

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. 68 del 01/09/2020) Codice concorso 4438

## Monica Civera

### CURRICULUM VITAE

#### INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	CIVERA
NOME	MONICA
DATA DI NASCITA	17 GIUGNO 1977

ATTIVITA' DI RICERCA ( <i>qualifica</i> )		Argomento
<b>Ott 2018- Presente</b>	<b>RTD-A – UNIMI- finanziamento esterno</b> (Università degli Studi di Milano) <b>Dipartimento di Chimica</b>	Sviluppo di nuove molecole capaci di inibire l'insorgenza dei "persisters" batterici, progetto <b>ERC-2017-StG - (PI Prof. S. Sattin)</b>
<b>Giu 2015 – Sett 2018</b>	<b>Assegno di Ricerca di tipo A - UNIMI</b> <b>Dipartimento di Chimica</b> Supervisor: Prof. L. Belvisi (24 mesi + 7 mesi di rinnovo)	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'
<b>Ago 2014 - Mag 2015</b>	<b>Assegno di Ricerca di tipo B – UNIMI</b> <b>Dipartimento di Chimica</b> Supervisor: Prof. L. Belvisi (10 mesi)	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'
<b>Dic 2010 – Mag 2014</b>	<b>Coordinatore Nazionale progetto FIRB RBFR088ITV - UNIMI (Co.Co.Co)</b> <b>Centro CISI</b> (Centro Interdisciplinare Studi bio-molecolari e applicazioni Industriali ) e <b>Dipartimento di Chimica</b> (36 mesi)	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'

<b>Gen 2010 - Nov 2010</b>	<b>Assegno di Ricerca di tipo B - UNIMI Centro CISI</b> Supervisor: Prof. L. Belvisi (11 mesi)	Sviluppo di peptidi lantibiotici per il progetto 'Metodi computazionali per la delucidazione della struttura di nuovi antibiotici' (Regione Lombardia, Metadistretti. 2008 ID 5181.)
<b>Ott 2009 – Dic 2009</b>	<b>Ricercatore a progetto (Co. Co. Co) CISI srl</b> (3 mesi)	'Milano crea impresa: la rete degli incubatori della città di Milano'.
<b>Nov 2008 - Set 2009</b>	<b>Ricercatore a progetto (Co. Co. Co) - UNIMI Centro CISI</b> Supervisor Prof. C. Gennari (11 mesi)	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)
<b>Ott 2005 - Ott 2008</b>	<b>Ricercatore a progetto (Co. Co. Co) - UNIMI Centro CISI</b> Supervisor Prof. C. Scolastico (36 mesi)	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.

## ALLONTANAMENTO NON VOLONTARIO DALL'ATTIVITA' DI RICERCA

---

Luglio 2012 - Novembre 2012 (5 mesi)	Astensione dal lavoro per maternità
Agosto 2015 – Febbraio 2016 + Luglio 2016 (8 mesi)	Astensione dal lavoro per maternità.

## TITOLI DI STUDIO E FORMAZIONE

---

<b>6 Apr 2018 - 6 Apr 2024</b>	<b>Abilitazione Scientifica Nazionale Professore di II Fascia</b>	Settore concorsuale - 03/C1 Chimica Organica (ssd CHIM/06 Chimica organica)
<b>2002-2005</b>	<b>Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche XVIII ciclo</b> Università degli studi di Milano (UNIMI) Dipartimento di Chimica Fisica ed Elettrochimica  Supervisor: Prof. M. Sironi e Prof. 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'
<b>1996-2002</b>	<b>Laurea in Chimica (V.O.)</b> – Università degli Studi di Milano. Votazione: 110/110 e lode  Relatore: Prof. M. Sironi e Prof. S. L. Fornili	Tesi: 'Simulazioni di Dinamica Molecolare di soluzioni acquose di N,N,N-trimetilglicina'

## COMPETENZE

---

- Solida 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 nello studio della reattività chimica e calcoli *ab initio* di stati di transizione
- Esperienza nell'installazione di software per la modellistica molecolare
- Utente esperto di Sistemi Operativi Linux

## ATTIVITA' DIDATTICA

---

### Lezioni frontali

**2020-2021**    **'Banche dati ed elementi di chemoinformatica' SSD-CHIM/06 6 CFU**  
**Laurea in Scienze chimiche (Classe LM-54) 48 ore, 6CFU**

**2019-2020**    **'Banche dati ed elementi di chemoinformatica' SSD-CHIM/06 6 CFU**  
**Laurea in Scienze chimiche (Classe LM-54) 48 ore, 6CFU**

**2019-2020**    **'Chemoinformatics and Molecular Modelling: a drug design oriented introduction**  
**Corso di Dottorato in Chimica Industriale (2 ore)**

### Co-docenza ai Laboratori didattici

**2020-2021**       Laboratorio di Chimica Organica per il corso di laurea triennale in Chimica (**32 ore**)

**2019-2020**       Laboratorio di Chimica Organica per il corso di laurea triennale in Chimica (**32 ore**)

**2018-2019**       Laboratori di Chimica Organica per il corso di laurea triennale in Chimica (**50 ore**)

### Supervisione di assegni di ricerca

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

### 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** Correlatore di tre tesi Magistrali in: Molecular Biotechnology and Bioinformatics, UNIMI (A. Sala, aa 2017-2018) in Scienze Chimiche, UNIMI (D. Guzzetti, aa 2018-2019, F. Giacomelli, aa 2019-2020); 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)

- |                  |   |
|------------------|---|
| <b>2016-2017</b> | <ul style="list-style-type: none"><li>• Dipartimento di Bioscienze (UNIMI), Chimica organica e Laboratorio di Chimica – 1° anno del corso di Laurea Triennale in Scienze Biologiche, <b>26 ore</b></li><li>• Dipartimento di Chimica (UNIMI), corso di aggiornamento per insegnanti di scuola superiore "Chimica su PC" (Progetto Lauree Scientifiche, PLS), <b>18 ore</b></li></ul>  |
| <b>2017-2018</b> | <ul style="list-style-type: none"><li>• Dipartimento di Bioscienze (UNIMI), Chimica organica e Laboratorio di Chimica – 1° anno del corso di Laurea Triennale in Scienze Biologiche, <b>20 ore</b></li><li>• Dipartimento di Chimica (UNIMI), corso di aggiornamento per insegnanti di scuola superiore "Chimica su PC" (PLS), <b>18 ore</b></li><li>• Dipartimento di Chimica (UNIMI), assistenza ai laboratori di Chimica organica per gli studenti delle scuole superiori (alternanza scuola/lavoro per la "Summer School" PLS), <b>20 ore</b></li></ul> |

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).

#### **FINANZIAMENTI OTTENUTI**

---

**2010-2014** **FIRB 'Futuro in ricerca 2008'** RBF088ITV 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 **costo totale progetto 317,000 euro**

#### **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), punteggio 87/100

**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

**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.

## **PARTECIPAZIONE e COLLABORAZIONE ad altri PROGETTI NAZIONALI e INTERNAZIONALI**

---

Ho svolto attività di ricerca all'interno dei seguenti progetti

- **ERC Starting Grant**, ERACHRON: 'Eradicating Chronic Infections', 1/02/2018-31/07/2023, grant agreement n. 758108, 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

## **COLLABORAZIONI scientifiche** *[numero di articoli congiunti pubblicati]*

---

- **Università degli Studi di Milano**
  - **Prof. Sattin**, Dipartimento di Chimica: sviluppo di nuove molecole capaci di inibire la formazione di "batteri persistenti" [1 submitted]
  - **Prof. A. Bernardi**, Dipartimento di Chimica: studio dell'interazione tra glicomimetici e lectine [1]
  - **Prof. L. Belvisi e F. Vasile**, Dipartimento di Chimica: studio conformazionale e caratterizzazione dell'interazione di peptidomimetici con proteine di membrana (integrine e caderine) [25 + 1 submitted]
  - **Prof. C. Gennari e Prof. L. Pignataro**, Dipartimento di Chimica: sintesi, caratterizzazione conformazionale di peptidomimetici per le integrine e studio della loro interazione [8] e studio della reattività di intermedi catalitici [3]
  - **Prof. G. Tiana**, Dipartimento di Fisica: sviluppo di nuovi metodi per l'identificazione della conformazione di piccole molecole in soluzione [1]
- **Prof. A. Silipo, Università degli Studi di Napoli Federico II, Dipartimento di Scienze chimiche**: studio dell'interazione di glicomimetici con alcune siglects (1 articolo 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]

- **Dr. D. Arosio, CNR-ISTM (Milano):** sintesi e caratterizzazione dell'interazione biologica di ligandi per le integrine, [7]
- **Prof. U. Piarulli, Università degli Studi dell'Insubria, Dipartimento di Scienza e Alta Tecnologia:** sintesi, caratterizzazione conformazionale di peptidomimetici per le integrine e caderine, studio della loro interazione, [13 + 1 submitted]
- **Prof. A. Tolomelli, Dr. D. Giacomini, Università di Bologna, Dipartimento di Chimica 'Giacomo Ciamician':** sintesi di ligandi per le integrine e studio della loro interazione, [5]
- **Prof. F. Gervasio, University College London:** studi di Metadinamica delle conformazioni della E-caderina in soluzione [1]
- **Prof. G. Colombo, Università di Pavia, Dipartimento di Chimica:** studio dei cambi conformazionali dell'integrina  $\alpha\beta3$ , [2]

## 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 su invito

- 'Modeling the pre-catalytic binding site of Rel<sub>Seq</sub>' workshop '**New Approaches in Molecular Modeling**', Milano 13 Settembre 2019
- '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, 16-20 Luglio 2018

### 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

### Selezione di Comunicazioni Poster

- **21<sup>st</sup> European Symposium of Organic Chemistry (ESOC 2019)**, Vienna, 24-18 Luglio 2019.  
*A chimera model of Rel<sub>Seq</sub> 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

## INDICATORI BIBLIOMETRICI

---

ORCID: 0000-0001-5171-1062

Numero di pubblicazioni: 34

- NUMERO TOTALE DELLE CITAZIONI: **639 (Scopus, fino al 9 Settembre 2020)**
- NUMERO MEDIO DI CITAZIONI PER PUBBLICAZIONE (Citazioni totali/ 34) = **18.79**
- IF totale (**JCR 2019**) = **144.69**
- IF medio (IF totale / 34) = **4.26**
- h index: **16 (Scopus)**

## PUBBLICAZIONI (*Lista completa*)

---

In preparazione

- **Homology model of a catalytically competent bifunctional Rel protein**  
[M. Civera](#) and S. Sattin (submitted)
- **Cyclic RGD and isoDGR integrin ligands containing cis-2-amino-1-cyclopentanecarboxylic (cis- $\beta$ -ACPC) scaffolds**  
S. Panzeri, D. Arosio, S. Gazzola, L. Belvisi, [M. Civera](#), D. Potenza, F. Vasile, I. Kemker, T. Ertl, N. Sewald, O. Reiser and U. Piarulli (submitted)
- **Glycosylated sialoglycans behavior into murine and human CD22 binding pockets**  
C. Di Carluccio, R. E. Forgione, M. Montefiori, [M. Civera](#), S. Sattin, G. Smaldone, K. Fukase, Y. Manabe, P.R. Crocker, A. Molinaro, R. Marchetti, A. Silipo

Pubblicate

Le pubblicazioni come Corresponding Author sono contrassegnate con un asterisco \*

1. **Side chain effect in the modulation of  $\alpha v\beta 3/\alpha 5\beta 1$  integrin activity via clickable isoxazoline-RGD-mimetics: development of molecular delivery systems**  
L. Ferrazzano, D. Corbisiero, D. Potenza, M. Baiula, S. Dattoli, S. Spampinato, L. Belvisi, [M. Civera](#), A. Tolomelli, *Sci Rep*, **2020**, 10, 7410.  
doi:10.1038/s41598-020-64396-4, **IF<sub>2019</sub> = 3.99**
2. **Bromine-promoted glycosidation of conformationally superarmed thioglycosides**  
M. Panza, [M. Civera](#), J.P. Yasomanee, L. Belvisi, A.V. Demchenko, *Chem. Eur.J.*, **2019**, 25, 11831-11836  
doi: 10.1002/chem.201901969, **IF<sub>2019</sub> = 4.86**
3. **Exploring E-cadherin-peptidomimetics interaction using NMR and computational studies**  
[M. Civera\\*](#), F. Vasile, D. Potenza, C. Colombo, S. Parente, C. Vettrino, T. Prosdoci, E. Parisini, L. Belvisi, *PLoS Comput Biol*, **2019**, 15 (6): e1007041  
doi: 10.1371/journal.pcbi.1007041, **IF<sub>2019</sub> = 4.70**
4. **The Importance of Detail: How Differences in Ligand Structures Determine Distinct Functional Responses in Integrin  $\alpha v\beta 3$ .**  
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<sub>2019</sub> = 4.86**
5. **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<sub>2019</sub> = 4.86**
6. **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<sub>2019</sub> = 6.13**
7. **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<sub>2019</sub> = 4.70**
8. **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<sub>2019</sub> = 2.37**
9. **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<sub>2019</sub> = 2.86**
10. **New  $\beta$ -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  $\beta$ -Lactam Derivatives, *J. Med. Chem.*, **2016** 59 (21), 9721-9742  
doi: 10.1021/acs.jmedchem.6b00576, **IF<sub>2019</sub> = 6.21**



11. **New potent  $\alpha v \beta 3$  integrin ligands based on azabicycloalkane ( $\gamma, \alpha$ )-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<sub>2019</sub> = 3.41
12. **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<sub>2019</sub> = 6.21
13. **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<sub>2019</sub> = 5.01
14. **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<sub>2019</sub> = 3.41
15. **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<sub>2019</sub> = 3.41
16. **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<sub>2019</sub> = 4.86
17. **Modulation of  $\alpha v \beta 3$ - and  $\alpha 5 \beta 1$ -integrin-mediated adhesion by dehydro- $\beta$ -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<sub>2019</sub> = 5.57
18. **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<sub>2019</sub> = 3.07
19. **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<sub>2019</sub> = 4.86
20. **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<sub>2019</sub> = 3.12**

21. **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<sub>2019</sub> = 4.86**

22. **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<sub>2019</sub> = 2.58**

23. **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  
doi: 10.1002/cmdc.201100372, **IF<sub>2019</sub> = 3.12**

24. **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<sub>2019</sub> = 2.89**

25. **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<sub>2019</sub> = 2.28**

26. **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<sub>2019</sub> = 12.96**

27. **Antiangiogenic Effect of Dual/Selective  $\alpha$ 5 $\beta$ 1/ $\alpha$ 5 $\beta$ 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<sub>2019</sub> = 6.21**

28. **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<sub>2019</sub> = 3.12**

29. **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<sub>2019</sub> = 4.86**

30. **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<sub>2019</sub> = 4.34**
31. **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<sub>2019</sub> = 1.50**
32. **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<sub>2019</sub> = 2.03**
33. **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<sub>2019</sub> = 2.03**
34. 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<sub>2019</sub> = 3.43**

## INFORMAZIONI ADDIZIONALI

---

### 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 (Rivista pubblicata bimestralmente)

### Attività Terza Missione

- **2017-2018:** tutoraggio per il corso di aggiornamento rivolto agli insegnanti della scuola superiore (PLS "Chimica su PC") **36 ore**
- **2018-2019:** assistenza ai laboratori di Chimica Organica agli studenti delle superiori all'interno del progetto alternanza scuola/lavoro (PLS, "Summer School") **30 ore**

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

**Data**

**09/09/2020**

**Luogo**

**Milano**