

## Solvent Effects on Protonation Constants of Gly-ASP in Aqueous Solution of Methanol

Fatemeh ZABIHI<sup>1</sup>, Farhoush KIANI<sup>2\*</sup>, Mojtaba YAGHOBI<sup>1</sup>, & Seyed Ahmad SHAHIDI<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Department of Physic,

<sup>2</sup> Department of Chemistry, Faculty of Science, Ayatollah Amoli Branch,  
Islamic Azad University, Amol, Iran

<sup>3</sup> Department of Food Science and Technology, College of Agriculture and Food Science,  
Ayatollah Amoli Branch, Islamic Azad University, Amol, Iran

**SUMMARY.** The protonation constants of GLY-ASP (glycyl aspartic acid) were determined in binary mixtures of water with methanol containing 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, and 80% (v/v) using potentiometric method at  $T = 298.15\text{K}$  and constant ionic strength ( $0.1\text{ mol/dm}^3$  sodium perchlorate). The value of  $\log_{10}K_1$ ,  $\log_{10}K_2$ , and  $\log_{10}K_3$  was correlated with the macroscopic (dielectric constant) and microscopic Kamlet-Taft parameters ( $\alpha$ ,  $\beta$  and  $\pi^*$ ) of binary mixtures. The solvent effect on the protonation constants were analyzed in the terms of the Kamlet, Abboud & Taft (KAT) parameters. In this research work, it was obtained a very good linear correlation of the protonation constants (on the logarithmic scale) versus the reciprocal of the dielectric constants of the water-methanol solvent mixtures. Dual-parameter correlation of  $\log_{10}K$  versus  $\pi^*$  (dipolarity/polarizability) and  $\beta$  (hydrogen-bond acceptor basicity) gives good results in various volume fractions of methanol and water in their mixture (water + methanol).

**RESUMEN.** Las constantes de protonación de GLY-ASP (ácido glicil-aspártico) se determinaron en mezclas binarias de agua con que contiene 0, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70 y 80% metanol (v/v) mediante potenciometría a  $T = 298.15\text{ K}$  y fuerza iónica constante (perclorato de sodio  $0,1\text{ mol/dm}^3$ ). El valor de  $\log_{10}K_1$ ,  $\log_{10}K_2$  y  $\log_{10}K_3$  se correlacionó con los parámetros macroscópicos (constante dieléctrica) y microscópicos de Kamlet-Taft ( $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\pi^*$ ) de las mezclas binarias. El efecto del disolvente sobre las constantes de protonación se analizó en los términos de los parámetros de Kamlet, Abboud & Taft (KAT). En este trabajo se obtuvo una muy buena correlación lineal de las constantes de protonación (en la escala logarítmica) frente al recíproco de las constantes dieléctricas de las mezclas de disolventes agua-metanol. La correlación de doble parámetro de  $\log_{10}K$  versus  $\pi^*$  (dipolaridad/polarización) y  $\beta$  (basicidad del aceptor de enlaces de hidrógeno) da buenos resultados en varias fracciones de volumen de metanol y agua en su mezcla (agua + metanol).

**KEY WORDS:** methanol, potentiometric, protonation constants, solvent, spectrophotometric.

\* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: farhoush\_kiani@yahoo.com