одном аспекте при 20°C в воде растворяется по меньшей мере 55% кислоты.

Вкусоароматическое вещество

Способная образовывать аэрозоль композиция содержит одно или несколько вкусоароматических веществ или ароматизирующих компонентов. Как используется в настоящем описании, термины «вкусоароматическое вещество» и «ароматизатор» относятся к материалам, которые там, где местное законодательство это разрешает, могут быть добавлены к композиции для создания желаемого вкуса или аромата в предназначенном для взрослых потребителей продукте. Они могут включать экстракты (например, лакрицы, гортензии, листьев японский белокорой магнолии, ромашки, пажитника, гвоздики, ментола, японской мяты, анисового семени, корицы, трав, гаултерии, вишни, ягод, персика, яблока, ликера Драмбуи, бурбона, скотча, виски, курчавой мяты, перечной мяты, лаванды, кардамона, сельдерея, каскароллы, мускатного ореха, сандалового дерева, бергамота, герани, медовой эссенции, розового масла, ванили, лимонного масла, апельсинового масла, кассии, тмина, коньяка, жасмина, иланг-иланга, шалфея, фенхеля, гвоздичного перца, имбиря, аниса, кориандра, кофе или мятного масла из любых растений рода *Mentha*), усилителей вкуса, блокаторов рецепторных участков ощущения горечи, активаторов или стимуляторов рецепторных участков чувственного восприятия, сахаров и/или заменителей сахара (например, сукралозы, ацесульфамата калия, аспартама, сахарина, цикламатов, лактозы, сахарозы, глюкозы, фруктозы, сорбита, или маннита) и других добавок, таких как древесный уголь, хлорофилл, минеральные вещества, растительное сырье или освежители дыхания. Они могут быть искусственными, синтетическими или натуральными ингредиентами, или же их смесями. Они могут находиться в любой подходящей форме, например, в виде масла, жидкости или порошка.

Одно или несколько вкусоароматических веществ могут быть выбраны из додекан-1-ола; октан-1-ола; 4-метил-1-пропан-2-ил-7-оксабицикло[2.2.1]гептана; 2,4,5-триметилфенола; 2,4,6-триметилфенола; 2,4-диметилбензальдегида; 2-этокси-3-метилпиразина; 2-этилфенола; 2-этилпиразина; 2-метокси-3-(2-метилпропил)пиразина; 5-метил-2-пропан-2-илгекс-2-енала; 2-метилпент-2-еновой кислоты; 2-бутан-2-ил-3-метоксипиразина; 3,5,5-триметилциклогексан-1,2-диола; 3-этилфенола; [(z)-гекс-3-енил] 3-метилбутаноата; 3-метилнонан-2,4-диола; 3-метилбут-2-ен-1-тиола; 3-метил-1H-индола; 3-метилфенола; 3-пропилфенола; оксолан-2-она; 4-(гидроксиметил)-2-метоксифенола; 4-метилфенола; 2-метокси-4-пропилфенола; 4-пропилфенола; [4-(3-оксобутил)фенил]ацетата; 5-этил-2-метоксифенола; (е)-5-метилгепт-2-ен-4-она; (е)-5-метил-2-фенилгекс-2-енала; 5-винил-2,3-диметилпиразина; 2-этил-6-метоксифенола; 2-метокси-6-метилфенола; 6-метилхромен-2-она; 1,1-диэтоксиэтана; 1-(4-метоксифенил) этанола; уксусной кислоты; 3-гидроксипутан-2-она; 1-фенилэтанола; гексан-2,3-диола; 1-пиразин-2-илетанола; 1-(2-пиридил)этанола; 1-пиридин-4-илетанола; 1-(1,3-тиазол-2-ил)этанола; 1-(5-метилфуран-2-ил)этанола; проп-2-енил-6-циклогексилгексаноата; проп-2-енилгексаноата; проп-2-енилнаноата; пентилбутаноата; (2z)-2-

(фенилметилен)гептанола; пентилгексаноата; 1-метокси-4-[(е)-проп-1-енил]бензола; (4-метоксифенил)метилацетата; (4-метоксифенил)метилформиата; бензальдегида; диметоксиметилбензола; 4-метил-2-фенил-1,3-диоксолана; фенилметилацетата; фенилметанола; 2-фенилэтанола; фенилметил-3-фенилпроп-2-еноата;

5 фенилметилформиата; фенилметил-2-фенилацетата; 1,7,7-триметилбицикло[2.2.1]гептан-6-ола; (1-метил-2-оксопропил)бутаноата; 2,3-дигидроксипропаноата; бутан-1-ола; бутил 2-метилбутаноата; бутилацетата; бутилбутаноата; (1-бутокси-1-оксопропан-2-ил)бутаноата; бутил-3-метилбутаноата; 5-бутил-4-метилоксолан-2-ола; бутановой кислоты; оксолан-2-ола; 2-метил-5-пропан-2-илфенола; 2-метил-5-проп-1-ен-2-илциклогекс-2-ен-1-ола; 4-метил-1-пропан-2-илциклогекс-3-ен-1-ола; 2-метил-5-проп-1-ен-2-илциклогекс-2-ен-1-ола; (5s)-2-метил-5-проп-1-ен-2-илциклогекс-2-ен-1-ола; (5r)-2-метил-5-проп-1-ен-2-илциклогекс-2-ен-1-ола; (1r,4e,9s)-4,11,11-триметил-8-метиленбицикло[7.2.0]ундец-4-ена; 4,5-эпокси-4,11,11-триметил-8-метиленбицикло(7.2.0)ундекана; (е)-3-фенилпроп-2-ен-1-ола; 3-фенилпроп-2-еновой кислоты; [(е)-3-фенилпроп-2-енил]ацетата;

15 [(е)-3-фенилпроп-2-енил] (е)-3-фенилпроп-2-еноата; z-дек-4-ен-1-ола; (z)-нон-6-ен-1-ола; 3,7-диметил-окта-2,6-диен-1-ола; 3,7-диметил-окта-6-ен-1-ола; 3,7-диметил-окта-6-енилацетата; (е)-1-(2,6,6-триметил-1-циклогекс-1,3-диенил)бут-2-ен-1-ола; (е)-1-(2,6,6-триметил-1-циклогекс-2-енил)бут-2-ен-1-ола; 1-(2,6,6-триметил-1-циклогекс-2-енил)бут-2-ен-1-ола; 6-пентилоксолан-2-ола; 5-гексилоксолан-2-ола; декан-1-ола; декановой кислоты; диэтилпропандиоата; 2,3-диэтилпиразина; диэтилдекандиоата; хроман-2-ола; 3-метил-2-пентилциклопент-2-ен-1-ола; 1,3-диметоксибензола; 1,4-диметоксибензола; 2,6-диметоксифенола; (2-метил-1-фенилпропан-2-ил)бутаноата; 2,3-диметилпиразина; 2,5-диметилпиразина; 2,6-диметилпиразина; метилсульфанилметилметана; 3,4-диметилциклопентан-1,2-диона; 3-гидрокси-4,5-диметил-5h-фуран-2-ола; 2,6-диметилгепт-5-ен-1-ола; 4-гидрокси-2,5-диметилфуран-3-ола; 2,6-диметилпиридина; феноксидбензола; 6-гептилоксолан-2-ола; 5-октилоксолан-2-ола; этил-3-метилсульфанилпропаноата; этил-3-гидроксипропаноата; этилацетата; этил-3-оксипропаноата; этилбензоата; этилбутаноата; этил-3-фенилпроп-2-еноата; этилдеканоата; этилформиата; 4-этил-2-метоксифенола; этилгептаноата; этилгексаноата;

30 этил-2-метилпропаноата; этил-3-метилбутаноата; этил-2-гидроксипропаноата; этилдодеканоата; этил-4-оксопентаноата; 2-этил-3-гидроксипиран-4-ола; этил-3-метил-3-фенилоксиран-2-карбоксилата; этилтетрадеканоата; этилнонаноата; этилоктаноата; этил (z)-октадек-9-еноата; этилгексадеканоата; этилпропаноата; этил (е)-бут-2-еноата; этил (е)-окт-2-еноата; этилпентаноата; 3-этокси-4-гидроксидбензальдегида; 2-этил-3,5-диметилпиразина; 3-этил-2-гидроксициклопент-2-ен-1-ола; этил-2-метилбутаноата; этил 2-метилпентаноата; 2-этил-3-метилпиразина; 2-этил-3,5-диметилпиразина; этил-3-гексеноата; 5-этил-3-гидрокси-4-метил-5h-фуран-2-ола; 5-этил-4-гидрокси-2-метилфуран-3-ола; 4-этилфенола; 3-этилпиридина; 4-этилпиридина; 4,7,7-триметил-8-оксабицикло[2.2.2]октана; 2-метокси-4-проп-2-енилфенола; (1s,4r,6s)-1,5,5-триметилбицикло[2.2.1]гептан-6-ола; фуран-2-илметилацетата; фуран-2-илметантиола; фуран-2-илметилпропаноата; (2e)-3,7-диметил-окта-2,6-диен-1-ола; [(2e)-3,7-диметил-окта-2,6-диенил]ацетат; (5e)-6,10-диметилундека-5,9-диен-2-ола; [(2e)-3,7-диметил-окта-2,6-диенил]формиата; (2r,3s,4r,5r)-2,3,4,5,6-пентагидрокси-гексановой кислоты; 1,3-диацетилоксипропан-2-илацетата; 2-метоксифенола; 5-пропилоксолан-2-ола; гептановой кислоты; гептан-2-ола; гептан-1-ола; оксациклогептадец-7-ен-2-ола; 6-метилоксолан-2-ола; 5-этилоксолан-2-ола; гексанола; гексановой кислоты; гексан-1-ола; (z)-гекс-3-ен-1-ола; [(z)-гекс-3-енил]ацетата; гекс-2-ен-1-ола; гекс-3-еновой кислоты; (е)-гекс-2-еновой кислоты; гекс-2-ен-1-ола; гекс-2-енилацетата; [(z)-гекс-3-енил]бутаноата; [(z)-гекс-3-

енил]формиата; гекс-3-енил-2-метилбутаноата; гексил 2-метилбутаноата; гексилацетата; гексилбутаноата; гексилформиата; гексилгексаноата; гексил-2-гидроксипропаноата; гексилоктаноата; (1e,4e,8e)-2,6,6,9-тетраметилциклоундека-1,4,8-триена; 2-гидрокси-4-метилбензальдегида; 4-гидрокси-5-метилфуран-3-она; 7-гидрокси-3,7-диметилоктаналю; 5 4-(4-гидроксифенил)бутан-2-она; 4-(2,6,6-триметил-1-циклогекс-2-енил)бут-3-ен-2-она; 4-(2,6,6-триметил-1-циклогексенил)бут-3-ен-2-она; (e)-4-[(1s,5r)-2,5,6,6-тетраметил-1-циклогекс-2-енил]бут-3-ен-2-она; 3-метилбутилацетата; 3-метилбутилбутаноата; 3-метилбутилгексаноата; 3-метилбутил-3-метилбутаноата; 3-метилбутил-2-гидроксипропаноата; 3-метилбутилоктаноата; 3-метилбутилпропаноата; 3-метилбутилпентаноата; [(1s,4r,6s)-1,7,7-триметил-6-бицикло[2.2.1]гептанил]ацетата; 2-метилпропан-1-ола; 2-метилпропилацетата; 2-метилпропиловый эфир 3-оксобутановой кислоты; 2-метилпропилбутаноата; 2-метилпропилгексаноата; 2-метилпропил-3-метилбутаноата; 2-метилпропил-2-метилбутаноата; 2-метилпропаналю; 2-метилпропановой кислоты; 1,2-диметокси-4-проп-1-енилбензола; 5-метил-2-пропан-2-илциклогексан-1-она; пропан-2-илтетрадеканоата; 5-метил-2-проп-1-ен-2-илциклогексан-1-ола; 3-метилбутановой кислоты; 3-метил-2-[(z)-пент-2-енил]циклопент-2-ен-1-она; 2,6,6-триметилциклогекс-2-ен-1,4-диола; додеканалю; (4r)-1-метил-4-проп-1-ен-2-илциклогексена; 3,7-диметилокта-1,6-диен-3-ола; 2-(5-метил-5-винилтетрагидро-2-фуранил)-2-пропанола; 3,7-диметилокта-1,6-диен-3-илацетата; 3,7-диметилокта-1,6-диен-3-илбутаноата; 3-гидрокси-2-метилпирани-4-она; (4z)-4-[(e)-бут-2-енилиден]-3,5,5-триметилциклогекс-2-ен-1-она; 1-метил-4-пропан-2-илциклогекса-1,4-диола; 5-метил-2-(2-сульфанилпропан-2-ил)циклогексан-1-она; (1r,2s,5r)-5-метил-2-пропан-2-илциклогексан-1-ола; (2s,5r)-2-изопропил-5-метилциклогексанона; [(6s,9r)-9-метил-6-пропан-2-ил-1,4-диоксаспиро[4.5]декан-3-ил]метанола; (5-метил-2-пропан-2-илциклогексил)ацетата; (5-метил-2-пропан-2-илциклогексил)2-метилбутаноата; 3-метилсульфанилпропаналю; 4-метоксибензальдегида; 2-метокси-3-метилпиразина; 2-метокси-4-метилфенола; 4-этилен-2-метоксифенола; п-анизилового спирта; 4-(4-метоксифенил)бутан-2-она; 2-метил-2-пентеновой кислотой; 1-(4-метилфенил)этанона; 1-метокси-4-метилбензола; метил 2-аминобензоата; 1-фенилэтилацетата; 2-метилбутан-1-ола; 2-метилбутилацетата; 3-метилбутил-2-метилпропаноата; 2-метилбутаналю; 3-метилбутаналю; метилбутаноата; 2-метилбутановой кислоты; метил (e)-3-фенилпроп-2-еноата; 3-метилциклопентан-1,2-диола; метил 2-(3-оксо-2-пентилциклопентил)ацетата; 5-метилфуран-2-карбальдегида; 2-(метилдисульфанилметил)фурана; метилгексаноата; метил 2-метилпропаноата; метил 2-метиламинобензоата; метил-4-метоксибензоата; 3-метилпентановой кислоты; метил 2-фенилацетата; 2-метилпиразина; 5-метилхиноксалина; метилсульфанилметана; 2-метилоксолан-3-она; втор-метилбутантиоата; метил (e)-нон-2-еноата; 2-метилпентановой кислоты; 3-метилциклогексан-1,2-диола; метилфуран-2-карбоксилата; метил 2-метилбутаноата; 1-(1h-пиррол-2-ил)этанона; метил-3-метилсульфанилпропаноата; 6-метилгепта-3,5-диен-2-она; 6-метилгепт-5-ен-2-она; 2-(4-метил-1,3-тиазол-5-ил)этанола; 5-метил-6,7-дигидро-5h-циклопента[b]пиразина; (e)-1-(2,6,6-триметил-1-циклогекс-2-енил)пент-1-ен-3-она; 3-метилбутан-1-ола; 3-метилпиридина; 4-метилпиридина; 6-метилхинолина; 5-метилтиофен-2-карбальдегида; (e)-2-метилбут-2-еновой кислоты; (1s,2s,5r)-5-метил-2-пропан-2-илциклогексан-1-ола; (2z)-3,7-диметилокта-2,6-диен-1-ола; 3,7,11-триметилдодека-1,6,10-триен-3-ола; [(2z)-3,7-диметилокта-2,6-диенил]ацетата; (2e,6z)-нона-2,6-диеналю; 2,6-нонадиен-1-ола; 6-бутилоксан-2-она; 5-пентилтетрагидрофуран-2-она; нонаналю; нонановой кислоты; нонан-2-она; (z)-нон-6-еналю; (3e)-3,7-диметилокта-1,3,6-триена; 6-пропилоксан-2-она; 5-бутилоксолан-2-она; октаналю; октановой кислоты; окт-1-ен-3-ола; октилацетата; (e)

-октадек-9-еновой кислоты; 5-метил-3h-фуран-2-она; 1-оксациклогексадекан-2-она; пентан-1-ола; пентан-2-она; 2-фенилэтил-3-метилбутаноата; 2-фенилэтил-2-фенилацетата; 2-фенилацетальдегида; 2-фенилуксусной кислоты; 3-фенилпропановой кислоты; 3-фенилпропан-1-ола; 2-фенил-2-бутенала; 3-фенил-2-пропен-1-ола; 4,7,7-триметилбицикло [3.1.1]гепт-3-ена; 7,7-диметил-4-метиленбицикло[3.1.1]гептана; (6s)-3-метил-6-пропан-2-илциклогекс-2-ен-1-она; 1,3-бензодиоксол-5-карбальдегида; 2-этокси-5-[(е)-проп-1-енил]фенола; пропановой кислоты; пропилацетата; пропилбутаноата; пропилформиата; 3-пропилиден-2-бензофуран-1-она; 2-оксопропановой кислоты; 3,7-диметилокт-6-ен-1-ола; (2r,3r)-2,3-дигидроксиянтарной кислоты; 2-[(1s)-4-метил-1-циклогекс-3-енил] пропан-2-ола; 1-метил-4-пропан-2-илиденциклогексена; 2-(4-метил-1-циклогекс-3-енил) пропан-2-илацетата; 5,6,7,8-тетрагидрохиноксалина; 2,3,5,6-тетраметилпиразина; 2,6,6,10-тетраметил-1-оксаспиро[4.5]дец-9-ена; 5-метил-2-пропан-2-илфенола; (4-метилфенил) ацетата; 4-метилбензальдегида; (4-метилфенил)-3-метилбутаноата; е-2-метокси-4-проп-1-енилфенола; 2,3,5-триметилфенола; 2,3,5-триметилпиразина; 6-гексилоксан-2-она; 5-гептилоксолан-2-она; ундекан-2-она; пентанала; пентановой кислоты; 5-метилоксолан-2-она; 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида; 3,4-диметоксибензальдегида; 2-фенилэтилацетата; (е)-гекс-2-еновой кислоты; (3ar,5as,9as,9br)-3a,6,6,9a-тетраметилдодекагидронафто[2,1-b]фурана; 6-пентил-5,6-дигидропиран-2-она; 2-фенилэтил-2-метилпропаноата; 2-метил-1-[1-(2-метилбутокс)этокси]бутана; 4,4a-диметил-6-проп-1-ен-2-ил-3,4,5,6,7,8-гексагидронафталин-2-она; 2-(1-меркапто-1-метилэтил)-5-метилциклогексанона; и их смесей.

Одно или несколько вкусоароматических веществ могут быть выбраны из 4-(4-метоксифенил)-2-бутанона [также известного как (4-(пара-)метоксифенил)-2-бутанон], 4-гидрокси-3-метоксибензальдегида [также известного как ванилин], 5-гептилоксолан-2-она [также известного как γ -ундекалактон], (2S,5R)-2-изопропил-5-метилциклогексанона [также известного как ментон], 2-этокси-5-[(Е)-проп-1-енил] фенола [также известного как 5-пропенилгуаэтол], (1R,2S,5R)-5-метил-2-пропан-2-илциклогексан-1-ола [также известного как ментол], 2-(1-меркапто-1-метилэтил)-5-метилциклогексанона [также известного как пара-мента-8-тиол-3-он] и их смесей. В одном аспекте вкусоароматическое вещество представляет собой по меньшей мере ментол.

Одно или несколько вкусоароматических веществ могут быть представлены в любом количестве, если присутствуют. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве не более чем 10 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве не более чем 7 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве не более чем 5 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве не более чем 4 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве не более чем 3 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве не более чем 2 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве не более чем 1 мас.% по отношению к массе способной

образовывать аэрозоль композиции.

В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве от 0,01 до 5 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве от 0,01 до 4 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве от 0,01 до 3 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве от 0,01 до 2 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве от 0,01 до 1 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве от 0,01 до 0,5 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

Инкапсулирующий материал

[illegible]

инкапсулирующих материалов присутствуют в общем количестве не более чем 0,01 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько инкапсулирующих материалов присутствуют в общем количестве не более чем 0,001 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

В одном аспекте один или несколько инкапсулирующих материалов выбраны из группы, состоящей из мицелл, циклодекстринов, каликсаренов, металлоорганических каркасов, дендримеров, полимеров, гидроколлоидов, спор пыльцы, частиц дрожжей, пористого диоксида кремния и их смесей. В одном аспекте один или несколько инкапсулирующих материалов выбраны из циклодекстринов и их смесей.

Один или несколько циклодекстринов могут быть выбранными из группы, состоящей из незамещенных циклодекстринов, замещенных циклодекстринов и их смесей. В одном аспекте по меньшей мере один циклодекстрин является незамещенным циклодекстрином. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов выбраны из группы, состоящей из незамещенных циклодекстринов. В одном аспекте по меньшей мере один циклодекстрин является замещенным циклодекстрином. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов выбраны из группы, состоящей из замещенных циклодекстринов.

В одном аспекте один или несколько циклодекстринов выбраны из группы, состоящей из незамещенного (α)-циклодекстрина, замещенного (α)-циклодекстрина, незамещенного (β)-циклодекстрина, замещенного (β)-циклодекстрина, незамещенного (γ)-циклодекстрина, замещенного (γ)-циклодекстрина и их смесей. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов выбраны из группы, состоящей из незамещенного (β)-циклодекстрина, замещенного (β)-циклодекстрина и их смесей.

В одном аспекте один или несколько циклодекстринов выбраны из группы, состоящей из незамещенного (α)-циклодекстрина, незамещенного (β)-циклодекстрина, незамещенного (γ)-циклодекстрина и их смесей. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов выбраны из незамещенного (β)-циклодекстрина.

В одном аспекте один или несколько циклодекстринов выбраны из группы, состоящей из замещенного (α)-циклодекстрина, замещенного (β)-циклодекстрина, замещенного (γ)-циклодекстрина и их смесей. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов выбраны из замещенных (β)-циклодекстринов. Предусмотрены химические замещения в положениях 2-, 3- и 6-гидроксильных участков с более предпочтительными замещениями в положении 2.

В одном аспекте один или несколько циклодекстринов выбраны из группы, состоящей из 2-гидроксипропил- α -циклодекстрина, 2-гидроксипропил- β -циклодекстрина, 2-гидроксипропил- γ -циклодекстрина и их смесей. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов являются по меньшей мере 2-гидроксипропил- α -циклодекстрином. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов являются по меньшей мере 2-гидроксипропил- β -циклодекстрином. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов являются по меньшей мере 2-гидроксипропил- γ -циклодекстрином.

2-Гидроксипропильные производные циклодекстринов, такие как 2-гидроксипропил- β -циклодекстрин имеют повышенную растворимость в воде по сравнению с базовыми циклодекстринами, такими как β -циклодекстрин.

Один или несколько циклодекстринов могут присутствовать или не присутствовать в любом подходящем количестве в способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 12 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль

композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 10 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 9 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 8 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 7 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 6 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 5 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 4 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 3 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 2 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 1 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в количестве не более чем 0,1 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в количестве не более чем 0,01 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции. В одном аспекте один или несколько циклодекстринов присутствуют в общем количестве не более чем 0,001 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

В одном аспекте, если способная образовывать аэрозоль композиция содержит один или несколько циклодекстринов, то способная образовывать аэрозоль композиция не содержит вкусоароматических веществ, которые могут быть инкапсулированы одним или несколькими циклодекстринами. В одном аспекте, если способная образовывать аэрозоль композиция содержит один или несколько циклодекстринов, то способная образовывать аэрозоль композиция не содержит вкусоароматических веществ.

Как обсуждается в данном документе, в одном аспекте настоящее изобретение обеспечивает способную образовывать аэрозоль композицию, содержащую (i) воду (ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; и (iii) один или несколько инкапсулирующих материалов, имеющих растворимость в воде по меньшей мере 50% растворимости в воде указанного одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; и (iv) никотин.

В одном аспекте один или несколько инкапсулирующих материалов имеют растворимость в воде, составляющую по меньшей мере 55% растворимости в воде одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию. В одном аспекте один или несколько инкапсулирующих материалов имеют растворимость в воде, составляющую по меньшей мере 60% растворимости в воде одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат

составляет от 1,2:1 до 1:1. В одном аспекте молярное соотношение инкапсулирующего материала ко вкусоароматическому веществу составляет от 1,1:1 до 1:1. В одном аспекте молярное соотношение инкапсулирующего материала ко вкусоароматическому веществу составляет приблизительно 1: 1.

5 Способ

Как обсуждается в данном документе, в одном аспекте предлагается способ улучшения органолептических свойств превращенной в аэрозоль композиции никотина, при этом способ включает стадии перевода в аэрозольное состояние способной образовывать аэрозоль композиции, содержащей:

10 (i) воду;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию;

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов;

15 в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

Как обсуждается в данном документе, в одном аспекте предложен способ формирования аэрозоля, при этом способ включает перевод в аэрозольное состояние 20 способной образовывать аэрозоль композиции, содержащей (i) воду (ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию и (iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые 25 подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

В способе аэрозоль может быть сформирован процессом, осуществляемым при температуре ниже 60°C. В способе аэрозоль может быть сформирован процессом, осуществляемым при температуре ниже 50°C. В способе аэрозоль может быть сформирован процессом, осуществляемым при температуре ниже 40°C. В способе 30 аэрозоль может быть сформирован процессом, осуществляемым при температуре ниже 30°C. В способе аэрозоль может быть сформирован процессом, осуществляемым при температуре ниже 25°C. В способе аэрозоль может быть сформирован процессом, который не включает нагревание.

35 В способе аэрозоль может быть сформирован посредством приложения ультразвуковой энергии к способной образовывать аэрозоль композиции.

В одном аспекте аэрозоль превращенной в аэрозоль композиции имеет D50 от 2 до 6 мкм. Ссылки в настоящем описании на распределение частиц по размерам, D50, D10 или D90 относятся к значениям, измеренным в соответствии с Британской и Европейской фармакопеями, 2.9.31 Анализ размера частиц с помощью дифракции лазерного света 40 (см. BRITISH PHARMACOPOEIA COMMISSION. (2014), British Pharmacopoeia. London, England: Stationery Office and COUNCIL OF EUROPE. (2013). European Pharmacopoeia. Strasbourg, France: Council of Europe). Термины D50, Dv50 и Dx50 взаимозаменяемы. Термины D10, Dv10 и Dx10 взаимозаменяемы. Термины D90, Dv90 и Dx90 взаимозаменяемы.

45 В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 2,5 до 6 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 3 до 6 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 3,5 до 6 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 4 до 6 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 4,5 до 6 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 5 до 6 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет

D50 от 2,5 до 5,5 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 3 до 5,5 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 3,5 до 5,5 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 4 до 5,5 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 4,5 до 5,5 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D50 от 5 до 5,5 мкм.

5 В одном аспекте аэрозоль имеет D10 по меньшей мере 0,5 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D10 по меньшей мере 1 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D10 по меньшей мере 2 мкм.

В одном аспекте аэрозоль имеет D90 не более чем 15 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D90 не более чем 12 мкм. В одном аспекте аэрозоль имеет D90 не более чем 10
10 мкм.

В одном аспекте D50 измеряется после исключения частиц, имеющих размер менее чем 1 мкм. В одном аспекте D10 измеряется после исключения частиц, имеющих размер менее чем 1 мкм. В одном аспекте D90 измеряется после исключения частиц, имеющих размер менее чем 1 мкм.

15 Композиция может быть помещена в контейнер или доставляться любыми средствами. В одном аспекте настоящее изобретение относится к помещенной в контейнер способной образовывать аэрозоль композиции, содержащей (а) один или несколько контейнеров; и (b) способную образовывать аэрозоль композицию, как определено в данном описании. Контейнер может быть любым подходящим контейнером, например, для хранения или
20 доставки композиции. В одном аспекте контейнер выполнен с возможностью взаимодействия с электронной системой обеспечения аэрозоля. Контейнер может быть выполнен таким образом, чтобы он мог сообщаться по текучей среде с электронной системой обеспечения аэрозоля, так что композиция может доставляться в электронную систему обеспечения аэрозоля. Как описано выше, настоящее изобретение относится
25 к контейнеру, который может использоваться в электронной системе обеспечения аэрозоля, такой как электронная сигарета. В нижеследующем описании используется термин «электронная сигарета»; однако этот термин может использоваться как синоним электронной системы обеспечения аэрозоля.

Как обсуждается в данном документе, контейнер по настоящему изобретению обычно
30 предназначен для доставки способной образовывать аэрозоль композиции к электронной сигарете или внутри нее. Способная образовывать аэрозоль композиция может храниться внутри электронной сигареты или может продаваться как отдельный контейнер для последующего использования с электронной сигаретой или в ней. Как понятно специалисту в данной области, электронные сигареты могут содержать блок,
35 известный как съемный картомайзер, который обычно включает резервуар со способной образовывать аэрозоль композицией, генератор аэрозоля, такой как фитиль и нагревательный элемент для испарения способной образовывать аэрозоль композиции. В некоторых электронных сигаретах картомайзер является частью цельного устройства и не снимается. В одном аспекте контейнер представляет собой картомайзер или часть
40 картомайзера. В одном аспекте контейнер не является картомайзером или частью картомайзера, а представляет собой контейнер, такой как резервуар, который может использоваться для доставки никотиновой композиции к электронной сигарете или внутри нее.

В одном аспекте контейнер является частью электронной сигареты. Следовательно,
45 в дополнительном аспекте настоящее изобретение обеспечивает электронную систему обеспечения аэрозоля, содержащую: способную образовывать аэрозоль композицию, как определено в данном документе; генератор аэрозоля, предназначенный для перевода в аэрозольное состояние композиции, предназначенной для целей вдыхания

пользователем электронной системы обеспечения аэрозоля; источник электропитания, содержащий гальванический элемент или батарею, предназначенный для снабжения генератора аэрозоля энергией.

В дополнение к способной образовывать аэрозоль композиции настоящего изобретения и системам, таким как контейнеры и электронные системы обеспечения аэрозоля, содержащим ее, настоящее изобретение обеспечивает способ улучшения органолептических свойств превращенного в аэрозоль никотина. В дополнительном аспекте настоящее изобретение обеспечивает способ улучшения стабильности при хранении превращенной в аэрозоль композиции никотина.

Ссылка на улучшение органолептических свойств испаренного раствора никотина может включать улучшение мягкости испаренного раствора никотина, как это воспринимается пользователем.

Способ по настоящему изобретению может включать дополнительные стадии либо перед перечисленными стадиями, либо после перечисленных стадий, либо между одной или несколькими из перечисленных стадий.

Краткое описание чертежей

Настоящее изобретение теперь будет описано более подробно только в качестве примера со ссылкой на прилагаемые фигуры, на которых:

На Фигуре 1 показан график, иллюстрирующий изменение $p_s K_{a2}$ в зависимости от концентрации никотина;

На Фигуре 2 показаны схемы докинга.

Теперь изобретение будет описано со ссылкой на следующий неограничивающий пример.

Примеры

Пример

Связывание и энергия связывания гидроксипропил-бета-циклодекстрина и ментола изучали с помощью автоматизированного моделирования докинга. В автоматизированном моделировании докинга используется трехмерное представление для оценки соответствия гостевого субстрата в молекулярной полости. Обычно считается, что предсказанные энергии связывания могут быть точно определены с помощью автоматизированного моделирования докинга.

Докинг был выполнен в Autodock 4.2 [The Scripps Research Institute, La Jolla, CA, USA] (Morris, et al., 2009) с использованием настроек, описанных ниже. Вкратце, атомы водорода были объединены, и заряды Kolman/Gasteiger были добавлены в соответствии со стандартной методологией. При необходимости размер сетки был скорректирован для размещения рецептора. В целом настройки были оставлены со значениями по умолчанию. Рецепторы рассматривались как жесткие объекты. Формат выхода - генетический алгоритм Lamarckian (Ламарка).

Хозяин (носитель) - гидроксипропил-бета-циклодекстрин

Гидроксипропил-бета-ЦД (HP-β-ЦД) содержит множество изомеров из-за случайного замещения во время синтеза. Первичные гидроксильные группы в положении C-6 сахаров, наиболее вероятно, будут замещены из-за их нуклеофильности и отсутствия стерического скопления, но замещение также может происходить в положениях C-2 и C-3, которые находятся с противоположной стороны от полости по отношению к C-6. Кристаллические структуры бета (β)-циклодекстрина были взяты из Кембриджского центра структурных данных (CCDC) (обозначение «ARUXIU») и модифицированы гидроксипропильными группами в соответствии с несколькими схемами замещения, чтобы увидеть, насколько это важно для связывания.

Были опробованы следующие варианты:

Версия 1: без замещения бета-циклодекстрина

Версия 2: Пять (из семи) C-6 гидроксильных групп были функционализированы, вместе с одним C-2 и одним C-3, все выбранные случайным образом.

Версия 3: функционализированы пять C-6 гидроксильных групп, выбранных случайным образом.

Эти изменения были внесены с помощью Discovery Studio Visualizer [v16.1.0.15350, (2015), Dassault Systèmes Biovar Corp]. Затем структуры были оптимизированы с помощью быстрого, похожего на Dreiding инструмента силового поля в Discovery Studio Visualizer и преобразованы в формат .pdb для дальнейшей обработки с помощью Autodock 4.2. Настройки, используемые при моделировании каждой из версий 1, 2 и 3, представлены в таблице ниже.

Установочные параметры	Дополнительная информация	Вариант моделирования		
		1	2	3
Расстояние между точками сетки	Ангстремы	0,375	0,375	0,375
Количество точек сетки в каждом декартовом направлении	x	40	40	50
	y	40	40	40
	z	40	40	50
Координаты центральной точки сетки на карте		(4.422, 6.023, 14.126)	(4.793, 6.323, 14.339)	(4.445, 6.360, 14.413)
Минимальные координаты в сетке		(-3.078, -1.477, 6.626)	(-2.707, -1.177, 6.839)	(-4.930, -1.140, 5.038)
Максимальные координаты в сетке		(11.922, 13.523, 21.626)	(12.293, 13.823, 21.839)	(13.820, 13.860, 23.788)
Заданное пользователем начальное положение для лиганда		случайное		
Начальное относительное двухгранное смещение		случайное		
Заданные пользователем начальные относительные внутренние углы		случайное		
Параметр поиска стыковки		Генетический алгоритм		
Количество запрошенных стыковок GA		10 исследований		
Величина популяции		150		
Максимальное количество оценок		2500000		
Максимальное количество лучших индивидов, которые автоматически выживают		1		
Скорость мутации гена		0,02		
Скорость кроссовера		0,08		
GA режим кроссовера		"twopt"		
Среднее значение распределения Коши для генной мутации	Альфа-параметр	0		
Изменение распределения Коши для генной мутации	Бэта-параметр	1		
Количество поколений для отбора худших особей		10		
Выход для стыковки		Lamarckian GA		

Гость – Ментол

Трехмерная структура ментола была получена из Pubchem и преобразована в формат .pdb для использования в моделировании докинга.

Результаты докинга

Моделирование докинга по умолчанию составляет 10 повторений для проверки жизнеспособных конформаций между хозяином и гостем. Таким образом, каждое

моделирование дает 10 результатов. Результат выражается через связь Гиббса со свободной энергией. Отрицательное значение означает энергетически благоприятный процесс. Абсолютный размер этой энергии связывания является полезным средством сравнения аффинности связывания. Как правило, отрицательные значения с абсолютным размером выше примерно 5 ккал/моль указывают на умеренно сильное сродство к связыванию. Полные данные для каждой версии приведены здесь в файлах журнала докинга, но суммированы ниже вместе с изображением, показывающим характерный комплекс привязки для каждой версии.

Версия 1: Незамещенный бета-циклодекстрин

Моделирование докинга дало несколько конформаций, во всех случаях связывания гостя внутри полости хозяина - как показано на фигуре 2, на которой показаны сферы атомов для хозяина и линейное представление для гостя для большей ясности.

Соответствующий файл журнала докинга называется menBCD.dlg.

Испытания обеспечили свободную энергию связывания -5,1 ккал/моль.

Версия 2: гидроксипропил-бета-циклодекстрин замещен по 7 участкам

Моделирование докинга дало несколько конформаций, во всех случаях связывания гостя внутри полости хозяина - как показано на фигуре 3, на которой показаны сферы атомов для хозяина и линейное представление для гостя для большей ясности.

Испытания обеспечили свободную энергию связывания -6,0 ккал/моль.

Версия 3: гидроксипропил-бета-циклодекстрин, замещенный по 5 точкам

Моделирование докинга дало несколько конформаций, во всех случаях связывания гостя внутри полости хозяина - как показано на фигуре 4, на которой показаны сферы атомов для хозяина и линейное представление для гостя для большей ясности.

Испытания обеспечили свободную энергию связывания -5,6 ккал/моль.

Выводы и заключение

Связывание ментола в гидроксипропил-бета-циклодекстрине можно моделировать с помощью молекулярного докинга, который устанавливает свободную энергию связывания от -5 до -6 ккал/моль.

Степень и расположение гидроксипропильных групп в НР-β-ЦД может варьироваться от молекулы к молекуле. Поэтому авторы изобретения проверили процесс докинга, используя ряд возможных структур, чтобы гарантировать чувствительность измерения к колебаниям конструкции. Были оценены две версии гидроксипропилпроизводного циклодекстрина, которые дали в целом аналогичные результаты. Также был оценен нефункционализированный вариант, который дал достаточно похожие результаты.

Различные модификации и вариации настоящего изобретения будут понятны специалистам в данной области без отклонения от объема и сущности изобретения. Хотя изобретение было описано в связи с конкретными предпочтительными вариантами осуществления, следует понимать, что заявленное изобретение не должно чрезмерно ограничиваться такими конкретными вариантами осуществления. Действительно, предполагается, что различные модификации описанных способов осуществления изобретения, которые понятны специалистам в области химии или смежных областях, входят в объем следующей формулы изобретения.

Также представлены аспекты изобретения, в которых значения сферы Хансена для одного или нескольких инкапсулирующих материалов выбираются для достижения желаемой совместимости со вкусоароматическими веществами, включенными в способную образовывать аэрозоль композицию, и с никотином, если он присутствует. Как будет понятно специалисту в данной области техники, значения сфер Хансена описывают взаимодействие между вкусоароматическими веществами и

инкапсулирующим материалом. Соответствующие измерения представляют собой:

δD - мера дисперсионных сил

δP - мера полярных (диполярных) взаимодействий

δH - мера водородной связи.

5 Чем ближе эти значения для вкусоароматического вещества и растворителя (воды), тем они будут более растворимыми. Путем выбора значений сферы Хансена инкапсулирующий материал преимущественно инкапсулирует по меньшей мере один из одного или нескольких вкусоароматических веществ по сравнению с другими компонентами, такими как никотин.

10 Как будет понятно специалисту в данной области техники, совместимость инкапсулирующего материала (хозяина) и инкапсулированного вида (гость) может быть определена как «насколько они похожи». Это также можно измерить с помощью интервала параметра растворимости Хансена (HSP) (также обозначаемое как R_a в приведенном ниже уравнении) между молекулами хозяина и гостя.

$$15 \quad Ra^2 = 4(\delta D_1 - \delta D_2)^2 + (\delta P_1 - \delta P_2)^2 + (\delta H_1 - \delta H_2)^2$$

где

R_a = интервал HSP

δD = энергия дисперсионных сил между молекулами

20 δP = энергия диполярной межмолекулярной силы между молекулами

δH = энергия водородных связей между молекулами.

Затем сходство может быть определено с использованием R_a системы и радиуса взаимодействия гостевой молекулы (обозначаемого R_i), как показано ниже:

$$25 \quad RED = \frac{Ra}{Ri}$$

где

RED = относительная разность энергий системы

R_a = Расстояние HSP

R_i = R_a = Расстояние HSP

30 RED между инкапсулирующим материалом (хозяином) и водой должен быть меньше чем 1, чтобы инкапсулирующий материал (хозяин) растворился в воде. RED между вкусоароматическим веществом и водой должен быть меньше чем 1, чтобы вкусоароматическое вещество растворилось в воде; или RED между вкусоароматическим веществом и инкапсулирующим материалом (хозяином) должен быть меньше чем 1, 35 чтобы вкусоароматическое вещество было поглощено инкапсулирующим материалом (хозяином).

Дополнительные аспекты изобретения описаны в следующих пронумерованных параграфах:

1. Способная образовывать аэрозоль композиция, содержащая:

40 (i) воду

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию;

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; а также

(iv) никотин;

45 при этом (a) вода и указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1; и (b) указанное одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, и либо вода, либо указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют

относительную разность энергий (RED) менее чем 1.

2. Способная образовывать аэрозоль композиция, содержащая:

(i) воду

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат

5 инкапсулированию; а также

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов, имеющих растворимость в воде, составляющую по меньшей мере 50% растворимости в воде указанного одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; а также

10 (iv) никотин.

3. Способная образовывать аэрозоль композиция по параграфу 2, в которой (a) вода и указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1; и (b) указанное одно или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, и либо вода или
15 указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1.

4. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-3, в которой указанное одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, и вода имеют относительную разность энергий (RED) менее чем

20 1.

5. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-4, в которой указанное одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, и указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1.

25 6. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-5, в которой указанное одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, и вода имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1; и

при этом указанное одно или несколько вкусоароматических веществ, которые
30 подлежат инкапсулированию, и указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1.

7. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-6, в которой вода присутствует в количестве по меньшей мере 75 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

35 8. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-7, в которой вода присутствует в количестве по меньшей мере 90 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

9. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-8, в которой никотин присутствует в количестве не более чем 1 мас.% по отношению к
40 массе способной образовывать аэрозоль композиции.

10. Способная образовывать аэрозоль композиция по параграфу 9, в которой никотин присутствует в количестве от 0,01 до 0,6 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

11. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-10,
45 дополнительно содержащая кислоту.

12. Способная образовывать аэрозоль композиция по параграфу 11, в которой кислота выбрана из группы, состоящей из уксусной кислоты, молочной кислоты, муравьиной кислоты, лимонной кислоты, бензойной кислоты, пировиноградной кислоты,

левулиновой кислоты, янтарной кислоты, винной кислоты, сорбиновой кислоты, пропионовой кислоты, фенилуксусной кислоты и их смесей.

13. Способная образовывать аэрозоль композиция по параграфу 11 или 12, в которой кислота выбрана из группы, состоящей из лимонной кислоты, бензойной кислоты, левулиновой кислоты, сорбиновой кислоты, молочной кислоты и их смесей.

14. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 11-13, в которой кислота представляет собой по меньшей мере лимонную кислоту.

15. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 11-14, в которой общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, не превышает 1 моль-эквивалента в расчете на никотин.

16. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 11-15, в которой общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, составляет не менее, чем 0,1 мольных эквивалентов в расчете на никотин.

17. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-16, в которой указанное одно или несколько вкусоароматических веществ выбрано из группы, состоящей из (4-(пара-)метоксифенил)-2-бутанона, ванилина, γ -ундекалактона, ментона, 5-пропенилгуаэтола, ментола, пара-мента-8-тиол-3-она и их смесей.

18. Способная образовывать аэрозоль композиция по параграфу 17, в которой вкусоароматическое вещество представляет собой по меньшей мере ментол.

19. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-18, в которой указанное одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве не более чем 2 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

20. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-19, в которой указанное одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве от 0,01 до 1 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

21. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-20, в которой указанный один или несколько инкапсулирующих материалов выбран из циклодекстринов или их смесей.

22. Способная образовывать аэрозоль композиция по параграфу 21, в которой один или несколько циклодекстринов выбраны из группы, состоящей из замещенного или незамещенного (α)-циклодекстрина, замещенного или незамещенного (β)-циклодекстрина, замещенного или незамещенного (γ)-циклодекстрина, и их смесей.

23. Способная образовывать аэрозоль композиция согласно 21 или 22, в которой один или несколько циклодекстринов представляют собой по меньшей мере замещенный (β)-циклодекстрин.

24. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-23, в которой указанный один или несколько инкапсулирующих материалов присутствуют в общем количестве не более 12 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

25. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-24, в которой указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют растворимость в воде, составляющую по меньшей мере 70% растворимости в воде указанного одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию.

26. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-25, в которой указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют

растворимость в воде, составляющую по меньшей мере 90% растворимости в воде указанного одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию.

27. Способная образовывать аэрозоль композиция по любому из параграфов 1-25, в которой, если способная образовывать аэрозоль композиция содержит один или несколько циклодекстринов, то способная образовывать аэрозоль композиция не содержит вкусоароматических веществ, которые могут быть инкапсулированы одним или несколькими циклодекстринами.

28. Способ формирования аэрозоля, при этом способ включает перевод в аэрозольное состояние способной образовывать аэрозоль композиции, содержащей

(i) воду

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, и

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов;

при этом (a) вода и указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1; и (b) указанное одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, и либо вода, либо указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1.

29. Способ по параграфу 28, в котором способная образовывать аэрозоль композиция представляет собой композицию, как определено в любом из параграфов 2-26.

30. Способ согласно параграфу 28 или 29, в котором аэрозоль формируют с помощью процесса, выполняемого при температуре ниже 50°C.

31. Способ согласно параграфам 28, 29 или 30, в котором аэрозоль формируют путем приложения ультразвуковой энергии к превращенной в аэрозоль композиции.

32. Заключение в контейнере способная образовывать аэрозоль композиция, содержащая:

(a) контейнер; и

(b) способную образовывать аэрозоль композицию, содержащую:

(i) воду;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию;

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; а также

(iv) никотин;

при этом (a) вода и указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1; и (b) указанное одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, и либо вода, либо указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1.

33. Заключение в контейнере способная образовывать аэрозоль композиция по параграфу 32, в которой контейнер выполнен с возможностью взаимодействия с электронной системой обеспечения аэрозоля.

34. Электронная система обеспечения аэрозоля, содержащая:

(a) генератор аэрозоля, предназначенный для перевода в аэрозольное состояние композиции, предназначенной для целей вдыхания пользователем электронной системы обеспечения аэрозоля;

(b) источник электропитания, содержащий гальванический элемент или батарею, предназначенный для снабжения генератора аэрозоля энергией; и

(с) способную образовывать аэрозоль композицию, содержащую:

(i) воду;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; и

5 (iii) один или несколько инкапсулирующих материалов;

при этом (а) вода и указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1; и (b) указанное одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, и либо вода, либо указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют

10 относительную разность энергий (RED) менее чем 1.

35. Способ улучшения органолептических свойств превращенной в аэрозоль композиции, при этом способ включает стадии перевода в аэрозольное состояние способной образовывать аэрозоль композиции, содержащей:

(i) воду;

15 (ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию;

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов;

при этом (а) вода и указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1; и (b) указанное одно или

20 несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию, и либо вода, либо указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют относительную разность энергий (RED) менее чем 1.

(57) Формула изобретения

25 1. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля, содержащая:

(i) воду, присутствующую в количестве по меньшей мере 70 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат

30 инкапсулированию;

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; а также

(iv) никотин в количестве не более чем 6 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции;

в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими

35 вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

2. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля, содержащая:

40 (i) воду, присутствующую в количестве по меньшей мере 70 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию;

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов, имеющих растворимость в воде, составляющую по меньшей мере 50% растворимости в воде указанного одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию;

и

(iv) никотин в количестве не более чем 6 мас.% по отношению к массе способной

образовывать аэрозоль композиции.

3. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по п. 2, отличающаяся тем, что в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

4. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 1-3, отличающаяся тем, что в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -2 до -8 ккал/моль.

5. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 1-4, отличающаяся тем, что в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -3 до -8 ккал/моль.

6. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 1-5, отличающаяся тем, что в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -4 до -7 ккал/моль.

7. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 1-6, отличающаяся тем, что вода присутствует в количестве по меньшей мере 75 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

8. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 1-7, отличающаяся тем, что вода присутствует в количестве по меньшей мере 90 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

9. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 1-8, отличающаяся тем, что никотин присутствует в количестве не более чем 1 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

10. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по п. 9, отличающаяся тем, что никотин присутствует в количестве от 0,01 до 0,6 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

11. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 1-10, отличающаяся тем, что дополнительно содержит по меньшей мере одну кислоту.

12. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по п. 11, отличающаяся тем, что кислота выбрана из группы, состоящей из уксусной кислоты, молочной кислоты, муравьиной кислоты, лимонной кислоты, бензойной кислоты, пировиноградной кислоты, леволиновой кислоты, янтарной кислоты, винной кислоты, сорбиновой кислоты, пропионовой кислоты, фенилуксусной кислоты и их смесей.

13. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по п. 11 или 12, отличающаяся тем, что кислота выбрана из группы, состоящей из лимонной кислоты, бензойной кислоты, леволиновой кислоты, сорбиновой кислоты,

молочной кислоты и их смесей.

14. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 11-13, отличающаяся тем, что кислота представляет собой по меньшей мере лимонную кислоту.

5 15. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 11-14, отличающаяся тем, что общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, не превышает 1 моль-эквивалента в расчете на никотин.

16. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 11-15, отличающаяся тем, что общее содержание кислоты, присутствующей в композиции, составляет не менее чем 0,1 мольных эквивалентов в
10 расчете на никотин.

17. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 1-16, отличающаяся тем, что указанное одно или несколько вкусоароматических веществ выбрано из группы, состоящей из (4-(пара-)метоксифенил)
15 -2-бутанона, ванилина, γ -ундекалактона, ментона, 5-пропенилгуаэтола, ментола, парамента-8-тиол-3-она и их смесей.

18. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по п. 17, отличающаяся тем, что вкусоароматическое вещество представляет собой по меньшей мере ментол.

20 19. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 1-18, отличающаяся тем, что указанное одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве не более чем 2 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

20. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения
25 аэрозоля по любому из пп. 1-19, отличающаяся тем, что указанное одно или несколько вкусоароматических веществ присутствуют в общем количестве от 0,01 до 1 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

21. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из пп. 1-20, отличающаяся тем, что указанный один или несколько
30 инкапсулирующих материалов выбраны из циклодекстринов или их смеси.

22. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по п. 21, отличающаяся тем, что один или несколько циклодекстринов выбраны из группы, состоящей из замещенного или незамещенного (α)-циклодекстрина, замещенного или незамещенного (β)-циклодекстрина, замещенного или незамещенного
35 (γ)-циклодекстрина, и их смесей.

23. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по любому из п. 21 или 22, отличающаяся тем, что один или несколько циклодекстринов представляют собой по меньшей мере замещенный (β)-циклодекстрин.

24. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения
40 аэрозоля по любому из пп. 1-23, отличающаяся тем, что указанный один или несколько инкапсулирующих материалов присутствуют в общем количестве не более 12 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции.

25. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозолям по любому из пп. 1-24, отличающаяся тем, что указанный один или несколько
45 инкапсулирующих материалов имеют растворимость в воде, составляющую по меньшей мере 70% растворимости в воде указанного одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию.

26. Способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения

аэрозоля по любому из пп. 1-25, отличающаяся тем, что указанный один или несколько инкапсулирующих материалов имеют растворимость в воде, составляющую по меньшей мере 90% растворимости в воде указанного одного или нескольких вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию.

5 27. Способ формирования аэрозоля, при этом способ включает перевод в аэрозольное состояние способной образовывать аэрозоль композиции для устройства обеспечения аэрозоля, содержащей

(i) воду, присутствующую в количестве по меньшей мере 70 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции;

10 (ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию;

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; и

(iv) никотин в количестве не более чем 6 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции,

15 в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

28. Способ по п. 27, отличающийся тем, что способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля представляет собой композицию, как определено в любом из пп. 2-26.

29. Способ по п. 27 или 28, отличающийся тем, что аэрозоль формируют с помощью процесса, выполняемого при температуре ниже 50°C.

30. Способ по пп. 27, 28 или 29, отличающийся тем, что аэрозоль формируют путем приложения ультразвуковой энергии к превращенной в аэрозоль композиции.

25 31. Заключенная в контейнере способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля, содержащая:

(i) воду, присутствующую в количестве по меньшей мере 70 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции;

30 (ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; и

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; а также

(iv) никотин в количестве не более чем 6 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции;

35 в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

32. Заключенная в контейнере способная образовывать аэрозоль композиция для устройства обеспечения аэрозоля по п. 31, отличающаяся тем, что контейнер выполнен с возможностью взаимодействия с электронной системой обеспечения аэрозоля.

33. Электронная система обеспечения аэрозоля, предназначенная для выработки аэрозоля из способной образовывать аэрозоль композиции, причем указанная способная образовывать аэрозоль композиция содержит:

45 (i) воду, присутствующую в количестве по меньшей мере 70 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции;

(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию; и

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; и

(iv) никотин в количестве не более чем 6 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции;

в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль,

причем указанная система содержит:

(а) генератор аэрозоля, предназначенный для перевода в аэрозольное состояние указанной способной образовывать аэрозоль композиции для целей вдыхания пользователем электронной системы обеспечения аэрозоля;

(б) источник электропитания, содержащий гальванический элемент или батарею, предназначенный для снабжения генератора аэрозоля энергией.

34. Способ улучшения органолептических свойств превращенной в аэрозоль композиции, при этом способ включает стадии перевода в аэрозольное состояние способной образовывать аэрозоль композиции для устройства обеспечения аэрозоля, содержащей:

(i) воду, присутствующую в количестве по меньшей мере 70 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции;

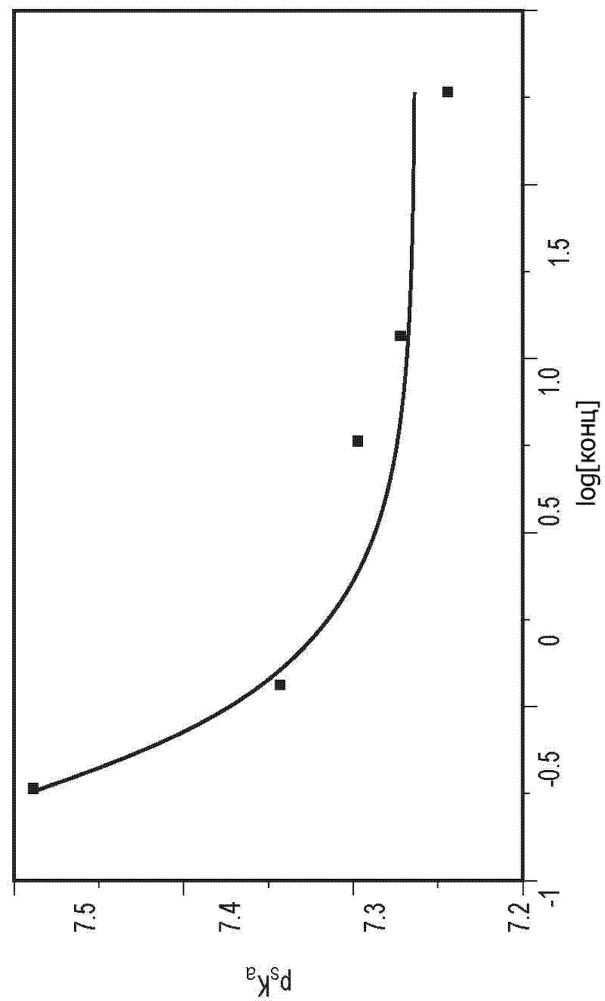
(ii) одно или несколько вкусоароматических веществ, которые подлежат инкапсулированию;

(iii) один или несколько инкапсулирующих материалов; и

(iv) никотин в количестве не более чем 6 мас.% по отношению к массе способной образовывать аэрозоль композиции;

в которой в присутствии воды энергия связывания указанного одного или нескольких инкапсулирующих материалов с указанным одним или несколькими вкусоароматическими веществами, которые подлежат инкапсулированию, составляет от -0,5 до -8 ккал/моль.

1



Фиг. 1

2

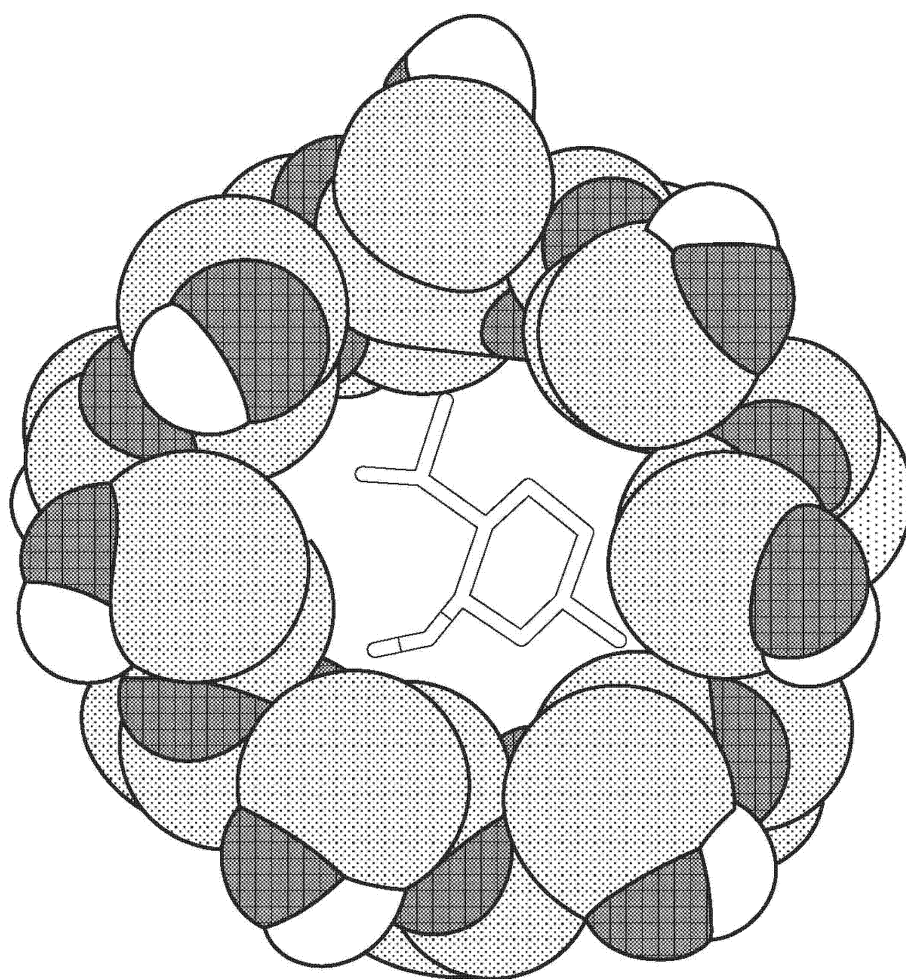


Схема докинга незамещенного бета-ЦД

Фиг. 2

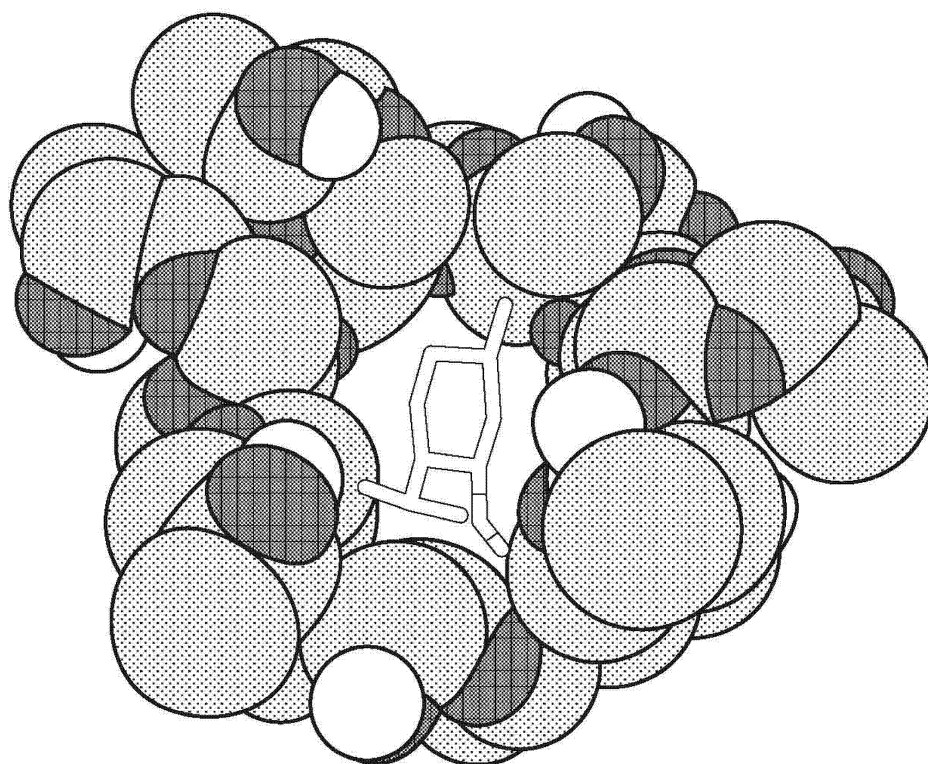


Схема докинга для НР-бета-ЦД с замещением на 7 участках

Фиг. 3

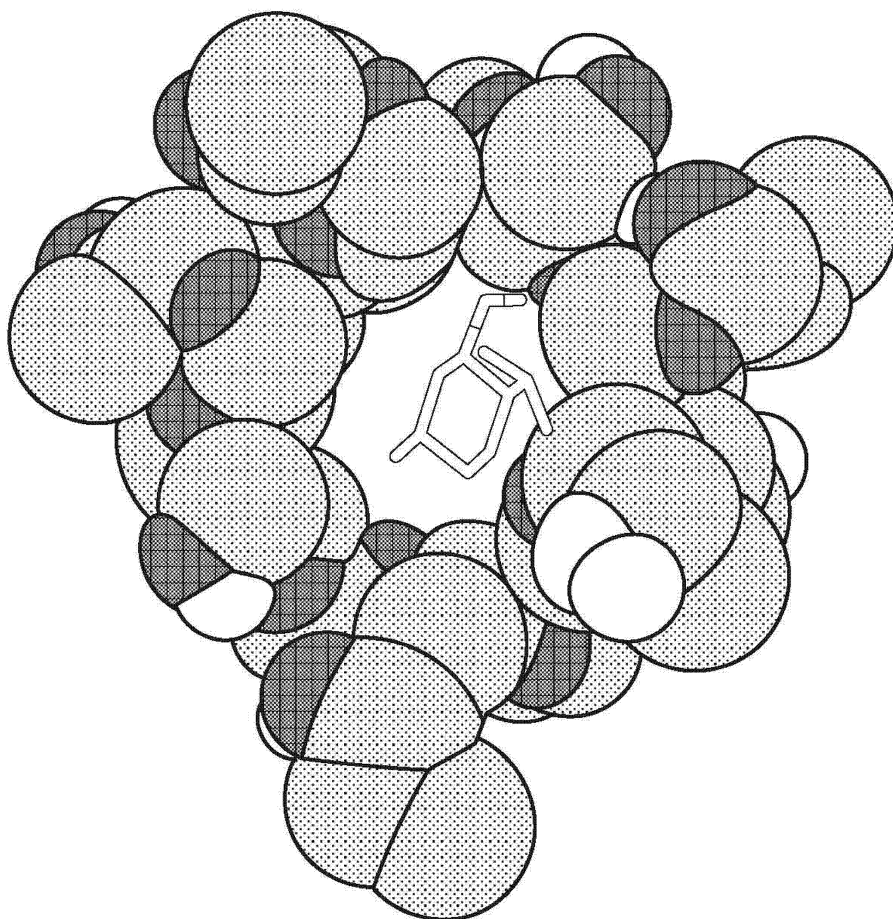


Схема докинга для НР-бета-ЦД с замещением на 5 участках

Фиг. 4