

## Theoretical Studies, Ab Initio and Density Functional Theory, on the Thermodynamic Properties of Streptozocin in Aqueous Solution

Goljahan B. SAVADKOOHI <sup>1</sup>, Ali MORSALI <sup>1</sup> & Farhoush KIANI <sup>2</sup> \*

<sup>1</sup> Department of Chemistry, Faculty of Science, Mashhad Branch,  
Islamic Azad University, Mashhad, Iran

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

**SUMMARY.** In this research article, the pK<sub>a</sub> values of streptozocin in water were determined at 25, 30, 35, 40, and 45 °C using *ab initio* and density functional theory (DFT) methods with the B3LYP 6-31+G(d) functional and basis sets and polarizable continuum solvation model (PCM) to include the effects of aqueous solvation. Some structural properties such as dihedral angle between the indicated atoms (*D*), bond lengths between the indicated atoms: (*d*), Bohr radius (*a*<sub>0</sub>), intermolecular hydrogen bond (*IHB*), and total atomic charge (*au*) were determined for streptozocin, solvated in water. Also were determined the changes in entropy ( $\Delta S$ ) and enthalpy ( $\Delta H$ ) obtained for dissociation reactions of this molecule using the pK<sub>a</sub> values at different temperatures.

**RESUMEN.** En este artículo se determinaron los valores de pK<sub>a</sub> de estreptozocina en agua a 25, 30, 35, 40 y 45 °C utilizando métodos *ab initio* y de teoría de densidad funcional (DFT) con el B3LYP 6-31 + G (d) y los conjuntos de bases y el modelo de solvatación polarizable continua (PCM) para incluir los efectos de la solvatación acuosa. Algunas propiedades estructurales como el ángulo diedro entre los átomos indicados (*D*), las longitudes de enlace entre los átomos indicados: (*d*), el radio de Bohr (*a*<sub>0</sub>), el enlace de hidrógeno intermolecular (*IHB*) y la carga atómica total (*au*) se determinaron para la estreptozocina solvatada en agua. También se determinaron los cambios en la entropía ( $\Delta S$ ) y la entalpía ( $\Delta H$ ) obtenidos para las reacciones de disociación de esta molécula utilizando los valores de pK<sub>a</sub> a diferentes temperaturas.

**KEY WORDS:** acidic dissociation constant, aqueous solution, intermolecular hydrogen bond, streptozocin.

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