

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n.1 posto di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera b) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale 03/C1-CHIMICA ORGANICA , settore scientifico-disciplinare CHIM/06-CHIMICA ORGANICA

presso il Dipartimento di CHIMICA,

(avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 53 del 05/07/2019) Codice concorso 4125

Monica Civera

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	CIVERA
NOME	MONICA
DATA DI NASCITA	17 GIUGNO 1977

ATTIVITA' DI RICERCA (<i>qualifica</i>)		Argomento
Ott 2018- Presente	RTD-A – UNIMI- finanziamento esterno (Università degli Studi di Milano) Dipartimento di Chimica	Sviluppo di nuove molecole capaci di abbattere le barriere dei "batteri persistenti" , progetto ERC-2017-STG - ERC Starting Grant (PI Prof. S. Sattin)
Giu 2015 – Sett 2018	Assegno di Ricerca di tipo A - UNIMI Dipartimento di Chimica Supervisor: Prof. L. Belvisi	Studio delle interazioni caderine-inibitore per il progetto 'Un approccio integrato computazionale e sperimentale per lo sviluppo di inibitori peptidomimetici delle interazioni omofile delle caderine per applicazioni in campo oncologico'
Ago 2014 - Mag 2015	Assegno di Ricerca di tipo B – UNIMI Dipartimento di Chimica Supervisor: Prof. L. Belvisi	Progettazione razionale e studio computazionale di nuovi inibitori delle caderine per il progetto 'Modellistica computazionale delle interazioni proteina-proteina delle caderine: progettazione di nuovi inibitori peptidomimetici per applicazioni in campo oncologico'
Dic 2010 - Mag 2014	Coordinatore Nazionale progetto FIRB RBFR088ITV - UNIMI Centro CISI (Centro Interdisciplinare Studi bio-molecolari e applicazioni Industriali) e Dipartimento di Chimica	Sviluppo di piccole molecole in grado di inibire le interazioni proteina-proteina della N-caderina per il progetto 'Utilizzo di approcci computazionali per la progettazione di peptidomimetici diretti verso la N-caderina, loro sintesi e valutazione biologica come agenti antitumorali'

Gen 2010 - Nov 2010	Assegno di Ricerca di tipo B - UNIMI Centro CISI Supervisor: Prof. L. Belvisi	Sviluppo di peptidi lantibiotici per il progetto 'Metodi computazionali per la delucidazione della struttura di nuovi antibiotici' (Regione Lombardia, Metadistretti. 2008 ID 5181.)
Ott 2009 – Dic 2009	Ricercatore a progetto (Co. Co. Co) CISI srl	'Milano crea impresa: la rete degli incubatori della città di Milano'.
Nov 2008 - Set 2009	Ricercatore a progetto (Co. Co. Co) - UNIMI Centro CISI Supervisor Prof. C. Gennari	Contributo per lo sviluppo della piattaforma di Modellistica Molecolare del Centro CISI all'interno del progetto 'Sviluppo delle attività del CISI nel settore delle biotecnologie: potenziamento delle piattaforme tecnologiche esistenti' (Comune di Milano, convenzione 55/2008)
Ott 2005 - Ott 2008	Ricercatore a progetto (Co. Co. Co) - UNIMI Centro CISI Supervisor Prof. C. Scolastico	Studio computazionale di nuovi ligandi delle integrine per il progetto FIRB RBNE03LF7X: 'Progettazione, sintesi e screening biologico con metodi ad alta resa di librerie combinatoriali di molecole sviluppate a partire da unità strutturali originali, per applicazioni in campo terapeutico e diagnostici.

TITOLI DI STUDIO E FORMAZIONE

6 Apr 2018 - 6 Apr 2024	Abilitazione Scientifica Nazionale Professore di II Fascia	Settore concorsuale - 03/C1 Chimica Organica (ssd CHIM/06 Chimica organica)
2002-2005	Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche XVIII ciclo Università degli studi di Milano (UNIMI) Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica Supervisor: Prof. M. Sironi e S. L. Fornili	Tesi: '1. The osmoprotection phenomenon: a Molecular Dynamics approach and 2. Application of extremely localized molecular orbitals in the framework of the Density Functional Theory'
1996-2002	Laurea in Chimica (V.O.) – Università degli Studi di Milano. Votazione: 110/110 e lode Relatore: Prof. M. Sironi e S. L. Fornili	Tesi: 'Simulazioni di Dinamica Molecolare di soluzioni acquose di N,N,N-trimetilglicina'

ATTIVITA' DIDATTICA

Assistenza Laboratori

2018 50 ore di assistenza ai laboratori di Chimica Organica per il corso di laurea triennale in Chimica

Supervisione di studenti

Tutoraggio dottorandi

2018-2021 Co-tutor per la tesi di Dottorato in Chimica di C. Coppa, Dipartimento di Chimica, UNIMI (XXXIV ciclo)

2010-2013 Co-tutor per la tesi di Dottorato in Scienze Chimiche di F. Doro, Dipartimento di Chimica, UNIMI (XXVI ciclo)

2011-2014 Supervisione informale per la tesi di Dottorato in Scienze Chimiche di I. Guzzetti, Dipartimento di Chimica, UNIMI (XXV ciclo)

Tutoraggio laureandi

2012-2019 Co-tutor di due tesi Magistrali in Molecular Biotechnology and Bioinformatics, UNIMI (A. Sala, aa 2017-2018) in Chimica, UNIMI (D. Guzzetti, aa 2018-2019); due tesi triennali in Chimica, UNIMI (F. Bonato e F. Lavore, aa 2016-2017). Supervisore informale di tre tesi Magistrali in Scienze Chimiche, UNIMI (F. Frigo, aa 2015-2016, A. Coati aa 2012-2013, A. Bartaglia 2012-2013)

Attività di tutoraggio didattico (ex-art. 45)

2016-2017 Dipartimento di Bioscienze (UNIMI), Chimica organica e Laboratorio di Chimica – 1° anno del corso di Laurea Triennale in Scienze Biologiche, 26 ore
Dipartimento di Chimica (UNIMI), corso di aggiornamento per insegnanti di scuola superiore "Chimica su PC" (Progetto Lauree Scientifiche, PLS), 18 ore

2017-2018 Dipartimento di Bioscienze (UNIMI), Chimica organica e Laboratorio di Chimica – 1° anno del corso di Laurea Triennale in Scienze Biologiche, 20 ore
Dipartimento di Chimica (UNIMI), corso di aggiornamento per insegnanti di scuola superiore "Chimica su PC" (Progetto Lauree Scientifiche, PLS), 18 ore

Nota: Come da regolamento dell'Università degli Studi di Milano, agli assegnisti non è stato consentito fino all'anno accademico 2015-2016 di svolgere attività didattica diversa dalle attività di tutorato (ex-art 45).

RESPONSABILITA' SCIENTIFICA PER PROGETTI DI RICERCA

2010-2014 **Coordinatore Nazionale (PI) FIRB 'Futuro in ricerca 2008'** RBFR088ITV Utilizzo di approcci computazionali per la progettazione di peptidomimetici diretti verso la N-caderina, loro sintesi e valutazione biologica come agenti antitumorali'
Punteggio 40/40

2013-2014 **Responsabile Scientifico per Assegno di Ricerca di tipo B (1 anno), 'Sintesi organica di piccole molecole peptidomimetiche dirette verso le caderine'** relativo al FIRB RBFR088ITV.

PARTECIPAZIONE a GRUPPI di RICERCA NAZIONALI e INTERNAZIONALI

Ho collaborato ai seguenti progetti nazionali ed internazionali:

- **ERC Starting Grant**, ERC-2017-STG: 'Eradicating Chronic Infections', 1/02/2018-31/01/2023, coordinatore Prof. S. Sattin
- **MIUR - PRIN** n. 20157WW5EH: 'Tumor-targeting peptidomimetics: synthesis and bio-medical applications', 5/02/2017-4/02/2020, coordinatore: Prof. C. Gennari
- **European Commission –Horizon 2010, ITN-ETN Network** Marie Skłodowska-Curie ITN MAGICBULLET 642004 'Peptide-Drug Conjugates for Targeted Delivery in Tumor Therapy', 1/01/2015-31/12/2018
- **ISCRA** - Consorzio CINECA, High performance computing class project 'Insights into conformational dynamics of peptidomimetics and proteins' (SIMPEP, HP10CPAC9W, 29/1/2015-29/10/2015), coordinatore Prof. L. Belvisi
- **AIRC** 2012 'Cadherin-associated signalling pathways in ovarian cancer ', IG13055, coordinatore Dr. A. Tomassetti, Fondazione IRCCS Istituto Nazionale dei Tumori (Milano)
- **European Commission - RTN Network**, 2006-2010 (R)Evolutionary Catalysis MRTN-CT-2006-035866 coordinatore Ing. Igor Tvaroška, DrSc., Institute of Chemistry (Slovak Academy of Science)
- **Regione Lombardia – Metadistretti** 2009 'Nuovi antibiotici attivi nei confronti di patogeni multi-resistenti' coordinatore Prof. D. Potenza
- **Comune di Milano, convenzione 55/2008** 'Sviluppo delle attività del CISI nel settore delle biotecnologie: potenziamento delle piattaforme tecnologiche esistenti' coordinatore: Prof. C. Gennari
- **MIUR – FIRB** 2005 RBNE03LF7X 'Progettazione, sintesi e screening biologico con metodi ad alta resa di librerie combinatoriali di molecole sviluppate a partire da unità strutturali originali, per applicazioni in campo terapeutico e diagnostico' coordinatore: Prof. C. Scolastico

ALTRE COLLABORAZIONI attualmente in corso *[numero di articoli congiunti pubblicati]*

- **Prof. D. Potenza e Dr.ssa F. Vasile**, Dipartimento di Chimica, UNIMI: studio conformazionale e caratterizzazione dell'interazione di peptidomimetici con proteine di membrana (integrine e caderine) *[6 + 1 in preparazione]*
- **Dr. E. Parisini**, Istituto Italiano di Tecnologia, Politecnico di Milano: espressione di costrutti di caderine per studi NMR sull'interazione ligando-caderina e loro cristallizzazione (3)
- **Dr. A. Tomassetti**, Fondazione IRCCS, Istituto Nazionale dei Tumori di Milano: valutazione biologica di ligandi per le caderine in cellule di carcinoma dell'ovaio (2)
- **Prof. C. Gennari**, Dipartimento di Chimica, UNIMI: sintesi, caratterizzazione conformazionale di peptidomimetici per le integrine e studio della loro interazione *[11]*
- **Prof. U. Piarulli**, Dipartimento di Scienza e Alta Tecnologia, Università degli Studi dell'Insubria: sintesi, caratterizzazione conformazionale di peptidomimetici per le integrine e caderine, studio della loro interazione, *[13 + 1 in preparazione]*
- **Dr. L. Manzoni, Dr. D. Arosio**, CNR-ISTM (Milano): sintesi, caratterizzazione conformazionale di peptidomimetici per le integrine e caderine, studio della loro interazione, *[7]*
- **Prof. A. Tolomelli, Dr. D. Giacomini**, Dipartimento di Chimica 'Giacomo Ciamician', Università di Bologna, sintesi di ligandi per le integrine e studio della loro interazione, *[4+1 in preparazione]*
- **Prof. F. Gervasio**, Biomolecular Modeling, University College London: studio di Metadinamica delle conformazioni della E-caderina in soluzione (1)
- **Prof. G. Tiana**, Dipartimento di Fisica, UNIMI: sviluppo di nuovi metodi per l'identificazione della conformazione di piccole molecole in soluzione *[1]*
- **Prof. G. Colombo**, Dipartimento di Chimica, Università di Pavia e ICRM-CNR: studio dei cambi conformazionali dell'integrina $\alpha\text{v}\beta\text{3}$, *[2 + 1 in preparazione]*

PARTECIPAZIONE ALLA CREAZIONE DI NUOVE AZIENDE

Parte dell'attività di post-dottorato (**2008-2010**) svolta presso il **Centro CISI** (UNIMI), si è focalizzata sullo sviluppo della piattaforma di Modellistica Molecolare contribuendo al raggiungimento dell'obiettivo principale del Centro, ossia la capacità di promuovere la cooperazione e il trasferimento di tecnologia tra le strutture di ricerca universitaria e il mondo industriale. In questo contesto ho collaborato allo sviluppo di progetti con varie aziende (**Bracco Imaging SpA, Molmed SpA, Axxam, Veneto Pharma srl**) svolgendo attività di *computer-aided drug design*.

In questo periodo ho contribuito alla nascita di una Società Consortile denominata **CISI srl**, partecipata da Università degli Studi di Milano, CNR, Associazione Fondazione Renato Dulbecco e Consorzio Italbiotec, e nata come spin off del Centro CISI.

Nel periodo ottobre-dicembre **2009** ho lavorato (con contratto a progetto) per **CISI srl**, per il progetto 'Milano crea impresa: la rete degli incubatori della città di Milano'.

ATTIVITA' DI RELATORE A CONGRESSI

Comunicazioni orali

- 'Investigating the interaction of peptidomimetic ligands with E-cadherin using NMR and computational studies', **Computationally Driven Drug Discovery**, 5th Meeting, Milano IFOM, 16-17 Novembre 2017
- 'Peptidomimetic inhibitors of cadherin homophilic interactions: from computational design to ligand binding epitope by STD NMR', **PRIN Kick-off Meeting**, Milano, 23-24 Febbraio 2017
- 'Simulazioni di dinamica molecolare di soluzioni di osmoprotettori', **XXI Congresso nazionale della Società Chimica Italiana**, Torino, 23-37 Giugno 2003

Comunicazioni orali su invito

- 'Exploring E-cadherin-peptidomimetics interaction using NMR and computational studies' **The Milan Structural Biology Joint Lab Meeting, Milano**, IRCCS Scientific Institute San Raffaele, 21 Giugno 2019
- 'Design of Cyclopeptidic Drugs' **Workshop eCheminfo Euro 2017 and 2018, Training and Innovation Course in Drug Design**, Milano, 15-21 Luglio 2017

Selezione di Comunicazioni Poster

- **21st European Symposium of Organic Chemistry (ESOC 2019)**, Vienna, 24-18 Luglio 2019.
A chimera model of Rel_{seq} pre-catalytic state, M. Civera, S. Sattin
- **Annual European User Meeting (Schrodinger)**, Roma, 26-28 Settembre 2018.
A fragment-based virtual screening approach to identify e-cadherin ligands, M. Civera, F. Vasile, F. Lavore, L. Belvisi, E. Parisini, D. Potenza
- **21st EuroQSAR, where Molecular simulations meet Drug discovery**, Verona, 4-8 Ottobre 2016
An integrated computational and NMR study of the first peptidomimetic inhibitors of cadherin homophilic interaction, M. Civera, L. Belvisi, D. Potenza, F. Vasile, D. Arosio, L. Manzoni, V. Nardone, E. Parisini, U. Piarulli
- **Computationally Driven Drug Discovery**, 3rd Meeting, Verona, 4-6 Marzo 2014
Targeting protein-protein interactions in cancer with peptidomimetics: insights into ligand conformation and ligand-receptor interactions, L. Belvisi, M. Civera, C. Gennari, I. Guzzetti, U. Piarulli, D. Potenza
- **VIII EWDD – Eighth European Workshop in Drug Design**, Certosa di Pontignano, 22-28 Maggio 2011
Targeting integrins $\alpha V\beta 3$ and $\alpha IIb\beta 3$ with RGD peptidomimetics: Study of the ligand conformation and of the ligand-receptor interactions, M. Civera, L. Belvisi, C. Gennari, U. Piarulli, D. Potenza, F. Vasile

PREMI e RICONOSCIMENTI

- Borsa di Studio per la partecipazione al Workshop Advanced Monte-Carlo Methods, 11-25 gennaio 2005, Lion, France CECAM
- Very Important Paper (VIP): manuscript cmdc.201100372 per 'Development of Isoxazoline-Containing Peptidomimetics as Dual $\alpha v\beta 3$ - and $\alpha 5\beta 1$ Integrin Ligands' A. Tolomelli, L. Gentilucci, E. Mosconi, A. Viola, S. D. Dattoli, M. Baiula, S. Spampinato, L. Belvisi, M. Civera, ChemMedChem 2011, 6, 2264 - 2272.
- Front cover picture of issue 5/2011 of ChemBioChem 'STD and TR-NOESY NMR study of receptor-ligand interactions in living cancer cells' D. Potenza, F. Vasile, L. Belvisi, M. Civera, E. M. V. Araldi, ChemBioChem 2011, 12, 695-699.

PARTECIPAZIONE A SCUOLE E CORSI

Scuole di Formazione e Corsi Avanzati

- VIII EWDD – Eighth European Workshop in Drug Design, 22-28 Maggio 2011, Siena
- Corso base di Python per la programmazione in ambiente scientifico, Cilea (Segrate), 25-28 Ottobre 2010
- Fall Schrödinger User Symposium, 7-9 ottobre 2007 Verona
- Advanced Monte-Carlo Methods, 11-25 gennaio 2005, Lion, France CECAM WORKSHOP
- Assistenza alle esercitazioni per la 'Scuola di Chimica Computazionale. Introduzione, per Esercizi, all'Uso del Calcolatore in Chimica Organica e Biologica, 25-29 Settembre, Siena 2006

INFORMAZIONI ADDIZIONALI

Affiliazione a Società Scientifiche

2002-2004 e 2017-2019: Membro della Società Chimica Italiana (SCI)

Dal 2017 affiliazione al CNR-ISTM (Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari)

Richieste di Finanziamento

2019 Bando SEED (Bando Straordinario per Progetti Interdipartimentali, linea 3 del Piano di Sostegno alla Ricerca PSR 2019): 'The molecular basis of the protein aggregation depended neurodegenerative diseases: structural and dynamic requirements for the protein-oligosaccharide interaction mediating protein aggregation and deposition', presentato come coordinatore di unità (CUD)

2013 Progetto FIRB (linea 2): 'Structural insights into cadherin protein-protein interactions by an integrated computational and experimental approach: development of peptidomimetic modulators for cancer applications'. Il progetto è stato valutato positivamente.

2016 My First AIRC Grant (MFAG), 'Peptidomimetics as tools for the inhibition of E-cadherin homophilic interactions in ovarian cancer' (Pre-submission). Il progetto è stato valutato positivamente

Attività di divulgazione scientifica

Dal **2015** sono curatrice della rubrica 'Dalla Letteratura' per la rivista 'La Chimica e L'Industria' (ISSN 2283-544X, Società Chimica Italiana) occupandomi dell'analisi di pubblicazioni nell'ambito della chimica organica computazionale

ALLONTANAMENTO NON VOLONTARIO DALL'ATTIVITÀ DI RICERCA

Luglio 2012 - Dicembre 2012 (5 mesi)

Astensione dal lavoro per maternità

Agosto 2015 – Febbraio 2016 + Luglio 2016 (8 mesi)

Astensione dal lavoro per maternità.

COMPETENZE COMPUTAZIONALI

- Grande esperienza nel campo del *rational design*, *virtual screening* ed ottimizzazione di molecole dirette a specifici target di interesse farmaceutico
- Esperienza nell'utilizzo di diversi software per il *drug design* (Schrodinger suite, Autodock, diversi web based tools, AMBER e GROMACS)
- Esperienza nello studio delle proprietà conformazionali di biomolecole (piccole molecole e di proteine) mediante tecniche avanzate di campionamento e simulazione (es. metadinamica, REMD)
- Esperienza nello sviluppo di analoghi di strutture secondarie peptidiche per la progettazione di ligandi peptidomimetici
- Esperienza nello studio delle interazioni ligando-recettore con diversi approcci computazionali (docking e dinamica molecolare)
- Esperienza nell'installazione di software per la modellistica molecolare
- Utente esperto di Sistemi Operativi Linux

INDICATORI BIBLIOMETRICI

ORCID: 0000-0001-5171-1062

Numero di pubblicazioni: 33

Citazioni: 565 (Scopus, fino al 24 Luglio 2019)

Numero medio di citazioni per articolo (Citazioni totali/ 33)= 17.12

IF totale (JCR 2017) = 139.56

IF medio (IF totale / 33) = 4.23

h index: 15 (Scopus)

PUBBLICAZIONI (*Lista completa*)

Le pubblicazioni come Corresponding Author sono contrassegnate con un asterisco *

1. **Bromine-promoted glycosidation of conformationally superarmed thioglycosides**
M. Panza, [M. Civera](#)*, J.P. Yasomanee, L. Belvisi, A.V. Demchenko, Chem. Eur.J., 2019 (accepted)
doi: 10.1002/chem.201901969, **IF = 5.16**
2. **Exploring E-cadherin-peptidomimetics interaction using NMR and computational studies**
[M. Civera](#)*, F. Vasile, D. Potenza, C. Colombo, S. Parente, C. Vettriano, T. Prosdoci, E. Parisini, L. Belvisi, PLoS Comput Biol, 2019, 15 (6): e1007041
doi: 10.1371/journal.pcbi.1007041, **IF = 3.96**
3. **The Importance of Detail: How Differences in Ligand Structures Determine Distinct Functional Responses in Integrin $\alpha\text{v}\beta3$.**
A. Paladino, [M. Civera](#), F. Curnis, M. Paolillo, C. Gennari, U. Piarulli, A. Corti, L. Belvisi, G. Colombo, Chem. Eur.J., 2019, 25,5959 –5970

doi: 10.1002/chem.201900169, **IF = 5.16**

4. **On-Chip Screening of a Glycomimetic Library with C-Type Lectins Reveals Structural Features Responsible for Preferential Binding of Dectin-2 over DC-SIGN/R and Langerin**

L. Medve, S. Achilli, S. Serna, F. Zuccotto, N. Varga, M. Thépaut, [M. Civera](#), C. Vivès, F. Fieschi, N. Reichardt, A. Bernardi, *Chem. Eur.J.*, 2018, 24(54):14448-14460.

doi: 10.1002/chem.20180257, **IF = 5.16**

5. **Investigating the Interaction of Cyclic RGD Peptidomimetics with $\alpha V\beta 6$ Integrin by Biochemical and Molecular Docking Studies**

[M. Civera](#), D. Arosio, F. Bonato, L. Manzoni, L. Pignataro, S. Zanella, C. Gennari, U. Piarulli, L. Belvisi, *Cancers*, 2017, 9(10), 128

doi:10.3390/cancers9100128, **IF = 5.33**

6. **High Affinity vs. Native Fibronectin in the Modulation of $\alpha V\beta 3$ Integrin Conformational Dynamics: Insights from Computational Analyses and Implications for Molecular Design**

A. Paladino, [M. Civera](#), L. Belvisi, G. Colombo, *PLoS Comput. Biol.*, 2017, 13(1): e1005334

doi:10.1371/journal.pcbi.1005334, **IF: 3.96**

7. **Insights into the binding of cyclic RGD peptidomimetics to $\alpha 5\beta 1$ integrin by live cell NMR and computational studies**

I. Guzzetti, [M. Civera](#), F. Vasile, D. Arosio, C. Tringali, U. Piarulli, C. Gennari, L. Pignataro, D. Potenza, L. Belvisi, *ChemistryOpen*, 2017, 6, 128–136

doi: 10.1002/open.201600112, **IF: 2.80**

8. **Thermodynamically-Weighted Conformational Ensemble of Cyclic RGD Peptidomimetics from NOE Data**

F. Vasile, [M. Civera](#), L. Belvisi, D. Potenza, G. Tiana, *J. Phys. Chem. B*, 2016, 120 (29), 7098-7107

doi: 10.1021/acs.jpcb.6b04941, **IF: 3.15**

9. **New β -Lactam Derivatives Modulate Cell Adhesion and Signaling Mediated by RGD-Binding and Leukocyte Integrins**

M. Baiula, P. Galletti, G. Martelli, R. Soldati, L. Belvisi, [M. Civera](#), S. D. Dattoli, S. M. Spampinato, D. Giacomini, New β -Lactam Derivatives, *J. Med. Chem.*, 2016 59 (21), 9721-9742

doi: 10.1021/acs.jmedchem.6b00576, **IF: 6.25**

10. **New potent $\alpha V\beta 3$ integrin ligands based on azabicycloalkane (γ, α)-dipeptide mimics**

M. Pilkington-Miksa, E. M. V. Araldi, D. Arosio, L. Belvisi, [M. Civera](#), L. Manzoni, *Org. Biomol. Chem.*, 2016, 14, 3221-3233

doi: 10.1039/C6OB00287K, **IF: 3.42**

11. **Crystal Structure of Human E-Cadherin-EC1EC2 in Complex with a Peptidomimetic Competitive Inhibitor of Cadherin Homophilic Interaction**

V. Nardone, A. P. Lucarelli, A. Dalle Vedove, R. Fanelli, A. Tomassetti, L. Belvisi, [M. Civera](#), E. Parisini, *J. Med. Chem.*, 2016, 59 (10), 5089-5094

doi:10.1021/acs.jmedchem.5b01487, **IF: 6.25**

12. **New Insights into the Molecular Mechanism of E Cadherin-Mediated Cell Adhesion by Free Energy Calculations**

F. Doro, G. Saladino, L. Belvisi, [M. Civera](#)*, F. L. Gervasio, *J. Chem. Theory Comput.*, 2015, 11 (4), 1354–1359

doi:10.1021/ct5010164, **IF: 5.40**

13. **Computational design of novel peptidomimetic inhibitors of cadherin homophilic interactions**

F. Doro, C. Colombo, C. Alberti, D. Arosio, L. Belvisi, C. Casagrande, R. Fanelli, L. Manzoni, E. Parisini, U. Piarulli, E. Luison, M. Figini, A. Tomassetti, [M. Civera](#)*, *Org. Biomol. Chem.* **2015**, 13, 2570-2573

doi: 10.1039/C4OB02538E, **IF: 3.42**

14. **Determination of the binding epitope of RGD-peptidomimetics to $\alpha v\beta 3$ and $\alpha IIb\beta 3$ integrin-rich intact cells by NMR and computational studies**

I. Guzzetti, [M. Civera](#), F. Vasile, E.M.V. Araldi, L. Belvisi, C.M.A. Gennari, D. Potenza, R. Fanelli, U. Piarulli, *Org. Biomol. Chem.*, **2013**, 11, 3886-3893

doi: 10.1039/C3OB40540K, **IF: 3.42**

15. **Cyclic isoDGR Peptidomimetics as Low-Nanomolar $\alpha v\beta 3$ Integrin Ligands**

M. Mingozi, A. Dal Corso, M. Marchini, I. Guzzetti, [M. Civera](#), U. Piarulli, D. Arosio, L. Belvisi, D. Potenza, L. Pignataro, C. Gennari, *Chem. Eur. J.*, **2013**, 19, 3563-3567

doi:10.1002/chem.201204639, **IF: 5.16**

16. **Modulation of $\alpha v\beta 3$ - and $\alpha 5\beta 1$ -integrin-mediated adhesion by dehydro- β -amino acids containing peptidomimetics**

A. Tolomelli, M. Baiula, L. Belvisi, A. Viola, L. Gentilucci, S. Troisi, S.D. Dattoli, S. Spampinato, [M. Civera](#), E. Juaristi, M. Escudero, *Eur. J. Med. Chem.*, **2013**, 66, 258-268

doi: 10.1016/j.ejmech.2013.05.050, **IF: 4.82**

17. **Dimeric Smac mimetics/IAP inhibitors as in vivo-active pro-apoptotic agents. Part II: Structural and biological characterization**

D. Lecis, E. Mastrangelo, L. Belvisi, M. Bolognesi, [M. Civera](#), F. Cossu, M. De Cesare, D. Delia, C. Drago, G. Manenti, L. Manzoni, M. Milani, E. Moroni, P. Perego, D. Potenza, V. Rizzo, C. Scavullo, C. Scolastico, F. Servida, F. Vasile, P. Seneci, *Bioorg. Med. Chem.*, **2012**, 20 6709-6723

doi: 10.1016/j.bmc.2012.09.041, **IF: 2.44**

18. **A Library Approach to the Development of BenzaPhos: Highly Efficient Chiral Supramolecular Ligands for Asymmetric Hydrogenation**

L. Pignataro, C. Bovio, [M. Civera](#), U. Piarulli, C. Gennari, *Chem. Eur. J.*, **2012**, 18, 10368-10381

doi: 10.1002/chem.201201032, **IF: 5.16**

19. **Synthesis of Gd and [68Ga] complexes in conjugation with a conformationally-optimized RGD sequence as potential MRI and PET tumour-imaging probes**

L. Manzoni, L. Belvisi, D. Arosio, M.P. Bartolomeo, A. Bianchi, C. Brioschi, F. Buonsanti, C. Cabella, C. Casagrande, [M. Civera](#), M. De Matteo, L. Fugazza, L. Lattuada, F. Maisano, L. Miragoli, C. Neira, M. Pilkington-Miksa, C. Scolastico, *ChemMedChem*, **2012**, 7, 1084-1093

doi:10.1002/cmdc.201200043, **IF: 3.01**

20. **Rhodium-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation of Olefins with PhthalaPhos, a New Class of Chiral Supramolecular Ligands**

L. Pignataro, M. Boghi, [M. Civera](#), S. Carboni, U. Piarulli, C.M.A. Gennari, *Chem. Eur. J.*, **2012**, 18, 1383-1400

doi:10.1002/chem.201102018, **IF: 5.16**

21. **STD and trNOESY NMR Study of Receptor-Ligand Interactions in Living Cancer Cells**

D. Potenza, F. Vasile, L. Belvisi, [M. Civera](#), E.M.V. Araldi, *ChemBioChem*, **2011**, 12, 695-699

doi: 10.1002/cbic.201000756, **IF: 2.77**

22. **Development of Isoxazoline-Containing Peptidomimetics as Dual α V β 3 and α 5 β 1 Integrin Ligands**
A. Tolomelli, L. Gentilucci, E. Mosconi, A. Viola, S.D.Dattoli, M. Baiula, S. Spampinato, L. Belvisi, [M. Civera](#), *ChemMedChem*, **2011**, 6, 2264-2272
doi: 10.1002/cmdc.201100372, **IF: 3.01**
23. **Bifunctional 2,5-Diketopiperazines as Efficient Organocatalysts for the Enantioselective Conjugate Addition of Aldehydes to Nitroolefins**
M. Durini, F.A. Sahr, M. Kuhn, [M. Civera](#), C.M.A. Gennari, U. Piarulli, *Eur. J. Org. Chem.*, **2011**, 5599-5607
doi: 10.1002/ejoc.201100794, **IF: 2.88**
24. **Foldamers of bifunctional diketopiperazines displaying a beta-bend ribbon structure**
R. Delatouche, M. Durini, [M. Civera](#), L. Belvisi, U. Piarulli, *Tetrahedron Lett.*, **2010**, 51, 4278-4280
doi: 10.1016/j.tetlet.2010.06.043, **IF: 2.13**
25. **PhthalaPhos: Chiral Supramolecular Ligands for Enantioselective Rhodium-Catalyzed Hydrogenation Reactions**
L. Pignataro, S. Carboni, [M. Civera](#), R. Colombo, U. Piarulli, C.M.A. Gennari, *Angew. Chemie Int. Ed.*, **2010**, 49, 6633-6637
doi:10.1002/anie.201002958, **IF: 12.10**
26. **Antiangiogenic Effect of Dual/Selective α 5 β 1/ α v β 3 Integrin Antagonists Designed on Partially Modified Retro-Inverso Cyclotetrapeptide Mimetics**
L. Gentilucci, G. Cardillo, S. Spampinato, A. Tolomelli, F. Squassabia, R. De Marco, A. Bedini, M. Baiula, L. Belvisi, [M. Civera](#), *J. Med. Chem.*, **2010**, 53, 106-118
doi: 10.1021/jm9013532, **IF: 6.26**
27. **Cyclic RGD-containing functionalized azabicycloalkane peptides as potent integrin antagonists for tumor targeting**
L. Manzoni, L. Belvisi, D. Arosio, [M. Civera](#), M. Pilkington-Miksa, D. Potenza, A. Caprini, E.M.V. Araldi, E. Monferini, M. Mancino, F. Podestà, C. Scolastico, *ChemMedChem*, **2009**, 4, 615-632
doi:10.1002/cmdc.200800422, **IF: 3.01**
28. **Cyclic RGD-Peptidomimetics Containing Bifunctional Diketopiperazine Scaffolds as New Potent Integrin Ligands**
A.S.M. Ressurreição, A. Vidu, [M. Civera](#), L. Belvisi, D. Potenza, L. Manzoni, S. Ongerì, C.M.A. Gennari, U. Piarulli, *Chem. Eur. J.*, **2009**, 15, 12184-12188
doi:10.1002/chem.200902398, **IF: 5.16**
29. **Synthesis and Conformational Studies of Peptidomimetics Containing a New Bifunctional Diketopiperazine Scaffold Acting as a beta-Hairpin Inducer**
A. Ressurreicao, A. Bordessa, [M. Civera](#), L. Belvisi, C.M.A. Gennari, U. Piarulli, *J. Org. Chem.*, **2008**, 73, 652-660
doi:10.1021/jo702072z, **IF: 4.81**
30. **Extremely localized molecular orbital: theory and applications**
M. Sironi, A. Genoni, [M. Civera](#), S. Pieraccini, M. Ghitti, *Theoretical Chemistry Accounts*, **2007**, 117, 685-698
doi: 10.1007/s00214-006-0200-7, **IF: 1.55**

31. **Unusual properties of aqueous solutions of L-proline: A molecular dynamics study**

[M. Civera](#), M. Sironi, S. L. Fornili, *Chem. Phys. Lett.*, **2005**, 415, 274-278

doi: 10.1016/j.cplett.2005.08.145, **IF: 1.69**

32. **Molecular dynamics simulations of aqueous solutions of glycine betaine**

[M. Civera](#), A. Fornili, M. Sironi, S. L. Fornili, *Chem. Phys. Lett.*, **2003**, 367, 238-244

doi: 10.1016/S0009-2614(02)01707-4, **IF: 1.69**

33. Molecular dynamic simulation of aqueous solutions of trimethylamine-N-oxide and tert-butyl alcohol, A. Fornili, [M. Civera](#), M. Sironi, S. L. Fornili, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2003**, 5, 4905-4910

doi:10.1039/b308248b, **IF: 3.91**

Le dichiarazioni rese nel presente curriculum sono da ritenersi rilasciate ai sensi degli artt. 46 e 47 del D.P.R. 445/2000

Data

24/07/2019

Luogo

Milano