

**Antonino Lauria**  
**Curriculum Vitae**

Il Prof. Antonino Lauria è nato a ~~Palermo il 22/10/1969~~, si è laureato in Chimica il 23/12/1994 con voti 110/110 e lode presentando la tesi sperimentale: "Cicloaddizioni 1,3-dipolari in serie eterociclica: Pirazine e dipoli nitriliminici" relatori Prof. G. Cusmano e Prof. G. Macaluso.

Sino al 20/03/1995 ha prestato servizio volontario presso il dipartimento di Chimica Organica della Facoltà di Scienze di Palermo.

- Dal 21 Giugno 1996 al 20 Giugno 1999 è stato ricercatore del settore scientifico disciplinare C07X-Chimica Farmaceutica (SSD CHIM/08-Chimica Farmaceutica) presso la Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Palermo.
- Dal 21 Giugno 1999 al 6 aprile 2006 è stato ricercatore confermato del settore scientifico disciplinare C07X-Chimica Farmaceutica (SSD CHIM/08-Chimica Farmaceutica) presso la Facoltà di Farmacia dell'Università degli Studi di Palermo.
- Da Agosto 2003 a Marzo 2004 ha lavorato presso il Department of Organic Chemistry presso la University of Florida (Gainesville - USA) diretto dal Prof. Alan R. Katritzky.
- In data 24 gennaio 2006 ha conseguito l'idoneità a professore associato presso l'Università di Pisa. Ricopre ad oggi come compito istituzionale il corso di "Metodologie speciali in analisi farmaceutica" per il corso di laurea in chimica e tecnologia farmaceutiche.
- Dal 7 aprile 2006 a oggi è professore associato presso il Dipartimento STEBICEF della Università degli studi di Palermo per il settore disciplinare CHIM/08-Chimica Farmaceutica.
- Dal 20 maggio al 20 giugno 2009 ha lavorato presso il National Cancer Institute di Frederick (USA), nell'ambito della cooperazione internazionale tra l'Università di Palermo e l' NCI di Frederick (MD-USA).
- Ha fatto parte delle commissioni di esami di profitto per i seguenti insegnamenti: Analisi dei Medicinali (CTF), Analisi dei Medicinali I (Farmacia), Analisi dei Medicinali II (Farmacia), Analisi dei Farmaci I e II (CTF), Chimica Farmaceutica e Tossicologia I (Farmacia e CTF), Chimica Farmaceutica e Tossicologica II e III (CTF).
- E' stato relatore di oltre 80 tesi sperimentali di laurea ed ha fatto parte delle commissioni di esami di laurea per il corso di laurea in CTF e Farmacia.

- E' docente guida per tesi di dottorato di ricerca in scienze farmaceutiche.
- E' stato tutor di assegno di ricerca dal titolo "Strutture eterocicliche come "Lead compounds" nella progettazione e sintesi di nuovi inibitori dei processi carcinogenici".
- Negli A.A. 2001/02 e 2005/06 ha svolto per supplenza il corso di Metodologie Speciali in Analisi Farmaceutica per il Corso di Laurea Specialistica in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.
- Nell' Anno Accademico 2002/03 ha svolto per supplenza il corso di Analisi dei Medicinali per il Corso di Laurea Specialistica in Chimica e Tecnologia.
- Negli A.A. 2002/03 e 2003/04 ha svolto per supplenza il corso di Laboratorio di Preparazioni Estrattive e Sintetiche di Farmaci e Analisi dei Farmaci Avanzata per il Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche (NO).
- Dall' A.A. 2002/03 al 2008/09 ha svolto un modulo del corso di "Analisi Chimico-Tossicologica" per il III anno della scuola di Specializzazione in Farmacia Ospedaliera.
- Nell'Anno Accademico 2004/05 ha svolto per supplenza il corso di Analisi dei Medicinali II per il Corso di Laurea Specialistica in Farmacia.
- Dall' A.A. 2005/06 al 2008/09 ha svolto per supplenza il corso di Progettazione e sintesi di farmaci per il Corso di Laurea Specialistica in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.
- Dall' A.A. 2006/07 ad oggi è docente di Metodologie Speciali in Analisi Farmaceutica per il Corso di Laurea Magistrale in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.
- Dal 2018 ad oggi è direttore della Scuola di Specializzazione in Farmacia Ospedaliera della Università degli Studi di Palermo.

### **Attività di ricerca**

La sua carriera scientifica inizia nel 1996 come ricercatore di chimica farmaceutica presso l'Università degli Studi di Palermo. Nei primi anni ha lavorato alla sintesi di composti eterociclici con attività antiproliferativa. Dopo l'esperienza negli USA, dove ha lavorato nel gruppo di ricerca del Prof A.R. Katritzky, i suoi interessi si sono orientati alla modellistica molecolare. Da allora, la sua attività si è dedicata principalmente alla progettazione, sintesi e valutazione biologica di nuovi composti eterociclici come modulatori di pathway carcinogenici. Ad oggi è coautore oltre 100 articoli pubblicati su riviste internazionali ISI.

**Organizzazione o partecipazione come relatore a convegni di carattere scientifico nazionali e internazionali.**

- Comitato organizzatore: 20th International Congress of Heterocyclic Chemistry (20ICHC) Palermo 31 Luglio – 5 Agosto, 2005.
- Comitato organizzatore: Convegno Congiunto delle Sezioni Calabria e Sicilia. Palermo 4-5 dicembre 2006.
- Plenary: La chemiometria ed il molecular modeling in ausilio alla scoperta ed all'ottimizzazione di lead compounds. IV Convegno congiunto delle Sezioni Sicilia e Calabria della Società Chimica Italiana, 1-2 dicembre 2008, Arcavacata di Rende (CZ).
- Comitato organizzatore: 6th Meeting of the European Network of Doctoral Studies in Pharmaceutical Sciences. Palermo 16-18 Novembre 2009.
- Invited lecture: Progettazione di farmaci nell'era informatica. UNISTEM DAY, Palermo 17 marzo 2017.

**Direzione o partecipazione alle attività di un gruppo di ricerca caratterizzato da collaborazioni a livello nazionale o internazionale**

- Partecipante al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 1997 dal titolo "ETEROCICLI AZOTATI POLICONDENSATI A POTENZIALE ATTIVITA' BIOLOGICA", prot. 9703028183\_021, responsabile scientifico Prof. Enrico Aiello, Università di Palermo, dal 15-02-1998 al 14-02-2000.
- Partecipante al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 2002 dal titolo "SISTEMI AZOLICI AD ATTIVITA' ANTINEOPLASTICA", prot. 2002033121\_008, responsabile scientifico Prof. Girolamo Cirrincione, Università di Palermo, dal 16-12-2002 al 16-12-2004.
- Partecipante al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 2004 dal titolo "SISTEMI AZOLICI AD ATTIVITA' ANTINEOPLASTICA", prot. 2004030405\_003, responsabile scientifico Prof. Girolamo Cirrincione, Università di Palermo, dal 30-11-2004 al 29-11-2006.
- Partecipante al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 2006 dal titolo "SISTEMI AZOLICI AD ATTIVITA' ANTINEOPLASTICA", prot. 2006030430\_005, responsabile scientifico Prof. Girolamo Cirrincione, Università di Palermo, dal 09-02-2007 al 08-02-2009.
- Partecipante al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 2008 dal titolo "SISTEMI AZOLICI AD ATTIVITA' ANTINEOPLASTICA", prot.

20082L3NFT\_001, responsabile scientifico Prof. Girolamo Cirrincione, Università di Palermo, dal 22-03-2010 al 22-09-2012.

- Responsabile scientifico del progetto ATE - EX60% 2012 (Università di Palermo) dal titolo "Progettazione, sintesi, e studio dell'attività biologica di nuovi inibitori dei processi carcinogenici" dal 05-12-2012 al 31-12-2015.
- Responsabile del progetto CORI 2013 (Cooperazione internazionale per la formazione e la ricerca) dal titolo "Studi sulla chaperonina Heat Shock Protein 60 (HSP60) come target nello studio dei processi neoplastici", in cooperazione con il gruppo di ricerca del Prof. J.L. Macario (University of Maryland - Biotechnology Institute University of Maryland School of Medicine - Baltimore, Maryland, USA). Parte dei risultati ottenuti durante la cooperazione sono stati pubblicati nella rivista Scientific Reports (Nature Group).

### **Responsabilita' di studi e ricerche scientifiche**

Incarico di responsabilità di studi e di ricerche commissionate dalla DOLFIN SPA, nell'ambito del programma quadro di ricerca e innovazione Horizon 2020, per il progetto dal titolo: Realizzazione di un prodotto dolciario innovativo preparato con ingredienti naturali ed additivato di elementi funzionali in grado di migliorare il benessere individuale e messa a punto di un idoneo processo produttivo e del materiale di confezionamento che ne garantisca la sicurezza e la qualità alimentare, dal 08-06-2017 a oggi.

### **Direzione o partecipazione a comitati editoriali di riviste, collane editoriali, enciclopedie e trattati di riconosciuto prestigio**

Partecipazione alla traduzione e curatela dell'opera "The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action" di R.B. Silvermann e M.W. Holladay 2014. Titolo della versione italiana: "Manuale di Chimica Farmaceutica - Progettazione, meccanismo d'azione e metabolismo dei farmaci".

### **Formale attribuzione di incarichi di insegnamento o di ricerca (fellowship) presso qualificati atenei e istituti di ricerca esteri o sovranazionali**

Studi QSAR/QSPR mediante tecniche in silico per la ottimizzazione e utilizzo della suite CODESSA PRO, sviluppata del gruppo di ricerca diretto dal Prof A.R. Katritzky - Department of organic chemistry, University of Florida (Gainesville- USA), dal 18-08-2003 al 11-03-2004.

## ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI (dal 2010)

- (1) Martorana A, **Lauria A.**, Design of antitumor drugs targeting c-kit receptor by a new mixed ligand-structure based method. *J Mol Graph Model* 2020;100.
- (2) Moreno LM, Quiroga J, Abonia R, **Lauria A.**, Martorana A, Insuasty H, et al. Synthesis, biological evaluation, and: In silico studies of novel chalcone: In pyrazoline-based 1,3,5-triazines as potential anticancer agents. *RSC Adv* 2020;10(56):34114-34129.
- (3) Martorana A, la Monica G, **Lauria A.**, Quinoline-based molecules targeting c-Met, EGF, and VEGF receptors and the proteins involved in related carcinogenic pathways. *Molecules* 2020;25(18).
- (4) Martorana A, Gentile C, **Lauria A.** In silico insights into the SARS CoV-2 main protease suggest NADH endogenous defences in the control of the pandemic coronavirus infection. *Viruses* 2020;12(8).
- (5) Mannino G, Di Stefano V, **Lauria A.**, Pitonzo R, Gentile C. Vaccinium macrocarpon (Cranberry)-based dietary supplements: Variation in mass uniformity, proanthocyanidin dosage and anthocyanin profile demonstrates quality control standard needed. *Nutrients* 2020;12(4).
- (6) **Lauria A.**, Mannino S, Gentile C, Mannino G, Martorana A, Peri D. DRUDIT: Web-based DRUGS DISCOVERY TOOLS to design small molecules as modulators of biological targets. *Bioinformatics* 2020;36(5):1562-1569.
- (7) Longo V, Longo A, Martorana A, **Lauria A.**, Augello G, Azzolina A, et al. Identification of an LPS-induced chemo-attractive peptide from *Ciona robusta*. *Mar Drugs* 2020;18(4).
- (8) Mannino G, Caradonna F, Cruciatà I, **Lauria A.**, Perrone A, Gentile C. Melatonin reduces inflammatory response in human intestinal epithelial cells stimulated by interleukin-1 $\beta$ . *J Pineal Res* 2019;67(3).
- (9) **Lauria A.**, Mingoia F, García-Argáez AN, Delisi R, Martorana A, Dalla Via L. New insights into the mechanism of action of pyrazolo[1,2-a]benzo[1,2,3,4]tetrazin-3-one derivatives endowed with anticancer potential. *Chem Biol Drug Des* 2018;91(2):463-477.
- (10) **Lauria A.**, Gentile C, Mingoia F, Palumbo Piccionello A, Bartolotta R, Delisi R, et al. Design, synthesis, and biological evaluation of a new class of benzo[b]furan derivatives as antiproliferative agents, with in silico predicted antitubulin activity. *Chem Biol Drug Des* 2018;91(1):39-49.
- (11) Bonsignore R, Russo F, Terenzi A, Spinello A, **Lauria A.**, Gennaro G, et al. The interaction of Schiff Base complexes of nickel(II) and zinc(II) with duplex and G-quadruplex DNA. *J Inorg Biochem* 2018;178:106-114.

- (12) Gentile C, Martorana A, **Lauria A.**, Bonsignore R. Kinase inhibitors in multitargeted cancer therapy. *Curr Med Chem* 2017;24(16):1-16.
- (13) Battisti A, Palumbo Piccionello A, Sgarbossa A, Vilasi S, Ricci C, Ghetti F, et al. Curcumin-like compounds designed to modify amyloid beta peptide aggregation patterns. *RSC Adv* 2017;7(50):31714-31724.
- (14) Martorana A, Perricone U, **Lauria A.** The Repurposing of Old Drugs or Unsuccessful Lead Compounds by in Silico Approaches: New Advances and Perspectives. *Curr Top Med Chem* 2016;16(19):2088-2106.
- (15) Bonsignore R, Terenzi A, Spinello A, Martorana A, **Lauria A.**, Almerico AM, et al. G-quadruplex vs. duplex-DNA binding of nickel(II) and zinc(II) Schiff base complexes. *J Inorg Biochem* 2016;161:115-121.
- (16) Martorana A, Giacalone V, Bonsignore R, Pace A, Gentile C, Pibiri I, et al. Heterocyclic scaffolds for the treatment of Alzheimer's disease. *Curr Pharm Des* 2016;22(26):3971-3995.
- (17) Tutone M, **Lauria A.**, Almerico AM. Theoretical Determination of the pK<sub>a</sub> Values of Betalamic Acid Related to the Free Radical Scavenger Capacity: Comparison Between Empirical and Quantum Chemical Methods. *Interdiscip Sci Comput Life Sci* 2016;8(2):177-185.
- (18) **Lauria A.**, Bonsignore R, Bartolotta R, Perricone U, Martorana A, Gentile C. Drugs Polypharmacology by in Silico Methods: New Opportunities in Drug Discovery. *Curr Pharm Des* 2016;22(21):3073-3081.
- (19) Terenzi A, **Lauria A.**, Almerico AM, Barone G. Zinc complexes as fluorescent chemosensors for nucleic acids: New perspectives for a "boring" element. *Dalton Trans* 2015;44(8):3527-3535.
- (20) Martorana A, Gentile C, Perricone U, Piccionello AP, Bartolotta R, Terenzi A, **Lauria A.**, et al. Synthesis, antiproliferative activity, and in silico insights of new 3-benzoylamino-benzo[ b ]thiophene derivatives. *Eur J Med Chem* 2015;90:537-546.
- (21) Min W, Angileri F, Luo H, **Lauria A.**, Shanmugasundaram M, Almerico AM, et al. A human CCT5 gene mutation causing distal neuropathy impairs hexadecamer assembly in an archaeal model. *Sci Rep* 2014;4.
- (22) **Lauria A.**, Alfio A, Bonsignore R, Gentile C, Martorana A, Gennaro G, et al. New benzothieno[3,2-d]-1,2,3-triazines with antiproliferative activity: Synthesis, spectroscopic studies, and biological activity. *Bioorg Med Chem Lett* 2014;24(15):3291-3297.
- (23) **Lauria A.**, Bonsignore R, Terenzi A, Spinello A, Giannici F, Longo A, et al. Nickel(ii), copper(ii) and zinc(ii) metallo-intercalators: Structural details of the DNA-

- binding by a combined experimental and computational investigation. *J Chem Soc Dalton Trans* 2014;43(16):6108-6119.
- (24) **Lauria A.**, Tutone M, Barone G, Almerico AM. Multivariate analysis in the identification of biological targets for designed molecular structures: The BIOTA protocol. *Eur J Med Chem* 2014;75:106-110.
- (25) Tutone M, **Lauria A.**, Almerico AM. Leptin and the ob-receptor as anti-obesity target: Recent in silico advances in the comprehension of the protein-protein interaction and rational drug design of anti-obesity lead compounds. *Curr Pharm Des* 2014;20(1):136-145.
- (26) Tutone M, Pantano L, **Lauria A.**, Almerico AM. Molecular dynamics, dynamic site mapping, and highthroughput virtual screening on leptin and the Ob receptor as anti-obesity target. *J Mol Model* 2014;20(5).
- (27) **Lauria A.**, Delisi R, Mingoia F, Terenzi A, Martorana A, Barone G, et al. 1,2,3-triazole in heterocyclic compounds, endowed with biological activity, through 1,3-dipolar cycloadditions. *Eur J Org Chem* 2014;2014(16):3289-3306.
- (28) **Lauria A.**, Terenzi A, Gentile C, Martorana A, Gennaro G, Barone G, et al. In silico, spectroscopic, and biological insights on annelated pyrrolo[3,2-e]pyrimidines with antiproliferative activity. *Lett Drug Des Discov* 2014;11(1):15-26.
- (29) **Lauria A.**, Terenzi A, Bartolotta R, Bonsignore R, Perricone U, Tutone M, et al. Does ligand symmetry play a role in the stabilization of DNA G-quadruplex host-guest complexes? *Curr Med Chem* 2014;21(23):2665-2690.
- (30) Terenzi A, Bonsignore R, Spinello A, Gentile C, Martorana A, Ducani C, **Lauria A.**, et al. Selective G-quadruplex stabilizers: Schiff-base metal complexes with anticancer activity. *RSC Adv* 2014;4(63):33245-33256.
- (31) **Lauria A.**, Almerico AM, Barone G. The influence of substitution in the quinoxaline nucleus on 1,3-dipolar cycloaddition reactions: A DFT study. *Comput Theor Chem* 2013;1013:116-122.
- (32) Mingoia F, Di Sano C, Di Blasi F, Fazzari M, Martorana A, Almerico AM, **Lauria A.**, Exploring the anticancer potential of pyrazolo[1,2-a]benzo[1,2,3,4] tetrazin-3-one derivatives: The effect on apoptosis induction, cell cycle and proliferation. *Eur J Med Chem* 2013;64:345-356.
- (33) Almerico AM, Tutone M, Pantano L, **Lauria A.** A3 adenosine receptor: Homology modeling and 3D-QSAR studies. *J Mol Graph Model* 2013;42:60-72.

- (34) Pace A, Barone G, **Lauria A.**, Martorana A, Piccionello AP, Pierro P, et al. Hsp60, a novel target for antitumor therapy: Structure-function features and prospective drugs design. *Curr Pharm Des* 2013;19(15):2757-2764.
- (35) **Lauria A.**, Abbate I, Gentile C, Angileri F, Martorana A, Almerico AM. Synthesis and biological activities of a new class of heat shock protein 90 inhibitors, designed by energy-based pharmacophore virtual screening. *J Med Chem* 2013;56(8):3424-3428.
- (36) **Lauria A.**, Abbate I, Patella C, Martorana A, Dattolo G, Almerico AM. New annelated thieno[2,3-e][1,2,3]triazolo[1,5-a]pyrimidines, with potent anticancer activity, designed through VLAK protocol. *Eur J Med Chem* 2013;62:416-424.
- (37) **Lauria A.**, Patella C, Abbate I, Martorana A, Almerico AM. An unexpected Dimroth rearrangement leading to annelated thieno [3,2-d][1,2,3]triazolo[1,5-a]pyrimidines with potent antitumor activity. *Eur J Med Chem* 2013;65:381-388.
- (38) Barone G, Terenzi A, **Lauria A.**, Almerico AM, Leal JM, Busto N, et al. DNA-binding of nickel(II), copper(II) and zinc(II) complexes: Structure-affinity relationships. *Coord Chem Rev* 2013;257(19-20):2848-2862.
- (39) **Lauria A.**, Patella C, Abbate I, Martorana A, Almerico AM. Lead optimization through VLAK protocol: New annelated pyrrolo-pyrimidine derivatives as antitumor agents. *Eur J Med Chem* 2012;55:375-383.
- (40) Almerico AM, Tutone M, Pantano L, **Lauria A.** Molecular dynamics studies on Mdm2 complexes: An analysis of the inhibitor influence. *Biochem Biophys Res Commun* 2012;424(2):341-347.
- (41) Almerico AM, Tutone M, **Lauria A.** Receptor-guided 3D-QSAR approach for the discovery of c-kit tyrosine kinase inhibitors. *J Mol Model* 2012;18(7):2885-2895.
- (42) Almerico AM, Tutone M, Guarcello A, **Lauria A.** In vitro and in silico studies of polycondensed diazine systems as anti-parasitic agents. *Bioorg Med Chem Lett* 2012;22(2):1000-1004.
- (43) **Lauria A.**, Tutone M, Almerico AM. Virtual lock-and-key approach: The in silico revival of Fischer model by means of molecular descriptors. *Eur J Med Chem* 2011;46(9):4274-4280.
- (44) **Lauria A.**, Tutone M, Ippolito M, Pantano L, Almerico AM. Molecular modeling approaches in the discovery of new drugs for anti-cancer therapy: The investigation of p53-MDM2 interaction and its inhibition by small molecules. *Curr Med Chem* 2010;17(28):3142-3154.
- (45) Almerico AM, Tutone M, **Lauria A.** 3D-QSAR pharmacophore modeling and in silico screening of new Bcl-xl inhibitors. *Eur J Med Chem* 2010;45(11):4774-4782.

- (46) **Lauria A.**, Tutone M, Almerico AM. Design of new DNA-interactive agents by molecular docking and QSPR approach. *Arkivoc* 2010;2010(11):13-27.
- (47) **Lauria A.**, Guarcello A, Dattolo G, Almerico AM. Study of reactivity in the 1,3-dipolar cycloaddition reactions leading to new triazolopyrrolopyrazine ring systems. *Synlett* 2010(14):2067-2070.
- (48) **Lauria A.**, Ippolito M, Fazzari M, Tutone M, Di Blasi F, Mingoia F, et al. IKK- $\beta$  inhibitors: An analysis of drug-receptor interaction by using Molecular Docking and Pharmacophore 3D-QSAR approaches. *J Mol Graph Model* 2010;29(1):72-81.