

بررسی خواص اپتو الکترونی و زیستی ترکیب هیپوکسیلونول با استفاده از نظریه تابعی چگالی و داکینگ مولکولی

ملیحه آزادپور^{۱*}، حسین اصغررهنمای علی آباد^۲، میتراخیرآبادی^۳

۱- استادیار، استان سیستان و بلوچستان، ایرانشهر، دانشگاه ولایت. (M.azadparvar@velayat.ac.ir)

۲- دانشیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، ایران (rahnama@hsu.ac.ir)

۳- دانشیار و گروه زیست شناسی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، ایران (mitrakheirabadi@yahoo.com)

چکیده

این مقاله به بررسی خواص اپتو الکترونی و زیستی هیپوکسیلونول-اف می پردازد. اهمیت این دارو به دلیل فعالیت های بیولوژیکی بالقوه ای است که شامل خواص ضد ویروسی، ضد باکتریایی و ضد سرطانی می شود. محاسبات الکترونی و اپتیکی با استفاده از نظریه تابعی چگالی و روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی انجام شده است. همچنین، داکینگ مولکولی برای بررسی اثر مهارکنندگی این ترکیب بر روی پروتئازهای HIV و HTLV انجام شده است. محاسبات الکترونی نشان می دهد که هیپوکسیلون-اف یک عایق با گاف نواری غیر مستقیم حدود ۲,۰۳ الکترون ولت هست که میزان پایداری ترکیب را نشان می دهد. اوربیتال های p اتم کربن نقش فعالی در سطح فرمی دارند و در برقراری پیوند با سایر ترکیبات مشارکت دارند. این ترکیب جذب بالایی در ناحیه فوق فرابنفش دارد. همچنین نشان داده می شود پیوند بین لیگاند هیپوکسیلونول-اف با پروتئاز HTLV در انرژی پایین تری رخ می دهد. انرژی پیوند حاصل از محاسبات داکینگ با نمودار چگالی حالت نظریه تابعی چگالی همخوانی دارد.

واژه های کلیدی: HIV ، HTLV ، هیپوکسیلونول-اف، نظریه تابعی چگالی، داکینگ مولکولی، خواص الکترونی و اپتیکی

۱- مقدمه

ترکیبات قارچی به دلیل خواص دارویی متنوع خود همواره مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته اند. یکی از این ترکیبات، هیپوکسیلونول-اف ($C_{20}H_{16}O_5$) است که از قارچ Hypoxylon truncatum استخراج می شود [1]. این ترکیب به همراه سایر اعضای خانواده هیپوکسیلونول- (آ تا ای) (Hypoxylonol A-E) دارای فعالیت های بیولوژیکی بالقوه ای است که شامل خواص ضد ویروسی، ضد باکتریایی و ضد سرطانی می شود [2,3]. هیپوکسیلونول-اف به طور خاص دارای اثرات شیمی حفاظتی و محافظتی در برابر آسیب کلیوی ناشی از سیسپلاتین است [4]. همچنین، این ترکیب میتواند به عنوان یک عامل درمانی برای دیابت مورد استفاده قرار گیرد، زیرا اثر افزایش قابل توجهی بر ترشح انسولین تحریک شده توسط گلوکز دارد بدون اینکه سمی باشد [5].

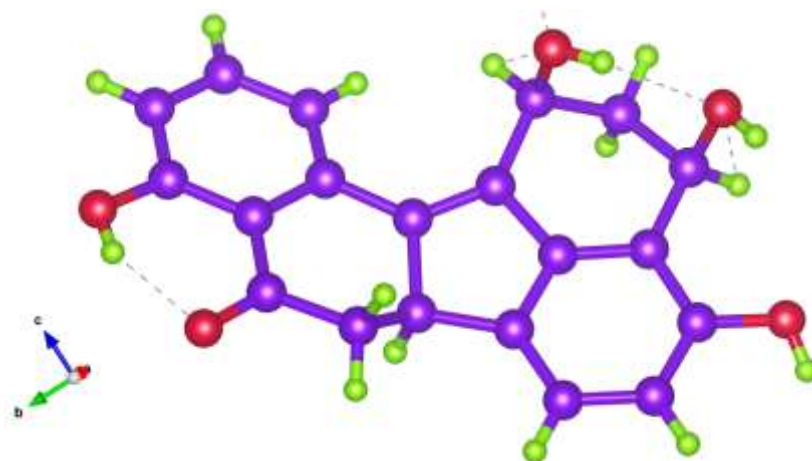
بررسی خواص فیزیکی این ترکیب دارویی شامل ساختار نوار انرژی، نمودار چگالی حالتها، نمودار جذب و رسانندگی اپتیکی اهمیت زیادی دارد. این خواص می توانند در تحلیل ترکیبات دارویی، میزان پایداری و واکنش پذیری همچنین پیش بینی تخریب دارو بر اثر شرایط محیطی، نظارت بر آلودگی محیطی و ناخالصی ها در طول فرآیند سنتز و بهبود فرآیند ساخت داروها ونحوه نگه داری و استفاده موثر از آنها، مورد استفاده قرار گیرند. همچنین با تکنیک های

اتصال مولکولی برای شناسایی نامزدهای بالقوه برای توسعه بیشتر دارو، به بررسی اثر مهارکنندگی این ترکیب بر روی پروتئازهای HIV و HTLV می پردازیم. به طور کلی، مطالعه این خواص میتواند به درک بهتر از عملکرد دارویی هیپوکسیلونول-اف و توسعه داروهای جدید کمک کند. این مقاله به بررسی خواص اپتو الکترونی و زیستی هیپوکسیلونول-اف می پردازد و اهمیت این خواص در کاربردهای دارویی و بهبود فرایندهای تولید دارو را مورد بحث قرار می دهد.

۲- جزئیات محاسبات

در این تحقیق، برای محاسبه خواص الکترونی و اپتیکی بر پایه محاسبات اصول اولیه در چارچوب نظریه تابعی چگالی از روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی همراه با تقریب شیب تعمیم یافته PBE-GGA برای محاسبه پتانسیل همبستگی-تبادلی در کد WEIN2k استفاده شده است [6,7]. پارامترهای شبکه کریستالی ترکیب هیپوکسیلونول-اف با فرمول شیمیایی $C_{20}H_{16}O_5$ و ساختار Monoclinic در گروه فضایی $P2_1$ به ترتیب برابر است با $a=5.2050\text{\AA}$ ، $\alpha=\gamma=90^\circ$ ، $c=8.0225\text{\AA}$ ، $b=18.0275\text{\AA}$ ، $\beta=92.299^\circ$ [1]. برای جداسازی حالتی ظرفیت از حالتی مغزی، انرژی مرز جدایی بین الکترونیهای ظرفیت و مغزی برابر 6 Ry و مقدار پارامتر همگرایی $RMT \times Kmax = 3$ (که RMT کوچکترین شعاع مافین تین و $Kmax$ انرژی برش برای موج تخت) و $Gmax=20$ اندازه بزرگترین بردار شبکه وارون در بسط فوریه در نظر گرفته شده است. محاسبات با در نظر گرفتن تعداد ۱۰۰ نقطه در فضای وارون برای چگالی حالتها و ۵۰۰ نقطه برای طیف های اپتیکی انجام می پذیرد. شکل ۱ یک مولکول هیپوکسیلونول-اف را نشان می دهد.

در بخش محاسبه خواص زیستی از محاسبات داکینگ مولکولی استفاده می شود. داکینگ مولکولی شامل تحلیل محاسباتی برای یافتن موقعیت بهینه اتصال لیگاند به پروتئین با استفاده از ساختار مولکولی و تعاملات واندروالسی، از جمله پیوندهای هیدروژنی خاص، از طریق یک الگوریتم امتیازدهی است. در این مطالعه، داکینگ دارو-پروتئین با استفاده از یک الگوریتم ژنتیکی سیستماتیک و لامارکی انجام می شود. برای بررسی اتصال لیگاندها و پروتئینها، اتصال لیگاند هیپوکسیلونول به پروتئاز ویروس های HIV و HTLV بررسی می شود. ترکیب هیپوکسیلونول به عنوان لیگاند به صورت فایل PDB از پایگاه داده PUBCHEM بدست آمد. علاوه بر این، ساختارهای کریستالوگرافی گیرنده ها از یک پایگاه داده پروتئین با کدهای 3LIN (PDB code of HTLV protease) و 1YT9 (PDB code of HIV protease) محاسبه شدند. عوامل مؤثر در تنظیمات نیمه طبیعی شامل دما، فشار جوی، pH و وجود آب به عنوان حلال هستند. فرآیند داکینگ با استفاده از نرم افزار Autodock 2 انجام می شود. در هر مرحله، یک جعبه مکعبی به ابعاد $100 \times 100 \times 100$ آنگستروم با مختصات اسید آمینه هدف انتخاب می شود، الگوریتم ژنتیکی (GA) برای اندازه گیری انرژی ۲۵۰،۰۰۰،۰۰۰ بار، با هر مجموعه شامل ۲۵۰ داک اجرا شده است [8]. تحلیل بر روی پیوندهای هیدروژنی و تعاملات بدون آب بین لیگاند و پروتئین انجام می شود. اطلاعات با استفاده از برنامه Pymol ترسیم شده اند [9].



شکل ۱: طرحواره مولکول هیپوکسیلون-اف

۳- بحث و بررسی نتایج

۳-۱- نتایج الکترونی و اپتیکی

خواص الکترونیکی ساختارهای بلوری دارویی توسط شکاف انرژی HOMO-LUMO توصیف می شوند، بنابراین سطح انرژی بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده (HOMO) و پایینترین اوربیتال مولکولی اشغال نشده (LUMO) معمولاً به عنوان اوربیتال های مرزی شناخته می شوند. مواد با شکاف انرژی HOMO-LUMO بالا، پایداری بیشتر و واکنش پذیری کمتری دارند. از سوی دیگر، ساختارنواری محاسبه شده ابزار مهمی برای مطالعه رسانایی الکتریکی و جذب نوری فراهم می کند. در شکل ۲a، ساختار نواری الکترونی ترکیب هیپوکسیلون-اف با تقریب PBE-GGA در اولین منطقه بریلوئن در امتداد جهت های تقارن بالا ($R \rightarrow \Gamma \rightarrow X \rightarrow M \rightarrow \Gamma$) محاسبه شده است. نشان داده شده است که حداکثر نوار ظرفیت و حداقل نوار رسانش در نقاط R و Γ قرار دارند که منجر به شکاف انرژی HOMO-LUMO غیرمستقیم می شود. در شکل ۲b، چگالی حالات کل اتمی (DOS) محاسبه شده با ساختار نواری الکترونی در تقریب PBE-GGA مقایسه شده است. مقدار شکاف نواری محاسبه شده از ساختار نواری ۲,۰۳ الکترون ولت و به طور غیر مستقیم است، که با مقدار محاسبه شده از نمودار چگالی حالات ها در توافق است. این یافته ها نشان می دهند که ترکیب هیپوکسیلون-اف یک عایق با شکاف نواری HOMO-LUMO کوچک و نزدیک به نیمه رسانا است.

با استفاده از نمودار چگالی حالات کل اتمی (DOS)، ویژگی های پیوندی و ساختار الکترونیکی ترکیب هیپوکسیلون-اف نیز به دست می آیند. همان طور که شکل نشان می دهد، انرژی فرمی در انرژی صفر تنظیم شده است و مشاهده می شود که اتم کربن بیشترین چگالی حالات را در نزدیکی سطح فرمی دارد. از آنجایی که اتم کربن دارای آرایش الکترونی $[\text{He}]2s^22p^2$ است و در بیرونی ترین لایه های الکترونی آن اوربیتال p حضور دارد، می توانیم نتیجه بگیریم سهم بزرگی از حالات نزدیک سطح فرمی مربوط به اوربیتال های p اتم کربن هستند. در انرژی هایی کمی بالاتر و

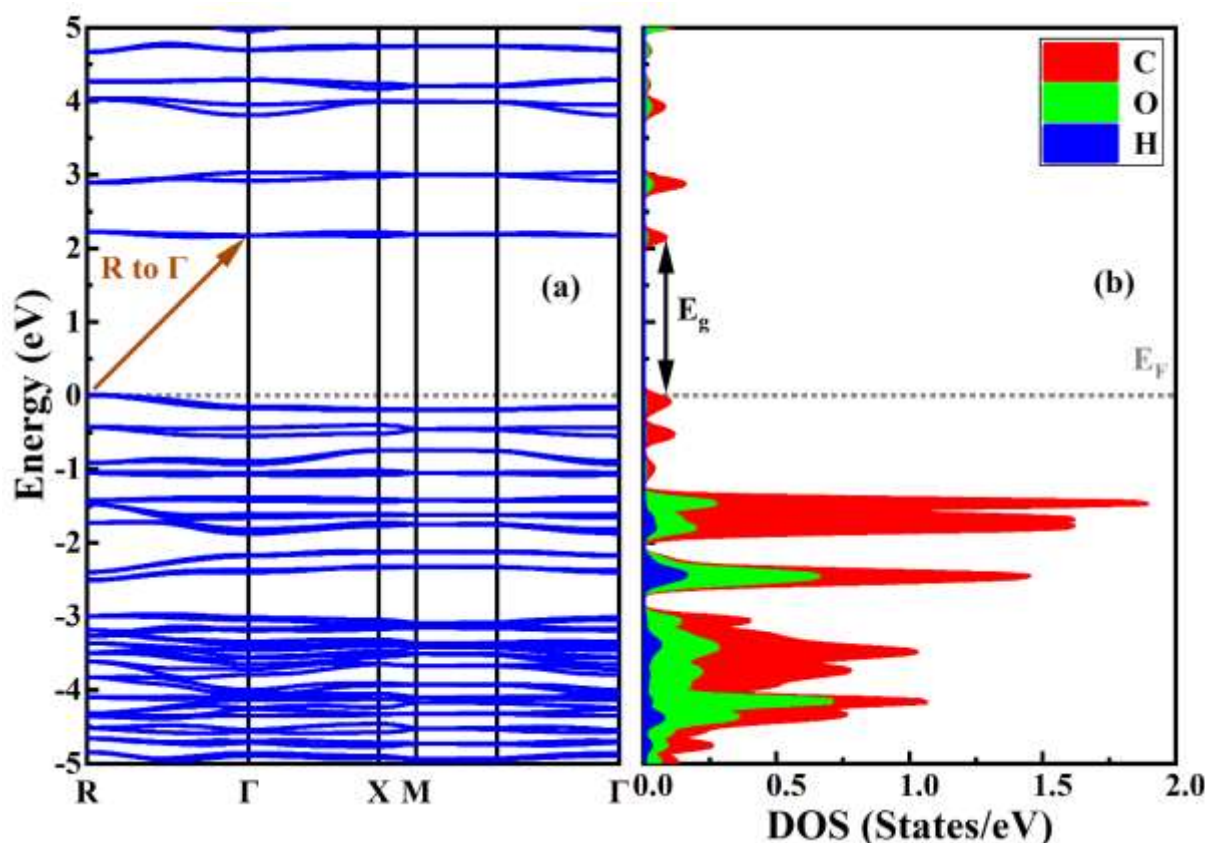
18th National and 3rd International Conference
of Iranian Biophysical chemistry

هجدهمین همایش ملی و سومین همایش
بین المللی بیوشیمی فیزیک ایران

25-26 Des, 2024, University of Hormozgan

۵-۶ دی ماه ۱۴۰۳، دانشگاه هرمزگان

پایین تر از سطح فرمی بیشترین سهم در چگالی حالات به اتم اکسیژن با آرایش الکترونی $[\text{He}]2s^22p^4$ تعلق دارد. همانند کربن، اکسیژن در بیرونی ترین لایه الکترونی خود اوربیتال p را دارد که به نقش پررنگ تر این اوربیتال اتمی در سطوح انرژی نزدیک به سطح فرمی اشاره دارد. با توجه به اختلاف سطح حالت های اتم کربن و اکسیژن در محدوده انرژی نزدیک سطح فرمی، می توان پیوند کووالانسی قوی بین اتم کربن و اکسیژن در این اتم را پیش بینی کرد. به عنوان یک نتیجه کلی اوربیتال های p اتم کربن و اکسیژن سهم عمده در شکل گیری حالت های HOMO و LUMO نزدیک به سطح فرمی دارند و این حالت ها نقش تعیین کننده ای در میزان پایداری یا واکنش پذیری این ترکیب را ایفا می کنند.



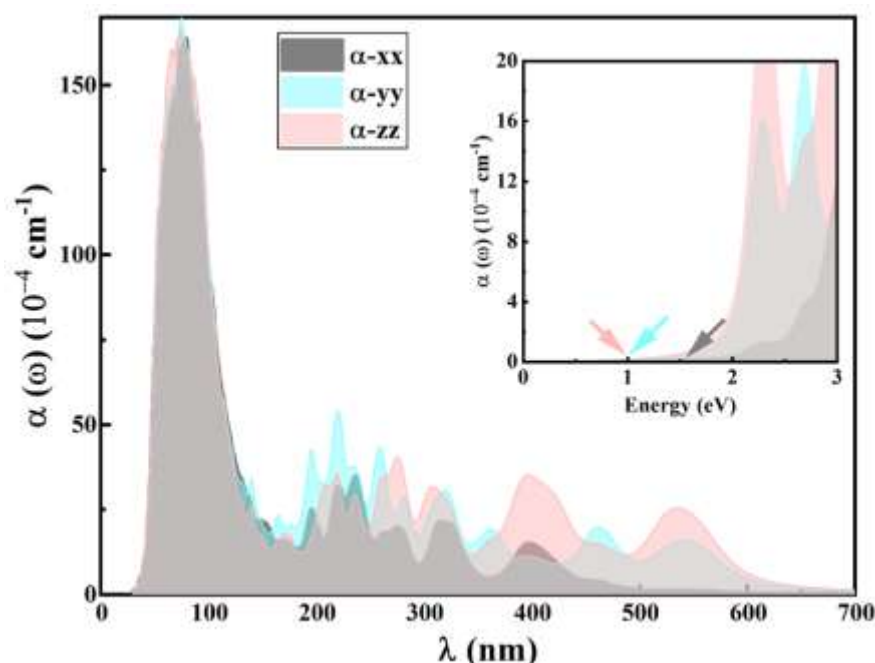
شکل ۲: ساختار نوار الکترونی (a) و نمودار چگالی حالات (b) ها

ضریب جذب $\alpha(\omega)$ برای تحلیل ساختار بلوری جامدات دارویی و اطمینان از ایمنی و کیفیت ترکیبات از طریق جذب فوتون های الکترومغناطیسی استفاده می شود. این کمیت اپتیکی توسط انتقالات الکترونی بین نوری و درون نوری از بین سطوح HOMO-LUMO یا نوار ظرفیت و رسانش توصیف می شود. طیف ضریب جذب از طریق قسمتهای

حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک که پاسخ ماده به تابش الکترومغناطیس را توصیف می کنند، به صورت زیر محاسبه می شود:

$$\alpha(\omega) = \frac{\sqrt{2}\omega}{c} \left\{ [\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)]^{\frac{1}{2}} - \varepsilon_1(\omega) \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (1)$$

طیف جذب نوری محاسبه شده بر حسب طول موج در شکل ۳ نشان داده شده است. حداکثر جذب در طول موج بین ۵۰ تا ۱۵۰ نانومتر در ناحیه فوق فرا بنفش رخ می دهد. در ناحیه فرابنفش و مرئی ضریب جذب غیرصفر مشاهده می شوند. در راستای y در ناحیه ۲۰۰ تا ۳۰۰ نانومتر جذبی حدود $50 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ رخ می دهد. مشاهده می شود که هیپوکسیلونول-اف دارای یک پیک اصلی در محدوده طول موج ۲۲۰ تا ۲۳۰ نانومتر است که به انتقالات نواری $n \rightarrow \pi^*$ مربوط می شود. پیکهای مشخصه دیگر فراتر از پیک اصلی ۲۴۰ تا ۲۵۰ نانومتر به رزونانس ساختارهای حلقه بنزن مربوط می شوند [10]. در نهایت، با تغییرات قابل توجهی کاهش می یابد و بین ۴۰۰ تا ۶۰۰ نانومتر جذبی با مقدار $35 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ در راستای z رخ می دهد.



شکل ۳: نمودار ضریب جذب بر حسب طول موج ترکیب هیپوکسیلونول اف، پنجره داخلی نمودار ضریب جذب بر حسب انرژی در سه جهت مختلف بلوری

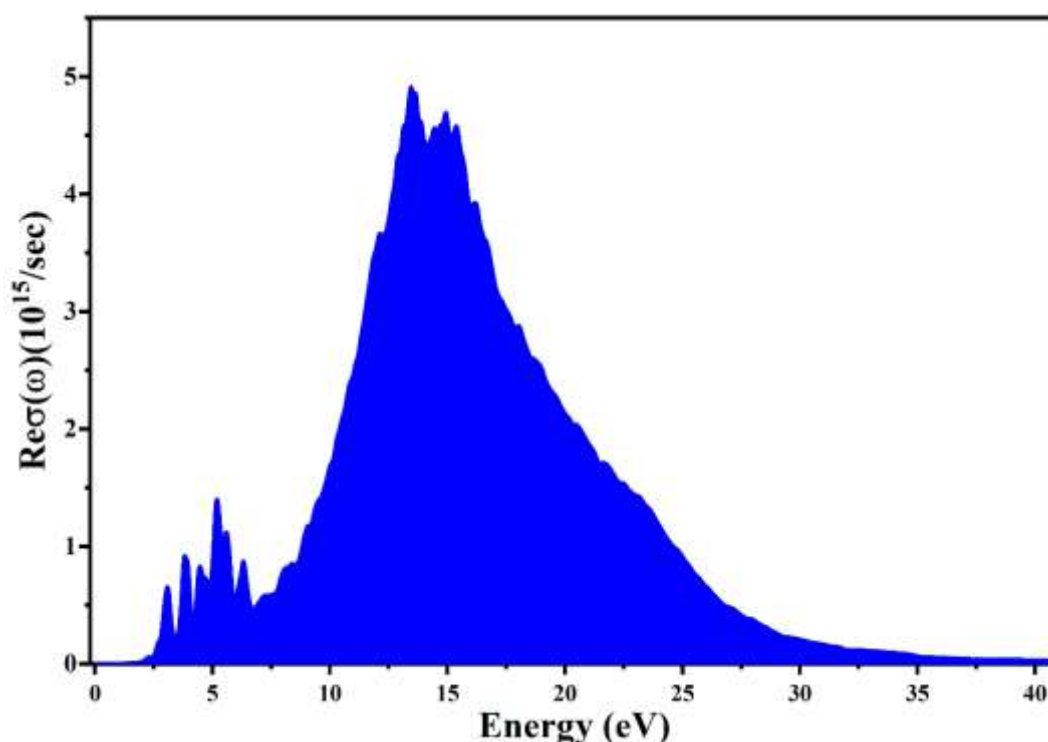
18th National and 3rd International Conference
of Iranian Biophysical chemistry

هجدهمین همایش ملی و سومین همایش
بین المللی بیوشیمی فیزیک ایران

25-26 Des, 2024, University of Hormozgan

۵-۶ دی ماه ۱۴۰۳، دانشگاه هرمزگان

در پنجره الحاقی شکل ۳ جذب محاسبه شده در سه جهت بلوری بر حسب انرژی نشان داده شده است. طیف جذب در راستای x و y ۱ الکترون ولت و در راستای z تا ۱/۵ الکترون ولت تقریباً صفر است (زیر شکاف نوری) و سپس در انرژیهای پایین به سرعت افزایش می یابند. مقدار پیش بینی شده برای شکاف نوری (حدود ۱,۵ تا ۲ الکترون ولت) در توافق خوبی با اندازه شکاف نواری حاصله از نمودار ساختار نواری است. شکل ۴ رسانایی نوری (وابسته به فرکانس) را نشان می دهد. تغییرات فرکانس با انرژی ۰ تا ۴۰ الکترون ولت توصیف شده است.



شکل ۴: نمودار رسانندگی نوری در راستای x

رسانایی نوری ماده تا نزدیک ۲ الکترون ولت صفر است سپس با افزایش انرژی در ناحیه مرئی و فرابنفش به حداکثر مقدار ۱,۵ ($10^{15}/sec$) می رسد. بعد از آن در ناحیه فوق فرابنفش رسانایی نوری به حداکثر مقدار خود می رسد. پس از آن با افزایش انرژی به سرعت کاهش می یابد؛ در محدوده انرژی بالاتر، ثابت می ماند و نشان می دهد که ماده با فوتونهای تابشی تعامل ندارد. این نتایج با طیف جذب که حداکثر جذبی در ناحیه فوق فرابنفش دارد هم خوانی دارد.

18th National and 3rd International Conference
of Iranian Biophysical chemistry

هجدهمین همایش ملی و سومین همایش
بین المللی بیوشیمی فیزیک ایران

25-26 Des, 2024, University of Hormozgan

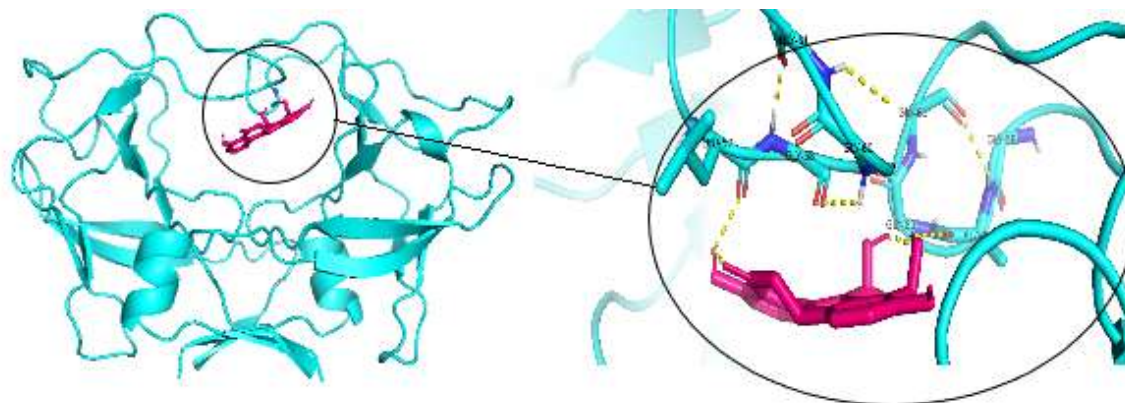
۵-۶ دی ماه ۱۴۰۳، دانشگاه هرمزگان

۲-۳- نتایج زیستی

آنزیم های پروتئاز ویروس HTLV و HIV جزء مهم ترین هدفهای آنزیمی برای اکتساب مهار کننده های جدید جهت حرکت به سمت کاهش و جلوگیری از رشد این ویروس ها در بدن انسان می باشند [11]. هر دوی این آنزیم ها از نوع آسپارتات پروتئازها هستند و دارای ۲۸٪ تشابه در ساختار اول می باشند و همچنین آنها دارای یک اسید آمینه آسپارتات حفظ شده به عنوان مهم ترین آمینو اسید در جایگاه فعال خود می باشند. در اتصال به سوبسترا نقش مهمی را ایفا می نماید. تشابه این دو پروتئین در توالی جایگاه فعال آنزیمی شان در حدود ۴۵٪ می باشد که مویذ نزدیکی عملکردی این دو آنزیم به هم است [12]. بر اساس نتایج آورده شده در جدول-۱، اتصال لیگاند هیپوکسیلونول-اف به آنزیم پروتئاز HTLV با سطح انرژی پایین تر و تمایل مهاری بالاتری انجام می شود همچنین جایگاه اتصال لیگاند هیپوکسیلونول-اف به آنزیم پروتئاز HTLV به جایگاه Flap (اسید آمینه های ۵۰ تا ۶۰) که جایگاه مهمی در اتصال سوبسترا به این آنزیم می باشد (شکل ۵). با توجه به جایگاه اتصال و میزان انرژی اتصال در جدول -۱ برای هر دو آنزیم، می توان این چنین نتیجه گرفت که متابولیت قارچی هیپوکسیلونول بالقوه قابلیت مهار HTLV پروتئاز را دارد و برای تایید نقش مهاری آن نیازمند تحقیقات بیشتر می باشد.

جدول ۱: نتایج داکینگ بین ترکیبات و پروتئاز HTLV و HIV.

Name	Run	Cluster	Inhibition Constant Ki (μM)	Binding energy EB (kcal/mol)	Binding energy EB (eV)	Amino Acids
هیپوکسیلونول						
-HTLV protease	124	35	6.95	-7.07	-0.31	LEU57 HIS66
هیپوکسیلونول						
-HIV protease	132	71	61.43	-5.75	-0.25	GLN7 ARG8



شکل ۵: تصویر سه بعدی پروتئاز HTLV با مولکول هیپوکسیلونول-اف

۷- نتیجه گیری

مطالعه خواص اپتو الکترونی و زیستی هیپوکسیلونول-اف نشان می دهد که این ترکیب دارای پتانسیل بالایی برای استفاده در کاربردهای دارویی است. نتایج محاسبات الکترونی و اپتیکی نشان می دهد که هیپوکسیلونول-اف دارای شکاف انرژی HOMO-LUMO حدود ۲,۰۳ الکترون ولت است که نقش مهمی در پایداری و واکنش پذیری مناسب آن ایفا می کند. همچنین، نتایج داکینگ مولکولی نشان می دهد که این ترکیب می تواند به عنوان یک مهارکننده بالقوه برای پروتئازهای HIV و HTLV عمل کند. اتصال لیگاند هیپوکسیلونول-اف به پروتئاز HTLV در انرژی پایین تری رخ می دهد و بدین سبب اتصال بهتری برقرار می شود. این نتایج با نتایج حاصل از مطالعه نظریه تابعی چگالی همخوانی دارد زیرا در نمودار DOS در این سطح انرژی حالت های الکترونی فعال (اوربیتال های p اتم کربن) برای شرکت در پیوند حضور دارند. این یافته ها نشان می دهد که هیپوکسیلونول F میتواند به عنوان مهارکننده جدید مورد استفاده قرار گیرد.

۸- قدردانی

این کار با حمایت گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ولایت، ایرانشهر، ایران انجام شده است.

مراجع

- [1] Fukai M, Tsukada M, Miki K, Suzuki T, Sugita T, Kinoshita K, Takahashi K, Shiro M, Koyama K. Hypoxylonols C-F, Benzo [j] fluoranthenes from Hypoxylon truncatum. Journal of Natural Products. 2012 Jan 27;75(1):22-5.
- [2] Koyama K, Kuramochi D, Kinoshita K, Takahashi K. Hypoxylonols A and B, Novel Reduced Benzo [j] fluoranthene Derivatives from the Mushroom Hypoxylon t runcatum. Journal of natural products. 2002 Oct 25;65(10):1489-90.
- [3] Hridoy M, Gorapi MZ, Noor S, Chowdhury NS, Rahman MM, Muscari I, Masia F, Adorisio S, Delfino DV, Mazid MA. Putative anticancer compounds from plant-derived endophytic fungi: a review. Molecules. 2022 Jan 4;27(1):296.

18th National and 3rd International Conference
of Iranian Biophysical chemistry

هجدهمین همایش ملی و سومین همایش
بین المللی بیوشیمی فیزیک ایران

25-26 Des, 2024, University of Hormozgan

۵-۶ دی ماه ۱۴۰۳، دانشگاه هرمزگان

- [4] Hwang BS, Lee D, Choi P, Kim KS, Choi SJ, Song BG, Kim T, Song JH, Kang KS, Ham J. Renoprotective effects of hypoxylonol C and F isolated from hypoxylon truncatum against cisplatin-induced cytotoxicity in LLC-PK1 cells. International Journal of Molecular Sciences. 2018 Mar 22;19(4):948.
- [5] Lee D, Hwang BS, Choi P, Kim T, Kim Y, Song BG, Yamabe N, Hwang GS, Kang KS, Ham J. Hypoxylonol F isolated from Annulohypoxylon annulatum improves insulin secretion by regulating pancreatic β -cell metabolism. Biomolecules. 2019 Aug 2;9(8):335.
- [6] Blaha, P., et al., wien2k. An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties, 2001. 60: p. 1–302.
- [7] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, Phys. Rev. Lett. 77 (18) (1996) 3865.
- [8] Atilgan E, Hu J (2011) Improving protein docking using sustainable genetic algorithms. Int J Compu Inoform Sys Ind Manag App 3:248–255. <https://cse.sc.edu/~jianjunh/paper/autodockx.pdf>.
- [9] DeLano WL (2002) The PyMOL user's manual. DeLano Scientific, San Carlos, CA, p 452.
- [10] Aliabad HR, Mahdavi B, Azadparvar M, Golestani R, Choopani Z. DFT study of sertraline hydrochloride antidepressant drug. Journal of molecular modeling. 2023 May;29(5):144.
- [11] Hizi, A. and E. Herzig, *dUTPase: the frequently overlooked enzyme encoded by many retroviruses*. Retrovirology, 2015. 12(1): p. 70.
- [12] Tadashi Satoh, Mi Li, Jeffrey, Tri Nguyen, Yoshiaki Kiso, Alla Gustchina, Alexander Wlodawer. Crystal Structures of Inhibitor Complexes of Human T-Cell Leukemia Virus (HTLV-1) Protease. JMB. 2010. Volume 401, Issue 4, Pages 626-641].

Comparison of Bio-Optical Properties of Hypoxylonol Compound Using Density Functional Theory and Molecular Docking

Maliheh Azadparvar ^{1*}, H.A. Rahnamaye Aliabad², M. Kheirabadi³

1. Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, University of Velayat, Iranshahr, Sistan-Baluchestan (M.azadparvar@velayat.ac.ir)
2. Associate Professor, Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran (rahnama@hsu.ac.ir)
3. Associate Professor, Department of Biology, Faculty of Basic Sciences, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran (mitrakheirabadi@yahoo.com)

Abstract

This article investigates the optoelectronic and biological properties of Hypoxylonol-F. The importance of this drug lies in its potential biological activities, which include antiviral, antibacterial, and anticancer properties. Electronic and optical calculations were performed using Density Functional Theory and the Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave method. Additionally, molecular docking was conducted to investigate the inhibitory effect of this compound on HIV and HTLV proteases. Electronic calculations show that Hypoxylonol-F is an insulator with an indirect band gap of about 2.03 electron volts, indicating the stability of the compound. The p orbitals of carbon atoms play an active role at the Fermi level and participate in bonding with other compounds. This compound exhibits high absorption in the Extreme ultraviolet region. It is also shown that the binding between the Hypoxylonol-F ligand and HTLV protease occurs at a lower energy. The binding energy obtained from docking calculations is consistent with the Density Functional Theory density of states diagram.

Key words: HIV, HTLV, Hypoxylonol-F, Density Functional Theory, Molecular Docking, Electronic and Optical Properties