

# Curriculum Vitae

## INFORMAZIONI PERSONALI

**Nome** GIAMPAOLO  
**Cognome** BARONE  
**E-mail** giampaolo.barone@unipa.it

## FORMAZIONE TITOLI

1994 Laurea in Chimica presso l'Università di Palermo

1998 Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università di Palermo

1999-2001 Post-Dottorato in Chimica Farmaceutica e Tossicologica presso l'Università di Salerno

2001-2004 Assegno di Ricerca in Scienze Chimiche presso l'Università di Palermo

2004-2015 Ricercatore universitario di Chimica Generale e Inorganica presso l'Università di Palermo

2013 Abilitato alla tornata concorsuale 2012 (DD n. 222/2012) della ASN nel ruolo di Professore di seconda fascia per il settore concorsuale 03/B1

2014 Abilitato alla tornata concorsuale 2013 (DD n.161/2013) della ASN nel ruolo di Professore di prima fascia per il settore concorsuale 03/B1

2015-2020 Professore associato di Chimica Generale e Inorganica presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche, Università di Palermo

2020- Professore ordinario di Chimica Generale e Inorganica presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Biologiche, Chimiche e Farmaceutiche, Università di Palermo

## ATTIVITA' DIDATTICA

- Chimica per la Scuola Primaria e dell'Infanzia, 4 c.f.u., presso il Corso di Laurea Magistrale in Scienze della Formazione Primaria, dell'Università degli Studi di Palermo, AA **2017/2018, 2018/2019 e 2019/2020**

- Chimica Generale con Esercitazioni, 6+3 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Scienze Biologiche dell'Università degli Studi di Palermo, AA **2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019 e 2019/2020**

- Chimica Generale e Analitica, 6 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Agroalimentari dell'Università degli Studi di Palermo, AA **2016/2017 e 2019/2020**

- Sintesi Inorganica e dei Materiali, 3+3 c.f.u., modulo di Sintesi Inorganica, 3 c.f.u., presso il Corso di Laurea Magistrale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo, AA **2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018 e 2018/2019**
- Fondamenti di Chimica con Esercitazioni, 6+3 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Scienze Biologiche dell'Università degli Studi di Palermo, AA **2014/2015**
- Chimica I, 6 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Scienze Fisiche dell'Università degli Studi di Palermo, AA**2010/2011, 2011/2012, 2012/2013, 2013/2014, 2014/2015, 2015/2016 e 2016/2017**
- Chimica dei Composti di Coordinazione, 6 c.f.u., presso il Corso di Laurea Magistrale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo, AA **2010/2011 e 2011/2012**
- Chimica Generale ed Inorganica, 6 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Scienze e Tecnologie Agrarie dell'Università degli Studi di Palermo, AA **2011/2012**
- Chimica Generale, 6 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Scienze Biologiche dell'Università degli Studi di Palermo, AA **2009/2010**
- Chimica Generale, 6 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Scienze Biologiche dell'Università degli Studi di Palermo, sede consorziata di Caltanissetta, AA **2008/2009**
- Modellazione molecolare e chimica computazionale, 4+2 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo, AA **2006/2007, 2007/2008, 2008/2009 e 2009/2010**
- Assistente di Laboratorio di Chimica Inorganica II, 2+4 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo, AA **2005/2006, 2006/2007, 2007/2008, 2008/2009 e 2009/2010**
- Chimica Generale con Esercitazioni, 5+1 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Scienze Biologiche dell'Università degli Studi di Palermo, sede consorziata di Caltanissetta, AA **2004/2005, 2005/2006, 2006/2007 e 2007/2008**
- Chimica Generale ed Inorganica, 5 c.f.u., presso il Corso di Laurea in Scienze Biologiche dell'Università degli Studi di Palermo, sede consorziata di Caltanissetta, AA **2002/2003 e 2003/2004**

## PUBBLICAZIONE

### Articoli su riviste internazionali (dal 2012):

#### 2020

1. R. Bonsignore, G. Farine, C. Migliore, G. Gennaro, G. Barone: *DNA-binding of zinc(II) and nickel(II) salphen-like complexes extrapolated at 1 M salt concentration: Removing the ionic strength bias in physiological conditions*, **J. Inorg. Biochem.** 207, 111064 (2020)
2. R. Bonsignore, S.R. Thomas, W.T. Klooster, S.J. Coles, R.L. Jenkins, D. Bourissou, G. Barone, A. Casini, *Carbon–Phosphorus Coupling from C<sup>N</sup> Cyclometalated Au<sup>III</sup> Complexes*, **Chem. Eur. J.** 26, 4226-4231 (2020)
3. M. Gorska-Ponikowska, A. Poska, D. Jacewicz, M. Szkatula, G. Barone, G. Lo Bosco, F. Lo Celso, A. M Dabrowska, A. Kuban-Jankowska, M. Gorzynik-Debicka, N. Knap, L. Chmurzynski, L. Wawrzyniec Dobrucki, L. Kalinowski, M. Wozniak: *Modification of DNA structure by reactive nitrogen species as a result of 2-methoxyestradiol–induced neuronal nitric oxide synthase uncoupling in metastatic osteosarcoma cells*, **Redox Biol.** 32, 101522 (2020)
4. C. Hognon, T. Miclot, C. Garcia-Iriepa, A. Frances-Monerris, S. Grandemange, A. Terenzi, M. Marazzi, G. Barone, A. Monari: *Role of RNA Guanine Quadruplexes in Favoring the Dimerization of SARS Unique Domain in Coronaviruses*, **J. Phys. Chem. Lett.** 2020, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.0c01097>
5. S.R. Thomas, R. Bonsignore, J. Escudero Sanchez, S.M. Meier-Menches, C. Brown, M. Wolf, G. Barone, L.Y. Luk, A. Casini: *Exploring the chemoselectivity towards cysteine arylation by cyclometalated Au(III) compounds: new mechanistic insights*, **ChemBioChem** 2020, <https://doi.org/10.1002/cbic.202000262>

#### 2019

1. A. Terenzi, H. Gattuso, A. Spinello, B.K. Keppler, C. Chipot, F. Dehez, G. Barone, A. Monari: *Targeting G-quadruplexes with Organic Dyes: Chelerythrine-DNA Binding Elucidated by Combining Molecular Modeling and Optical Spectroscopy*, **Antioxidants** 8, 472 (2019)
2. C. Hognon, A. Gebus, G. Barone, A. Monari: *Human DNA Telomeres in Presence of Oxidative Lesions: The Crucial Role of Electrostatic Interactions on the Stability of Guanine Quadruplexes*, **Antioxidants** 8, 337 (2019)

3. P. Przychodzena, A. Kuban-Jankowska, R. Wyszowska, G. Barone, Giosuè Lo Bosco, F. Lo Celso, A. Kamm, A. Daca, T. Kostrzewa, M. Gorska-Ponikowska: *PTP1B phosphatase as a novel target of oleuropein activity in MCF-7 breast cancer model*, **Toxicol. in Vitro** 61, 104624 (2019)
4. M.N. Wenzel, R. Bonsignore, S.R. Thomas, D. Bourissou, G. Barone, A. Casini: *Cyclometalated Au(III) Complexes for Cysteine Arylation in Zinc Finger Protein Domains: Towards Controlled Reductive Elimination*, **Chem. Eur. J.** 25, 7628-7634 (2019)
5. M. Massaro, G. Barone, G. Biddeci, G. Cavallaro, F. Di Blasi, G. Lazzara, G. Nicotra, C. Spinella, G. Spinelli, S. Riela: *Halloysite nanotubes-carbon dots hybrids multifunctional nanocarrier with positive cell target ability as a potential non-viral vector for oral gene therapy*, **J. Coll. Interf. Sci.** 552, 236-246 (2019)
6. M.G. Cusimano, A. Spinello, G. Barone, D. Schillaci, S. Cascioferro, A. Magistrato, B. Parrino, V. Arizza, M. Vitale: *A Synthetic Derivative of Antimicrobial Peptide Holothuroidin 2 from Mediterranean Sea Cucumber (Holothuria tubulosa) in the Control of Listeria monocytogenes*, **Mar. Drugs** 17, 159 (2019)
7. M.V. Raimondi, O. Randazzo, M. La Franca, G. Barone, E. Vignoni, D. Rossi, S. Collina: *DHFR Inhibitors: Reading the Past for Discovering Novel Anticancer Agents*, **Molecules** 24, 1140 (2019)
8. M.V. Raimondi, R. Listro, M.G. Cusimano, M. La Franca, T. Faddetta, G. Gallo, D. Schillaci, S. Collina, A. Leonchiks, G. Barone: *Pyrrolomycins as antimicrobial agents. Microwave-assisted organicsynthesis and insights into their antimicrobial mechanism of action*, **Bioorg. Med. Chem.** 27, 721-728 (2019)

## 2018

1. A. Spinello, M.G. Cusimano, D. Schillaci, L. Inguglia, G. Barone, V. Arizza: *Antimicrobial and Antibiofilm Activity of a Recombinant Fragment of Thymosin of Sea Urchin Paracentrotus lividus*, **Mar. Drugs** 16, 366 (2018)
2. G. Turturici, V. La Fiora, A. Terenzi, G. Barone, V. Cavalieri: *Perturbation of developmental regulatory gene expression by G-quadruplex DNA inducer in the sea urchin embryo*, **Biochemistry** 57, 4391-4394 (2018)
3. N. Busto, P. Calvo, J. Santolaya, J.M. Leal, A. Guédin, G. Barone, T. Torroba, J.L. Mergny, B. García: *Fishing for G-Quadruplexes in Solution with a Perylene Diimide Derivative Labeled with Biotins*, **Chem. Eur. J.** 24, 11292-11296 (2018)

4. V. Porto, E. Borrajo, D. Buceta, C. Carneiro, S. Huseyinova, B. Domínguez Kyra, J.E. Borgman, M. Lakadamyali, M.F. GarciaParajo, J. Neissa, T. GarcíaCaballero, G. Barone, M.C. Blanco, N. Busto, B. García, J.M. Leal, J. Blanco, J. Rivas, M.A. López-Quintela, F. Domínguez: *Silver Atomic Quantum Clusters of Three Atoms for Cancer Therapy: Targeting Chromatin Compaction to Increase the Therapeutic Index of Chemotherapy*, **Adv. Mater.** 30, 1801317 (2018)
5. C. Pérez-Arnaiz, J. Leal, N. Busto, M.C. Carrión, A.R. Rubio, I. Ortiz, G. Barone, B. Díaz de Greñu, J. Santolaya, J.M. Leal, M. Vaquero, F.A. Jalón, B.R. Manzano, B. García: *Role of Seroalbumin in the Cytotoxicity of cis-Dichloro Pt(II) Complexes with (N^N)-Donor Ligands Bearing Functionalized Tails*, **Inorg. Chem.** 57, 6124-6134 (2018)
6. R. Bonsignore, F. Russo, A. Terenzi, A. Spinello, A. Lauria, G. Gennaro, 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.** 178, 106-114 (2018)
7. C. Perez-Arnaiz, N. Busto, J. Santolaya, J.M. Leal, G. Barone, B. Garcia: *Kinetic evidence for interaction of TMPyP4 with two different G-quadruplex conformations of human telomeric DNA*, **Biochim. Biophys. Acta, Gen. Subj. (BBAGen)** 1862, 522-531 (2018)
8. M.N. Wenzel, S.M. Meier-Menches, T.L. Williams, E.Rämisch, G. Barone, A. Casini: *Selective targeting of PARP-1 zinc finger recognition domains with Au(III) organometallics*, **Chem. Commun.** 54, 611-614 (2018)
9. M. Gorska-Ponikowska, A. Kuban-Jankowska, S.A. Eisler, U. Perricone, G. Lo Bosco, G. Barone, S. Nussberger: *2-Methoxyestradiol Affects Mitochondrial Biogenesis Pathway and Succinate Dehydrogenase Complex Flavoprotein Subunit A in Osteosarcoma Cancer Cells*, **Cancer Gen. Prot.** 15, 73-89 (2018)

## 2017

1. A. de Almeida, A.F. Mósca, D. Wragg, M. Wenzel, P. Kavanagh, G. Barone, S. Leoni, G. Soveral, A. Casini: *The mechanism of aquaporin inhibition by gold compounds elucidated by biophysical and computational methods*, **Chem. Commun.** 53, 3830-3833 (2017)
2. J. Almeida, A. Aguiar, A. Leite, A.M.N. Silva, L. Cunha-Silva, B. de Castro, M. Rangel, G. Barone, A.C. Tomé, A.M.G. Silva: *1,3-Dipolar cycloadditions with meso-tetraarylchlorins-site selectivity and mixed bisadducts*, **Org. Chem. Front.** 4, 534-544 (2017)
3. M.A. Girasolo, L. Tesoriere, G. Casella, A. Attanzio, M.L. Capobianco, P. Sabatino, G. Barone, S. Rubino, R. Bonsignore: *A novel compound of triphenyltin(IV) with N-tert-butoxycarbonyl-Lornithine causes cancer cell death by inducing a p53-dependent activation of the mitochondrial pathway of apoptosis*, **Inorg. Chim. Acta** 456, 1-8 (2017)

4. C. Caruso Bavisotto, D. Nikolic, A. Marino Gammazza, R. Barone, F. Lo Cascio, E. Mocciaro, G. Zummo, E. Conway de Macario, A.J.L. Macario, F. Cappello, V. Giacalone, A. Pace, G. Barone, A. Palumbo Piccionello, C. Campanella: *The dissociation of the Hsp60/pro-Caspase-3 complex by bis(pyridyl)oxadiazole copper complex (CubipyOXA) leads to cell death in NCI-H292 cancer cells*, **J. Inorg. Biochem.** 170, 8-16 (2017)
5. M. Gorska-Ponikowska, U. Perricone, A. Kuban-Jankowska, G. Lo Bosco, G. Barone: *2-methoxyestradiol impacts on amino acids-mediated metabolic reprogramming in osteosarcoma cells by its interaction with NMDA receptor*, **J. Cell. Physiol.** 9999, 1-20 (2017)

## 2016

1. R. Bonsignore, A. Notaro, A.M.P. Salvo, A. Spinello, G. Fiasconaro, A. Terenzi, F. Giacalone, B.K. Keppler, M. Giuliano, M. Gruttadauria, G. Barone: *DNA-Binding and Anticancer Activity of Pyrene-Imidazolium Derivatives*, **ChemistrySelect** 1, 6755-6761 (2016)
2. A. Spinello, G. Barone, F. Cappello, A. Pace, S. Buscemi, A. Palumbo Piccionello: *The Binding Mechanism of Epolactaene to Hsp60 Unveiled by in Silico Modelling*, **ChemistrySelect** 4, 759 -765 (2016)
3. D. Schillaci, A. Spinello, M.G. Cusimano, S. Cascioferro, G. Barone, M. Vitale, V. Arizza: *A peptide from human thymosin as a platform for the development of new anti-biofilm agents for Staphylococcus spp. and Pseudomonas aeruginosa*, **World J. Microbiol. Biotechnol.** 32, 1-9 (2016)
4. H. Gattuso, A. Spinello, A. Terenzi, X. Assfeld, G. Barone, A. Monari: *Circular Dichroism of DNA G-Quadruplexes: Combining Modeling and Spectroscopy to Unravel Complex Structures*, **J. Phys. Chem. B** 120, 3113-3121 (2016)
5. R. Bonsignore, A. Terenzi, A. Spinello, A. Martorana, A. Lauria, A.M. Almerico, B.K. Keppler, G. Barone: *G-quadruplex vs. duplex-DNA binding of nickel(II) and zinc(II) Schiff base complexes*, **J. Inorg. Biochem.** 161, 115-121 (2016)
6. A. Terenzi, D. Lötsch, S. van Schoonhoven, A. Roller, C.R. Kowol, W. Berger, B.K. Keppler, G. Barone: *Another Step Toward DNA Selective Targeting: Ni<sup>II</sup> and Cu<sup>II</sup> Complexes of a Schiff Base Ligand able to bind gene promoter G-Quadruplexes*, **Dalton Trans.** 45, 7758-7767 (2016)
7. A. Spinello, R. Bonsignore, G. Barone, B.K. Keppler, A. Terenzi: *Metal Ions and Metal Complexes in Alzheimer's Disease*, **Curr. Pharm. Design** 22, 3996-4010 (2016)
8. A. Spinello, A. de Almeida, A. Casini, G. Barone: *The inhibition of glycerol permeation through Aquaglyceroporin-3 induced by mercury(II): a molecular dynamics study*, **J. Inorg. Biochem.** 160 78-84 (2016)

9. A. Spinello, G. Barone, J. Grunenberg: *Molecular recognition of naphthalene diimide ligands by telomeric quadruplex-DNA: the importance of the protonation state and mediated hydrogen bonds*, **Phys. Chem. Chem. Phys.** 18, 2871-2877 (2016)
10. G. Barone, G. Gennaro, A.M. Giuliani, M. Giustini: *Interaction of Cd(II) and Ni(II) terpyridine complexes with model polynucleotides: a multidisciplinary approach*, **RSC Adv.** 6, 4936-4945 (2016)
11. C. Garino, A. Terenzi, G. Barone, L. Salassa: *Teaching Inorganic Photophysics and Photochemistry with Three Ruthenium(II) Polypyridyl Complexes: A Computer-Based Exercise*, **J. Chem. Educ.** 93, 292-298 (2016)

## 2015

1. A. Terenzi, A. Lauria, A.M. Almerico, G. Barone: *Zinc complexes as fluorescent chemosensors for nucleic acids: new perspectives for a "boring" element*, **Dalton Trans.** 44, 3527-3535 (2015)
2. C. Queirós, A. Leite, M.G.M. Couto, L. Cunha-Silva, G. Barone, B. de Castro, M. Rangel, A.M.N. Silva, A.M.G. Silva: *The Influence of the Amide Linkage in the Fe<sup>III</sup>-Binding Properties of Catechol-Modified Rosamine Derivatives*, **Chem. Eur. J.** 21, 15692-15704 (2015)
3. A. Spinello, M.G. Ortore, F. Spinozzi, C. Ricci, G. Barone, A. Marino Gammazza, A. Palumbo Piccionello: *Quaternary structures of GroEL and naïve-Hsp60 chaperonins in solution: a combined SAXS-MD study*, **RSC Adv.** 5, 49871-49879 (2015)
4. D. Buceta, N. Busto, G. Barone, J.M. Leal, F. Domínguez, L.J. Giovanetti, F.G. Requejo, B. García, M.A. López-Quintela: *Ag<sub>2</sub> and Ag<sub>3</sub> Clusters: Synthesis, Characterization, and Interaction with DNA*, **Angew. Chem. Int. Ed.** 54, 7612-7616 (2015)
5. I. Pibiri, L. Lentini, R. Melfi, G. Gallucci, A. Pace, A. Spinello, G. Barone, A. Di Leonardo: *Enhancement of premature stop codon readthrough in the CFTR gene by Ataluren (PTC124) derivatives*, **Eur. J. Med. Chem.** 101, 236-244 (2015)

## 2014

1. 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.** 4, 33245-33256 (2014)

2. D. Schillaci, M.G. Cusimano, A. Spinello, G. Barone, D. Russo, M. Vitale, D. Parrinello, V. Arizza: *Paracentrin 1, a synthetic antimicrobial peptide from the sea-urchin Paracentrotus lividus, interferes with staphylococcal and Pseudomonas aeruginosa biofilm formation.* **AMB Express** 4, 78-86 (2014)
3. Y.A. Attia, D. Buceta, C. Blanco-Varela, M.B. Mohamed, G. Barone, M.A. Lopez-Quintela: *Structure-Directing and High-Efficiency Photocatalytic Hydrogen Production by Ag Clusters,* **J. Am. Chem. Soc.** 136, 1182-1185 (2014)
4. J. Grunenbergs, G. Barone, A. Spinello: *The Right Answer for the Right Electrostatics: Force Field Methods Are Able to Describe Relative Energies of DNA Guanine Quadruplexes,* **J. Chem. Theory Comput.** 10, 2901-2905 (2014)
5. M. Airoidi, G. Barone, G. Gennaro, A.M. Giuliani, M. Giustini: *Interaction of Doxorubicin with Polynucleotides. A Spectroscopic Study,* **Biochemistry** 53, 2197-2207 (2014)
6. 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.** 43, 6108-6119 (2014)
7. A. Biancardi, A. Burgalassi, A. Terenzi, A. Spinello, G. Barone, T. Biver, B. Mennucci: *A combined theoretical-experimental investigation of the spectroscopic properties of a DNA-intercalator Zn<sup>II</sup> Salphen-type complex,* **Chem. Eur. J.** 20, 7439-7447 (2014)
8. 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 Biology Activity,* **Bioorg. Med. Chem. Lett.** 24, 3291-3297 (2014)
9. 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.** 75, 106-110 (2014)
10. L. Lentini, R. Melfi, A. Di Leonardo, A. Spinello, G. Barone, A. Pace, A. Palumbo Piccionello, I. Pibiri: *Towards a rationale for the PTC124 (Ataluren) promoted readthrough of premature stop codons: a computational approach and GFP-reporter cell-based assay,* **Mol. Pharm.** 11, 653-664 (2014)
11. 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,* **Lett. Drug Des. Discov.** 11, 15-26 (2014)



12.

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.** 3289-3306 (2014)

13.

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.** 21, 2665-2690 (2014)

## 2013

1.

G. Barone, C. Fonseca Guerra, F.M. Bickelhaupt: *B-DNA Structure and Stability as Function of Nucleic Acid Composition: Dispersion-Corrected DFT Study of Dinucleoside Monophosphate Single and Double Strands*, **ChemistryOpen** 2, 186-193 (2013)

2.

A. Terenzi, C. Ducani, L. Male, G. Barone, M.J. Hannon: *DNA interaction of Cu<sup>II</sup>, Ni<sup>II</sup> and Zn<sup>II</sup> functionalized Salphen complexes: studies by linear dichroism, gel electrophoresis and PCR*, **Dalton Trans.** 2, 11220-11226 (2013)

3.

A. Spinello, A. Terenzi, G. Barone: *Metal Complex-DNA Binding: Insights from Molecular Dynamics and DFT/MM Calculations*, **J. Inorg. Biochem.** 124, 63-69 (2013)

4.

J. Grunenberg, G. Barone: *Are compliance constants ill-defined descriptors for weak interactions?*, **RSC Adv.** 3, 4757-4762 (2013)

5.

A. Lauria, A.M. Almerico, G. Barone: *The influence of substitution in the quinoxaline nucleus on 1,3-dipolar cycloaddition reactions: A DFT study*, **Comput. Theor. Chem.** 1013, 116-122 (2013)

6.

A. Pace, G. Barone, A. Lauria, A. Martorana, A. Palumbo Piccionello, P. Pierro, A. Terenzi, A.M. Almerico, S. Buscemi, C. Campanella, F. Angileri, F. Carini, G. Zummo, E. Conway de Macario, F. Cappello, A.J.L. Macario: *Hsp60, a Novel Target for Antitumor Therapy: Structure-Function Features and Prospective Drugs Design*, **Curr. Pharm. Design** 19, 2757-2764 (2013)

7.

I. Pibiri, A. Palumbo Piccionello, A. Pace, G. Barone, S. Buscemi: *Photochemical functionalization of allyl benzoates by C-H insertion*, **Tetrahedron** 69, 6065-6069 (2013)

8.

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.** 257, 2848-2862 (2013)

## 2012

1. A. Terenzi, L. Tomasello, A. Spinello, G. Bruno, C. Giordano, G. Barone: (*Dipyrido[3,2-a:2',3'-c]phenazine*)(glycinato)copper(II) perchlorate: A novel DNA-intercalator with anti-proliferative activity against thyroid cancer cell lines, **J. Inorg. Biochem.** 117, 103-110 (2012)
2. A. Terenzi, C. Ducani, V. Blanco, L. Zerzankova, A.F. Westendorf, C. Peinador, J.M. Quintela, P.J. Bednarski, G. Barone, M.J. Hannon: DNA Binding Studies and Cytotoxicity of a Dinuclear Pt<sup>II</sup> Diazapyrenium-Based Metallo-supramolecular Rectangular Box, **Chem. Eur. J.** 18, 10983-10990 (2012)
3. A. Terenzi, M. Fanelli, G. Ambrosi, S. Amatori, V. Fusi, L. Giorgi, V. Turco Liveri, G. Barone: DNA binding and antiproliferative activity toward human carcinoma cells of copper(II) and zinc(II) complexes of a 2,5-diphenyl[1,3,4]oxadiazole derivative, **Dalton Trans.** 41, 4389-4395 (2012)
4. F. Ferrante, G. Barone, D. Duca: Relativistic coupled cluster calculations of the electronic structure of KrH<sup>+</sup>, XeH<sup>+</sup> and RnH<sup>+</sup>, **Theor. Chem. Acc.** 131, 1165 (2012)

## ATTIVITA' SCIENTIFICHE

### Tutor di tesi di Dottorato di Ricerca

1. Sintesi ed interazione con il DNA di composti di interesse farmaceutico, dott. Noemi Gambino, XX Ciclo, triennio **2005-2007**
  2. Sintesi di complessi metallici e studio della loro interazione con acido desossiribonucleico, dott. Alessio Terenzi, XXII Ciclo, triennio **2008-2010**
  3. Studio dell'interazione di DNA nativo con complessi di metalli di transizione, dott. Riccardo Bonsignore, XXIV Ciclo, triennio **2011-2013**
  4. Interazione di complessi metallici con DNA "G-quadruplex", dott. Angelo Spinello, XXVI Ciclo, triennio **2013-2015**
  5. The interaction of novel transition metal compounds and ligands with biomolecular targets: kinetic, thermodynamic and computational investigations, dott. Javier Santolaya Rubio, XXXI Ciclo, in cotutela con la Prof. Begoña García Ruíz, Università di Burgos, Spagna, triennio **2015-2018**
  6. Progettazione, sintesi e caratterizzazione di nuovi complessi di metalli di transizione con potenziali proprietà antitumorali, dott. Mery La Franca, XXXIII Ciclo, triennio **2017-2020**
- dell'influenza di lesioni del DNA sulla regolazione dell'espressione genica, Dr. Tom Miclot, in cotutela con il Prof. Antonio Monari, Università della Lorena, Francia, triennio **2019-2022**

## AMBITI DI RICERCA

Chimica Bioinorganica e Chimica Computazionale

### Temi di ricerca:

particolare DNA  
piccole molecole, naturali o sintetiche, in particolare composti metallici, con molecole biologiche, in

2. proprietà strutturali, elettroniche, catalitiche e nucleari di composti metallici