

CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y ESPECTROSCÓPICA DE NUEVOS ACESULFAMATOS

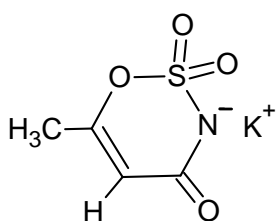
Enrique J. Baran^a, Beatriz S. Parajón-Costa^a, Gustavo A. Echeverría^b
y Oscar E. Piro^b

^a Centro de Química Inorgánica (CEQUINOR, CONICET/UNLP), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, C. Correo 962, 1900-La Plata, Argentina.

(E-mail: baran@quimica.unlp.edu.ar)

^b Departamento de Física e Instituto IFLP (CONICET), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, 1900-La Plata, Argentina.

El acesulfamato-K, la sal de potasio del 6-metil-1,2,3-oxatiazina-4(3H)-ona-2,2-dióxido (**ver esquema**, abajo), es uno de los edulcorantes artificiales más utilizados en la actualidad y sus propiedades biológicas y químicas han sido ampliamente investigadas [1].



Desde el punto de vista químico y estructural el anión acesulfamato presenta fuertes analogías con el sacarinato, cuya química de coordinación ha sido intensivamente explorada durante los últimos años (para una revisión reciente ver p. ej. [2]).

En el marco de un plan de trabajo destinado a la síntesis y caracterización de nuevas sales y complejos del anión acesulfamato hemos logrado obtener cuatro nuevas sales simples de cationes monovalentes (NH_4^+ , Rb^+ , Cs^+ y Tl^+). Para la obtención de las mismas se puso a punto una técnica general de síntesis, consistente en la reacción de soluciones acuosas del ácido acesulfámico (obtenido a partir de la sal de potasio [3]) con los respectivos carbonatos, M_2CO_3 .

La estructura cristalina de estas sales fue determinada por difracción de rayos X en monocristales, resultando que los acesulfamatos de Rb, Cs y Tl son isoestructurales con la sal de potasio [4] (G.E. $P2_1/a$ y $Z = 4$) mientras que el de NH_4^+ es diferente (G.E. $Pnma$ y $Z = 4$). Los resultados obtenidos permitieron establecer algunas interesantes correlaciones estructurales.

Las sales fueron también caracterizadas por sus espectros de IR, los que fueron analizados en base a un reciente estudio experimental y teórico de la sal de potasio [5]. Asimismo, se analizaron en detalle las peculiaridades vibracionales del catión amonio en esa red cristalina.

[1] D.G. Mayer & F.H. Kemper (Eds.), *Acesulfame-K*, Marcel Dekker, N. York, 1991.

[2] E.J. Baran & V.T. Yilmaz, *Coord. Chem. Rev.* **250**, 1980-1999 (2006).

[3] S.P. Velaga, B.P. Vangala, S. Basavoju & D. Boström, *Chem. Commun.* **40**, 3562-3564 (2010).

[4] E.F. Paulus, *Acta Crystallogr.* **B31**, 1191-1193 (1975).

[5] A.D. Popova, E.A. Velcheva, & B.A. Stamboliyska, *J. Mol. Struct.* **1009**, 23-29 (2012).