

# Antonino Lauria

---

## Curriculum vitae

---

Il Prof. Antonino Lauria, si è laureato in Chimica il 23 dicembre 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 a 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 la Facoltà di Farmacia dell'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 Tossicologia II e III (CTF).
- E' stato relatore di oltre 60 tesi sperimentali di laurea ed ha fatto parte delle commissioni di esami di laurea per il corso di laurea in CTF e farmacia.
- E' stato docente guida per tesi di dottorato di ricerca in Scienze Farmaceutiche.
- E' docente guida per tesi di dottorato di ricerca in Scienze Molecolari e Biomolecolari.
- 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).
- 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. 2002/03 al 2012/13 ha svolto il modulo del corso di "Analisi Chimico-Tossicologica" per il terzo anno della scuola di Specializzazione in Farmacia Ospedaliera.
- Dall'A.A. 2015/2016 svolge il modulo di "Metodi di analisi dei farmaci" per il primo anno della Scuola di Specializzazione in Farmacia Ospedaliera.
- Nel 2017 ha ricevuto un 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.
- E' coautore di 93 prodotti di ricerca pubblicati in riviste internazionali ISI (H-index 23), di cui è

primo autore in 32, autore di riferimento in 20 e ultimo autore in 11.

- Ha presentato oltre cento comunicazioni a congressi nazionali e internazionali.
- E' esperto valutatore per progetti HORIZON2020.
- Nel dicembre del 2017 ha superato l'Abilitazione Scientifica Nazionale a professore di prima fascia nel settore concorsuale 03/D1 - Chimica e Tecnologie Farmaceutiche, Tossicologiche e Nutraceutico-Alimentari.

---

### **Responsabilità e partecipazione a progetti di ricerca**

---

- Partecipante al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 1997 dal titolo "ETEROCICLI AZOTATI POLICONDENSATI A POTENZIALE ATTIVITA' BIOLOGICA" (prot. 9703028183\_021). Coordinatore scientifico Prof. Vincenzo Tortorella, responsabile scientifico Prof. Enrico Aiello.
- Partecipante al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 2002 dal titolo "SISTEMI AZOLICI AD ATTIVITA' ANTINEOPLASTICA" (prot. 2002033121\_008). Coordinatore scientifico Prof. Mario Grifantini, responsabile scientifico Prof. Girolamo Cirrincione.
- Partecipante al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 2004 dal titolo "SISTEMI AZOLICI AD ATTIVITA' ANTINEOPLASTICA" (prot. 2004030405\_003). Coordinatore scientifico Prof. Mario Grifantini, responsabile scientifico Prof. Girolamo Cirrincione.
- Partecipante al progetto di ricerca ordinario biennale "SISTEMI ETEROCICLICI DI INTERESSE FARMACEUTICO" (codice ORPA044301) finanziato con fondi di Ateneo (ex quota 60%) dell'esercizio finanziario anno 2004.
- Partecipante al progetto di ricerca ordinario biennale "SISTEMI ETEROCICLICI DI INTERESSE FARMACEUTICO" (ORPA050591) finanziato con fondi di Ateneo (ex quota 60%) dell'esercizio finanziario anno 2005.
- Partecipante al progetto di ricerca ordinario biennale "SISTEMI ETEROCICLICI DI INTERESSE FARMACEUTICO" (codice ORPA0688RH) finanziato con fondi di Ateneo (ex quota 60%) dell'esercizio finanziario anno 2006.
- Partecipante al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 2006 dal titolo "SISTEMI AZOLICI AD ATTIVITA' ANTINEOPLASTICA" (prot. 2006030430\_005). Coordinatore scientifico Prof. Mario Grifantini, responsabile scientifico Prof. Girolamo Cirrincione.
- Partecipante al Progetto di Ricerca di Interesse Nazionale (PRIN) dell'anno 2008 dal titolo "SISTEMI AZOLICI AD ATTIVITA' ANTINEOPLASTICA" (prot. 20082L3NFT\_001). Coordinatore e responsabile scientifico Prof. Girolamo Cirrincione.
- Partecipante all'attività di ricerca caratterizzata dalla collaborazione con il gruppo di ricerca Prof. Mátyus Péter presso il Department of Organic Chemistry Semmelweis University, Faculty of Pharmacology, Budapest, Hungary, nell'ambito del progetti di dottorato di ricerca in Scienze Farmaceutiche del Dr Riccardo Delisi (XXV Ciclo, tutor Antonino Lauria) e della Dr. Roberta Bartolotta (XXXIII Ciclo, tutor Antonino Lauria).
- 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), 2014, vol. 4, p. 1-9, doi: 10.1038/srep06688.
- Partecipante all'attività di ricerca dal titolo "Design, sintesi e attività biologica di derivati eterociclici ad attività antitumorale su cellule di epatocarcinoma HCC" prevista dal progetto denominato "CIPE 2" finanziato dal MIUR con D.M. 46965 del 31/12/2008 al Consorzio Lato (Laboratorio di Tecnologie Oncologiche HSR\_GIGLIO).
- 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" (CUP:B78C12000380001). Collaboratori esterni: Mingoia Francesco -ISMN CNR Palermo, Macario Alberto - School of Medicine (SOM-UMB) and Institute of Marine and Environmental Technology (IMET), University of Maryland, Baltimore (USA).

---

## Attività Editoriale

---

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"

Referee per le riviste:

- Journal of Medicinal Chemistry
- European Journal of Medicinal Chemistry
- Bioorganic and Medicinal Chemistry
- Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters
- QSAR & Combinatorial Science
- International Journal of Biological Macromolecules
- Molecular Diversity
- Journal of Molecular Modeling

---

## Organizzazione o partecipazione come relatore a convegni

---

- Comitato organizzatore: 20th International Congress of Heterocyclic Chemistry (20IHC) Palermo 31 Luglio – 5 Agosto, 2005.
- Comitato organizzatore: Convegno Congiunto delle Sezioni Calabria e Sicilia della Società Chimica Italiana. Palermo 4-5 dicembre 2006.
- Plenary lecture: 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.

---

## Publications in riviste internazionali ISI dal 2007 ad oggi

---

- 1) **A. Lauria**, A. Montalbano, P. Barraja, G. Dattolo, A.M. Almerico, "DNA minor groove binders: an overview on molecular modeling and QSAR approaches", *Curr. Med. Chem.*, **2007**, 14, 2136-2160.
- 2) **A. Lauria**, M. Ippolito, A.M. Almerico, "Molecular docking approach on the topoisomerase I inhibitors series included in the NCI anti-cancer agents mechanism database" *J. Mol. Mod.*, **2007**, 13, 393-400.
- 3) **A. Lauria**, C. Patella, M. Ippolito, A.M. Almerico, "Docking and synthesis of pyrrolopyrimidodiazepinone derivatives (PPDs) and their precursors: New scaffolds for DNA-interacting agents", *Theochem. J. Mol. Struct.*, **2007**, 819, 26-31.
- 4) P. Diana, A. Martorana, P. Barraja, **A. Lauria**, A. Montalbano, A.M. Almerico, G. Dattolo, G. Cirrincione: "Isoindolo[2,1-c]benzo[1,2,4]triazines: a new ring system with antiproliferative activity", *Bioorg. Med. Chem.*, **2007**, 15, 343-349.
- 5) **A. Lauria**, M. Ippolito, A.M. Almerico, "Molecular dynamics studies on HIV-1 protease: a comparison of the flap motions between wild type protease and the M46I/G51D double mutant", *J. Mol. Mod.*, **2007**, 13, 1151-1156.
- 6) A.M. Almerico, M. Tutone, M. Ippolito, **A. Lauria**, "Molecular modelling and QSAR in the discovery of HIV-1 integrase inhibitors", *Curr. Computer-Aided Drug Des.*, **2007**, 3, 214-233.
- 7) **A. Lauria**, C. Patella, G. Dattolo, A.M. Almerico, "Design and Synthesis of 4-Substituted Indolo[3,2-e][1,2,3]triazolo[1,5-a]pyrimidine Derivatives with Antitumor Activity", *J. Med. Chem.*, **2008**, 51(7), 2037-2046.
- 8) **A. Lauria**, A. Guarcello, G. Dattolo, A.M. Almerico, "Bis-1,2,4-triazolo[4,3-a:3',4'-c]quinoxalines of pharmaceutical interest from 1,3-dipolar cycloaddition", *Tetrahedron Lett.*, **2008**, 49, 1847-1850.
- 9) G. Barone, C.F. Guerra, N. Gambino, A. Silvestri, **A. Lauria**, A.M. Almerico, F.M. Bickelhaupt, "Intercalation of daunomycin into stacked DNA base pairs. DFT study of an anticancer drug", *J. Biomol. Struct. Dyn.*, **2008**, 26(1), 115-129.
- 10) **A. Lauria**, I. Abbate, C. Patella, N. Gambino, A. Silvestri, G. Barone, A.M. Almerico, "Pyrazolo[3,4-d][1,2,3]triazolo[1,5-a]pyrimidine: a new ring system through Dimroth rearrangement", *Tetrahedron Lett.*, **2008**, 49(35), 5125-5128.

- 11) A.M. Almerico, M. Tutone, **A. Lauria**, "Docking and multivariate methods to explore HIV-1 drug-resistance: a comparative analysis", *J. Comput. Aided Mol. Des.*, **2008**, 22(5), 287-297.
- 12) **A. Lauria**, M. Ippolito, A.M. Almerico, "Inside the Hsp90 inhibitors binding mode through induced fit docking", *J. Mol. Graphics Modell.*, **2009**, 27(6), 712-722.
- 13) A.M. Almerico, M. Tutone, **A. Lauria**, "In-silico screening of new potential Bcl-2/Bcl-xl inhibitors as apoptosis modulators", *J. Mol. Mod.*, **2009**, 15(4), 349-55.
- 14) **A. Lauria**, M. Ippolito, A.M. Almerico, "Combined use of PCA and QSAR/QSPR to predict the drugs mechanism of action. An application to the NCI ACAM Database", *QSAR & Comb. Sci.*, **2009**, 28, 387-395.
- 15) A.M. Almerico, M. Tutone, **A. Lauria**, "A QSAR study investigating the potential anti-HIV-1 effect of some Acyclovir and Ganciclovir analogs", *ARKIVOC*, **2009**, viii, 85-94.
- 16) **A. Lauria**, M. Ippolito, A.M. Almerico, "Principal component analysis on molecular descriptors as an alternative point of view in the search of new Hsp90 inhibitors", *J. Comp. Biol. Chem.*, **2009**, 33(5), 386-390.
- 17) **A. Lauria**, A. Guarcello, G. Macaluso, G. Dattolo, A.M. Almerico, "Reactivity of asymmetric benzo-condensed diazines with nitrilimine dipoles in the 1,3-dipolar cycloaddition reactions", *Tetrahedron Lett.*, **2009**, 50(52), 7333-7336.
- 18) **A. Lauria**, M. Ippolito, M. Fazzari, M. Tutone, F. Di Blasi, F. Mingoia, A.M. Almerico, "IKK- $\beta$  inhibitors: an analysis of drug-receptor interaction by using Molecular Docking and Pharmacophore 3D-QSAR approaches", *J. Mol. Graphics Modell.*, **2010**, 29(1), 72-81.
- 19) **A. Lauria**, A. Guarcello, G. Dattolo, A. M. Almerico, "Study of reactivity in the 1,3-dipolar cycloaddition reactions leading to new triazolopyrrolopyrazine ring systems", *Synlett*, **2010**, (14), 2067-2070.
- 20) **A. Lauria**, M. Tutone, A. M. Almerico, "Design of new DNA-interactive agents by molecular docking and QSPR approach" *ARKIVOC*, **2010**, (11), 13-27.
- 21) A.M. Almerico, M. Tutone, **A. Lauria**, "3D-QSAR pharmacophore modeling and *in silico* screening of new Bcl-xl inhibitors" *Eur. J. Med. Chem.*, **2010**, 45(11), 4774-4782.
- 22) **A. Lauria**, M. Tutone, A. M. Almerico, "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.
- 23) A.M. Almerico, M. Tutone, **A. Lauria** "Receptor-guided 3D-QSAR approach for the discovery of c-kit tyrosine kinase inhibitors", *J. Mol. Mod.*, **2012**, 18(7), 2885-2895.
- 24) **A. Lauria**, C. Patella, I. Abbate, A. Martorana, A.M. Almerico, Lead optimization through VLAK protocol: New annelated pyrrolo-pyrimidine derivatives as antitumor agents, *Eur. J. Med. Chem.* **2012**, 55, 375-383.
- 25) A.M. Almerico, M. Tutone, A. Guarcello, **A. Lauria**, "In vitro and *in silico* studies of polycondensed diazine systems as anti-parasitic agents", *Bioorg. Med. Chem. Lett.*, **2012**, 22, 1000-1004.
- 26) A.M. Almerico, M. Tutone, L. Pantano, **A. Lauria**, Molecular dynamics studies on Mdm2 complexes: An analysis of the inhibitor influence, *Biochem. Biophys. Res. Commun.*, **2012**, 424, 341-347.
- 27) **A. Lauria**, I. Abbate, C. Gentile, F. Angileri, A. Martorana, A.M. Almerico, 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, 3424-3428.
- 28) **A. Lauria**, I. Abbate, C. Patella, A. Martorana, G. Dattolo, A.M. Almerico, 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.
- 29) F. Mingoia, C. Di Sano, F. Di Blasi, M. Fazzari, A. Martorana, A.M. Almerico, **A. Lauria**, 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.
- 30) A. Pace, G. Barone, **A. Lauria**, A. Martorana, A. Palumbo Piccionello, P. Pierro, et al. Hsp60, a novel target for antitumor therapy: Structure-function features and prospective drugs design, *Curr Pharm Des.*, **2013**, 19, 2757-64.
- 31) **A. Lauria**, A.M. Almerico, G. Barone, The influence of substitution in the quinoxaline nucleus on 1,3-dipolar cycloaddition reactions: A DFT study. *Comp. Theo. Chem.* **2013**, 1013, 116-122.
- 32) A.M. Almerico, M. Tutone, L. Pantano, **A. Lauria**, A3 adenosine receptor: Homology modeling and 3D-QSAR studies, *J. Mol. Graphics Modell.*, **2013**, 42, 60-72.
- 33) **A. Lauria**, I. Abbate, C. Patella, A. Martorana, A.M. Almerico, 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**, 66 381-388.
- 34) G. Barone, A. Terenzi, **A. Lauria**, A.M. Almerico, J.M. Leal, N. Busto, B. García, DNA-binding of nickel(II), copper(II) and zinc(II) complexes: Structure–affinity relationships. *Coord. Chem. Rev.*,

2013, 257 (19), 2848-2862.

- 35) **A. Lauria**, A. Terenzi, C. Gentile, A. Martorana, G. Gennaro, G. Barone, A.M. Almerico, *In silico*, spectroscopic, and biological insights on annelated pyrrolo[3,2-e]pyrimidines with antiproliferative activity. *Leit. Drug Des. Discovery*, **2014**, 11(1), 15-26.
- 36) M. Tutone, Marco, **A. Lauria**, A.M. Almerico, 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.
- 37) **A. Lauria**, R. Bonsignore, A. Terenzi, A. Spinello, F. Giannici, A. Longo, A.M. Almerico, G. Barone, Nickel(II), copper(II) and zinc(II) metallo-intercalators: structural details of the DNA-binding by a combined experimental and computational investigation. *Dalton Trans.* **2014**, 43(16), 6108-6119.
- 38) **A. Lauria**, M. Tutone, G. Barone, A. M. Almerico, Multivariate analysis in the identification of biological targets for designed molecular structures: The BIOTA protocol. *Eur. J. Med. Chem.*, **2014**, 75, 106-110.
- 39) M. Tutone, L. Pantano, **A. Lauria**, A. M. Almerico, Molecular dynamics, dynamic site mapping, and highthroughput virtual screening on leptin and the Ob receptor as anti-obesity target. *J. Mol. Mod.*, **2014**, 20(5), 2247.
- 40) **A. Lauria**, R. Delisi, F. Mingoia, A. Terenzi, A. Martorana, G. Barone, A. M. Almerico, 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.
- 41) **A. Lauria**, A. Alfio, R. Bonsignore, C. Gentile, A. Martorana, G. Gennaro, G. Barone, A. Terenzi, A. M. Almerico, 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.
- 42) **A. Lauria**, A. Terenzi, R. Bartolotta, R. Bonsignore, U. Perricone, M. Tutone, A. Martorana, G. Barone, A. M. Almerico, Does ligand symmetry play a role in the stabilization of DNA g-quadruplex host-guest complexes?. *Curr. Med. Chem.* **2014**, 21(23), 2665-90.
- 43) A. Terenzi, R. Bonsignore, A. Spinello, C. Gentile, A. Martorana, C. Ducani, B. Högberg, A.M. Almerico, **A. Lauria**, G. Barone, Selective G-Quadruplex Stabilizers: Schiff-base Metal Complexes with Anticancer Activity. *RSC Adv.*, **2014**, 4, 33245-33256.
- 44) A. Martorana, C. Gentile, U. Perricone, A. Palumbo Piccionello, R. Bartolotta, A. Terenzi, A. Pace, F. Mingoia, A.M. Almerico, **A. Lauria**, Synthesis, antiproliferative activity, and in silico insights of new 3-benzoylamino-benzo[b]thiophene derivatives, *Eur. J. Med. Chem.*, **2015**, 90, 537-546.
- 45) A. Terenzi, **A. Lauria**, A.M. Almerico, G. Barone, Zinc complexes as fluorescent chemosensors for nucleic acids: new perspectives for a boring element, *Dalton transactions*, **2015**, 44(8), 3527-3535.
- 46) A. Martorana, C. Gentile, U. Perricone, A. Palumbo Piccionello, R. Bartolotta, A. Terenzi, A. Pace, F. Mingoia, A.M. Almerico, **A. Lauria**, Synthesis, antiproliferative activity, and in silico insights of new 3-benzoylamino-benzo [b] thiophene derivatives, *E. J. med. Chem.* **2015**, 90, 537-546.
- 47) M. Tutone, **A. Lauria**, A.M. Almerico, 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 Interdisciplinary Sciences: Computational Life Sciences*, **2016**.
- 48) A. Martorana, U. Perricone, **A. Lauria**, The Repurposing of Old Drugs or Unsuccessful Lead Compounds by in Silico Approaches: New Advances and Perspectives, *Current topics in medicinal chemistry*, **2016**, 16, 2088-2106.
- 49) **A. Lauria**, R. Bonsignore, R. Bartolotta, U. Perricone, A. Martorana, C. Gentile, *Drugs Polypharmacology by In Silico Methods: New Opportunities in Drug Discovery*, *Curr. Pharm. Des.*, **2016**, 22, 3073-3081.
- 50) R. Bonsignore, A. Terenzi, A. Spinello, A. Martorana, **A. Lauria**, A.M. Almerico, B. Keppler, G. Barone, G-quadruplex vs. duplex-DNA binding of nickel (II) and zinc (II) Schiff base complexes *J. Inorg. Biochem.*, **2016**.
- 51) A. Martorana, V. Giacalone, R. Bonsignore, A. Pace, C. Gentile, I. Pibiri, S. Buscemi, **A. Lauria**, A. Palumbo Piccionello, Heterocyclic scaffolds for the treatment of Alzheimer's Disease. *Curr. Pharm. Des.*, **2016**.
- 52) A. Battisti, A. Palumbo Piccionello, A. Sgarbossa, S. Vilasi, C. Ricci, F. Ghetti, F. Spinozzi, A. Marino Gammazza, V. Giacalone, A. Martorana, **A. Lauria**, C. Ferrero, D. Bulone, M.R. Mangione, P.L. San Biagio, M.G. Ortore, Curcumin-like compounds designed to modify amyloid beta peptide aggregation patterns., *RSC Advances*, **2017**, 7(50), 31714-24.
- 53) C. Gentile, A. Martorana, **A. Lauria**, R. Bonsignore R., Kinase inhibitors in multitargeted cancer therapy. *Curr. Med. Chem.* **2017**, 16, 1-16.
- 54) R. Bonsignore, F. Russo, A. Terenzi, A. Spinello, **A. Lauria**, G. Gennaro, G., A.M. Almerico, B.K.

- Keppler, G. Barone, 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.
- 55) **A. Lauria**, C. Gentile, F. Mingoia, A. Palumbo Piccionello, R. Bartolotta, R. Delisi, S. Buscemi, A. Martorana, 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.
- 56) **A. Lauria**, F. Mingoia, A.N. García-Argáez, R. Delisi, A. Martorana, L. Dalla Via, 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.