

**CURRICULUM
ATTIVITA' DIDATTICA
E SCIENTIFICA**



INFORMAZIONI PERSONALI

Nome **LAURA LEGNANI**

E-mail laura.legnani@unimib.it

Nazionalità ITALIANA

Data di nascita 9 MARZO 1981

ESPERIENZE LAVORATIVE

2022-oggi Dal 1 febbraio 2022 al oggi Ricercatore a tempo determinato (Legge 240/2010, art. 24, comma 3, lett. B) presso il Dipartimento di Biotecnologie e Bioscienze dell'Università degli Studi di Milano Bicocca.

2018-2021 Dal 5 giugno 2018 al 4 giugno 2021 Ricercatore a tempo determinato (Legge 240/2010, art. 24, comma 3, lett. A) presso il Dipartimento di Scienze del Farmaco dell'Università degli Studi di Catania.
Da maggio 2019 ad oggi attività di ricerca per l'approfondimento dell'uso di approcci computazionali a problemi di Medicinal Chemistry presso il laboratorio di Metodologie Computazionali del Prof. Giovanni Grazioso del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche "P. Pratesi" dell'Università degli Studi di Milano.

2017-2018 Assegnista di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Pavia, per la collaborazione ad un progetto di ricerca, finanziato dalla Fondazione Cariplo (2015-1272), dal titolo: "Studio computazionale della stabilità di sistemi titanocenici" responsabile del progetto di ricerca: Dott. Alessio Porta.

2016-2017 Borsa di ricerca presso il Dipartimento di Scienze del Farmaco dell'Università degli Studi di Catania, per la collaborazione ad un progetto di ricerca dal titolo: "Studio meccanicistico di reazioni pericicliche con procedure computazionali", responsabile del progetto di ricerca: Prof. Ugo Chiacchio.

2014-2016 Borsa di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Pavia, nell'ambito del progetto PRIN 2010 "Multinanoita", responsabile del progetto di ricerca: Prof. Lucio Toma.
Congedo di maternità dal 29/07/2015 al 29/12/2015

2013-2014 Assegnista di ricerca presso il Dipartimento di Biotecnologie Mediche e Medicina Traslazionale dell'Università degli Studi di Milano, per la collaborazione ad un progetto di ricerca, finanziato dalla Fondazione Cariplo, dal titolo: "Nuovi inibitori della proteina chinasi Akt a potenziale attività antitumorale", responsabile del progetto di ricerca: Prof. Diego Colombo.

Congedo di maternità dal 01/05/2013 al 01/10/2013

2011-2012 Collaboratore alla ricerca per la Società Prodest presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Pavia nell'ambito dell'iniziativa "Lombardia Eccellente-Cluster di eccellenza per le sinergie tra produzione agroalimentare e ricerca medico-scientifica".

2010-2011 Assegnista di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Pavia, per la collaborazione ad un progetto di ricerca (nell'ambito del progetto di ricerca PRIN 2008 "Un approccio a nuovi vaccini saccaridici: sintesi, modeling e valutazione immunologica di analoghi zwitterionici di frammenti di polisaccaridi batterici"), responsabile del progetto di ricerca: Prof. Lucio Toma.

2009-2010 Responsabile di un progetto di ricerca di durata annuale dal titolo "Anti HIV CCR5 Antagonists: Modeling of Vicriviroc and Maraviroc Analogues", presso il Dipartimento di Chimica Organica dell'Università degli Studi di Pavia, in qualità di vincitrice di uno dei finanziamenti assegnati dall'Università degli Studi di Pavia nell'ambito del Bando di Ateneo "Dottori di ricerca e mondo del lavoro-Anno 2009".

Ho approfondito l'applicazione degli approcci computazionali a problemi di Medicinal Chemistry presso il laboratorio di Metodologie Computazionali del Dott. Giovanni Grazioso del Dipartimento di Scienze Farmaceutiche "P. Pratesi" dell'Università degli Studi di Milano. Nel corso di questo periodo mi sono dedicata in particolare a simulazioni di dinamica molecolare, sfruttando il pacchetto AMBER e a studi di docking con il programma Gold. Ho inoltre acquisito familiarità con altri programmi abitualmente utilizzati nell'ambito della chimica computazionale (VMD, Molden, Sybyl, Pymol).

2008-2009 Assegnista di ricerca presso il Dipartimento di Chimica Organica dell'Università degli Studi di Pavia, per la collaborazione ad un progetto di ricerca dal titolo: "Studi modellistici di composti bioattivi a base diaza-mono e biciclica", responsabile del progetto di ricerca: Prof. Lucio Toma.

• Principali mansioni e responsabilità

L'attività scientifica della Dott.ssa Legnani si è incentrata sulla realizzazione di studi di modellistica molecolare per la predizione delle strutture tridimensionali di molecole bioattive.

La trasmissione di messaggi e, più in generale, tutte le interazioni che avvengono all'interno degli organismi viventi sono infatti governate dal riconoscimento delle strutture tridimensionali specifiche di ogni singola molecola. E' quindi necessario disporre in primo luogo dei composti in esame, per poi valutare la correlazione esistente tra la conformazione di un composto e la sua attività biologica e/o farmacologica. Gli studi eseguiti hanno permesso di determinare o di ipotizzare sia le conformazioni accessibili di composti bioattivi, sia le loro proprietà molecolari, in modo da correlare tali parametri con l'attività che, sulla base dei risultati di modellistica, può, in un secondo momento, essere ottimizzata mediante la progettazione e la sintesi di nuove molecole. La ricerca, pur avendo riguardato principalmente alcune strutture di tipo saccaridico, è stata comunque rivolta verso composti appartenenti a numerose altre famiglie di biomolecole. Nell'ultimo periodo l'attività di ricerca si è incentrata anche sullo studio meccanicistico di reazioni organiche.

L'attività svolta ha richiesto sempre coordinazione e stretta collaborazione con differenti gruppi di ricerca, appartenenti ad altre università italiane ed estere.

La Dott.ssa Legnani ha maturato esperienza didattica, in qualità di esercitatore e tenendo diversi seminari nell'ambito della Chimica Organica e della Medicinal Chemistry per i corsi di Laurea in Chimica, Scienze Biologiche e Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, oltre che come correlatore di diverse tesi di laurea triennali e magistrali. Presso l'università di Catania è stata docente dell'insegnamento di Metodi Fisici in Chimica Organica per il III anno di CTF presso l'Università degli Studi di Catania.

**ATTIVITÀ DIDATTICA IN
UNIVERSITÀ**

a.a. 2018-2021

Incarico di docenza per il corso di Metodi Fisici in Chimica Organica (III anno, Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche, Università degli Studi di Catania), 8 CFU (Lezioni frontali (6CFU) ed esercitazioni in aula (2 CFU)).

a.a. 2017-2018

Seminari didattici di Chimica Organica per il corso di laurea in Scienze Biologiche dell'Università di Pavia in collaborazione con il Prof. Lucio Toma

Correlatrice di una tesi di laurea magistrale in Chimica dal titolo "Studio computazionale della

reazione di ossidazione della 2-metilisossazolidina con Rutenio Tetrossido: meccanismo, selettività, confronto con i dati sperimentali” Relatore: Prof. Lucio Toma (Dip. di Chimica, Università degli Studi di Pavia).

- a.a. 2016-2017
Seminari didattici di Chimica Organica per il corso di laurea in Scienze Biologiche (16 ore) e Scienze Chimiche (10 ore) dell'Università di Pavia in collaborazione con il Prof. Lucio Toma
Seminario dal titolo “Studio modellistico di complessi legante/anione” svolto il 16 maggio 2017, nell'ambito del corso di “Chimica Supramolecolare” della Prof. Valeria Amendola, Università degli Studi di Milano, Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.
Ciclo di lezioni di Chimica Organica tenute nell'ambito delle attività didattiche del corso di dottorato di Ricerca Internazionale in “Basic & Applied Biomedical Sciences” dell'Università degli Studi di Catania.
Correlatrice di una tesi di laurea magistrale in Chimica dal titolo “Semi(tio)carbazoni basati su Julolidina come recettori per anioni” Relatore: Prof. Valeria Amendola (Dip. di Chimica, Università degli Studi di Pavia).
- a.a. 2015-2016
Seminari didattici di Chimica Organica per il corso di laurea in Scienze Biologiche e Scienze Chimiche dell'Università di Pavia in collaborazione con il Prof. Lucio Toma, di Scienze Naturali in collaborazione con il Prof. Giovanni Vidari.
Correlatrice di una tesi di laurea in Chimica dal titolo “Studio modellistico dell'unità monomerica di un tioureidocalix[4]arene, scaffold per la presentazione multivalente della β -acetilmannosamina” Relatore: Prof. Lucio Toma (Dip. di Chimica, Università degli Studi di Pavia).
Correlatrice di una tesi di laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche dal titolo “Cicloaddizione 1,3-dipolare tra 2-benzil-3-(2-morfolino-2-ossoetilidene)isoindolin-1-one e N-benzilnitrona” Relatore: Dott.ssa Maria Assunta Chiacchio (Dip. di Scienze del Farmaco, Università degli Studi di Catania).
- a.a. 2012-2013
Correlatrice di una tesi di laurea magistrale in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche dal titolo “Conformational Studies of Novel Sigma Ligands” Relatore: Prof.ssa Simona Collina (Dip. di Scienze del Farmaco, Università degli Studi di Pavia).
Seminari didattici di Chimica Organica per il corso di laurea in Scienze Biologiche e Scienze Chimiche dell'Università di Pavia in collaborazione con il Prof. Lucio Toma .
- a.a. 2011-2012
Correlatrice di una tesi di laurea magistrale in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche dal titolo “CCR5 co-receptor antagonists: design, modeling studies and synthesis of Vicriviroc analogues as potential HIV-1 entry inhibitors” Relatore: Dott.ssa Stefania Villa (Dip. di Scienze Farmaceutiche “Pietro Pratesi”, Università degli Studi di Milano).
Seminari didattici di Chimica Organica (7 ore) per il corso di laurea in Chimica dell'Università di Pavia, in collaborazione con il Prof. Remo Gandolfi.
Seminario dal titolo “Tweedledum e Tweedledee: in viaggio con Alice nel paese della realtà... attraverso la terza dimensione” svolto il 6 marzo 2012, nell'ambito del corso di “Chimica farmaceutica I” della Prof. Daniela Barlocco, Università degli Studi di Milano, Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.
Due seminari dal titolo “Modeling studies in Organic Chemistry” svolti nei giorni 8 e 16 maggio 2012, nell'ambito del corso di “Metodologie Avanzate in Chimica Farmaceutica – mod. 2” del Prof. Carlo De Micheli, Università degli Studi di Milano, Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.
- a.a. 2009-2012
Cultore della materia di chimica organica (CHIM/06) della Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali e membro della commissione per gli esami di Chimica Biorganica del Corso di Laurea in Biotecnologie e di Chimica Organica del Corso di Laurea in Scienze Biologiche.
- a.a. 2010-2011
Seminario dal titolo “Modeling studies in Organic Chemistry” svolto il 2 maggio 2011, nell'ambito del corso di “Metodologie Avanzate in Chimica Farmaceutica – mod. 2” del Prof. Carlo De Micheli, Università degli Studi di Milano, Corso di Laurea in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche.
Correlatrice di una tesi di laurea magistrale in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche dal titolo “Progettazione, sintesi e studi conformazionali di nuovi potenziali inibitori dell'entrata dell'HIV1”, Relatore: Dott.ssa Stefania Villa (Dip. di Scienze Farmaceutiche “Pietro Pratesi”, Università degli

Studi di Milano).

Correlatrice di una tesi di laurea magistrale in Farmacia dal titolo "Development of new 3,9-diazabicyclo-[3.3.1]-nonane derivatives as potential antimalarial agents", Relatore: Dott.ssa Arianna Gelain (Dip. di Scienze Farmaceutiche "Pietro Pratesi", Università degli Studi di Milano).

Seminari didattici di Chimica Organica (6 ore) per il corso di laurea in Chimica dell'Università di Pavia, in collaborazione con il Prof. Remo Gandolfi.

Tutorati di Chimica Organica (23 ore) per il corso di laurea in Scienze Biologiche dell'Università di Pavia, in collaborazione con il Prof. Lucio Toma.

Seminari didattici di Chimica Organica (14 ore) per il corso di laurea in Scienze Biologiche dell'Università di Pavia, in collaborazione con il Prof. Lucio Toma.

- a.a. 2005-2010 Tutorati di Chimica Organica per il corso di laurea in Scienze Biologiche dell'Università di Pavia in collaborazione con il Prof. Lucio Toma per gli anni accademici 2005-2006 (30 ore), 2006-2007 (15 ore), 2007-2008 (15 ore), 2008-2009 (15 ore) e 2009-2010 (20 ore).
- a.a. 2009-2010 Correlatrice di una tesi di laurea in Biotecnologie dal titolo: "Studio modellistico del Vicriviroc: antagonista del corecettore CCR5 ad attività anti-HIV.", Relatore: Prof. Lucio Toma (Dip. di Chimica Organica, Università degli Studi di Pavia).
- a.a. 2008-2009 Tutorati di Chimica Organica per il corso di laurea in Scienze e Tecnologie per la Natura dell'Università di Pavia (20 ore) in collaborazione con il Prof. Pierpaolo Righetti.
- a.a. 2008-2009 Correlatrice di una tesi di laurea magistrale in Chimica e Tecnologia Farmaceutiche dal titolo "Progettazione, sintesi e studi conformazionali di analoghi strutturali dell'antivirale CCR5 antagonista Vicriviroc", Relatore: Dott.ssa Stefania Villa (Dip. di Scienze Farmaceutiche "Pietro Pratesi", Università degli Studi di Milano)
- a.a. 2005-2008 Seminari didattici di Chimica Organica per il corso di laurea in Scienze Biologiche dell'Università di Pavia in collaborazione con il Prof. Lucio Toma per gli anni accademici 2005-2006 (13 ore), 2006-2007 (15 ore), 2007-2008 (14 ore).
- a.a. 2006-2007 Correlatrice di una tesi di laurea in Scienze Chimiche dal titolo: "Cannabinoidi: proprietà, sintesi ed applicazioni terapeutiche", Relatore: Prof. Franca Marinone Albini (Dip. di Chimica Organica, Università degli Studi di Pavia).

CONVEGNI, CONGRESSI E SCUOLE

- 2019 Partecipazione al XVII Annual Meeting of the Pericyclic Reaction Centre tenutosi a Pavia, dal 28/11/2019 al 29/11/2019, nel corso del quale ho presentato una comunicazione orale in qualità di "invited speaker".
- 2018 Partecipazione al XXXVIII Convegno della Divisione di Chimica Organica, tenutosi a Milano, dal 09/09/2018 al 13/09/2018 nel corso del quale ho presentato una comunicazione poster (**C52**).
- 2017 Partecipazione al 4th International Workshop on Pericyclic Reactions and Synthesis of Hetero- and Carbocyclic Systems tenutosi a Milano, dal 28/06/2017 al 30/06/2017, nel corso del quale ho presentato una comunicazione orale (**OC19**).
- 2016 Partecipazione al XXXVII Convegno della Divisione di Chimica Organica, tenutosi a Venezia-Mestre, dal 18/09/2016 al 22/09/2016 nel corso del quale ho presentato una comunicazione orale (**OC48**).
- 2015 Partecipazione al 13th International Conference on Calixarenes (Calix 2015), tenutosi a Giardini Naxos, dal 05/07/2015 al 09/07/2015 nel corso del quale ho presentato una comunicazione poster (**C45**).
- 2012 Partecipazione al XXXIV Convegno della Divisione di Chimica Organica, tenutosi a Pavia, dal 10/09/2012 al 14/09/2012 nel corso del quale ho presentato una comunicazione orale (**C37**) e una comunicazione poster (**C38**). Sono stata membro del comitato organizzatore di questo convegno.

- Partecipazione al Workshop Internazionale "Neuromarks 2012", tenutosi a Pavia il 21/05/2012.
- 2011 Partecipazione al National Meeting Computationally Driven Drug Discovery, tenutosi a L'Aquila, dal 21/11/2011 al 23/11/2011 nel corso del quale ho presentato una comunicazione orale (**C30**).
- Partecipazione al 4th International Symposium on Advances in Synthetic and Medicinal Chemistry, tenutosi a San Pietroburgo, Russia, dal 21/08/2011 al 25/08/2011 nel corso del quale ho presentato due comunicazioni poster (**C27, C28**).
- 2009 Partecipazione al XIII Convegno Nazionale sulle Reazioni Pericicliche e Sintesi di Etero e Carbocicli, tenutosi a Pavia dal 17/09/09 al 18/09/09 nel corso del quale ho presentato una comunicazione orale (**C21**).
- 2009 Partecipazione al 15th European Carbohydrate Symposium, tenutosi a Vienna, Austria, dal 19/07/09 al 24/07/09 nel corso del quale ho presentato una comunicazione poster (**C20**).
- 2008 Partecipazione all' 8° Sigma Aldrich Young Chemists Symposium (S.A.Y.C.S.), tenutosi a Pesaro dal 20/10/08 al 22/10/08 nel corso del quale ho presentato una comunicazione poster (**C16**).
- 2007 Partecipazione al XXXII Corso Estivo "A.Corbella"- Seminari di Sintesi Organica, tenutosi a Gargnano sul Garda (BS), Palazzo Feltrinelli dal 18/06/07 al 22/06/07 nel corso del quale ho presentato una comunicazione poster (**C8**).
- 2006 Partecipazione al XXXI Corso Estivo "A.Corbella"- Seminari di Sintesi Organica, tenutosi a Gargnano sul Garda (BS), Palazzo Feltrinelli dal 19/06/06 al 23/06/06, per il quale ho vinto una borsa di partecipazione gratuita e nel corso del quale ho presentato una comunicazione poster (**C1**).

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

- Dal 06-12-2017 **Abilitazione Scientifica Nazionale** conseguita per il ruolo di Professore di **II Fascia** relativa al **settore concorsuale 03/C1 Chimica Organica**.
- dal 2009 Cultore della materia di chimica organica (CHIM/06) della Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali
- 2009 Diploma di dottore di ricerca in Scienze Chimiche conseguito presso l'Università degli Studi di Pavia in data 6 febbraio 2009.
- 2005-2008 Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche (XXI Ciclo, coordinatore: Prof. Maurizio Licchelli): dal 1 novembre 2005 al 31 ottobre 2008 presso il Dipartimento di Chimica Organica dell'Università degli Studi di Pavia sotto la supervisione del Prof. Lucio Toma. Titolo tesi: "Modeling studies of biomolecules and their bioactive synthetic analogues".
- 2006 Socia della Società Chimica Italiana
- 2005 Esame di abilitazione professionale superato nella sessione autunnale dell'anno 2005.
- 2005 Laurea Specialistica in Scienze Chimiche conseguita presso l'Università degli Studi di Pavia il 21/07/2005 con punti 110/110 e lode. Titolo tesi: "Studio cinetico della catalisi della reazione di Diels-Alder tra fluorobenzilidenacetilpiridina e ciclopentadiene". Relatore: Prof. Giuseppe Faita.
- 2003 Laurea in Scienze Chimiche conseguita presso l'Università degli Studi di Pavia il 22/07/2003 con punti 110/110 e lode. Titolo tesi: "Emil Fischer, il Chimico Organico del II Millennio". Relatore: Prof. Giuseppe Faita.
- 2000 Diploma di Maturità Classica conseguito presso il Liceo Ginnasio Statale "U. Foscolo" di Pavia

CAPACITÀ E COMPETENZE PERSONALI

LEADERSHIP E REFERENZE	Ho maturato un'ottima capacità di parlare in pubblico dimostrata nel corso delle numerose lezioni frontali e delle presentazioni a congressi. Il tipo di attività svolta ha richiesto sempre stretta collaborazione con gruppi di ricerca appartenenti ad altre università e questo mi ha permesso di sviluppare un'ottima capacità di coordinazione del lavoro e una chiara valutazione delle tempistiche. Sono stata inoltre in grado di creare nuovi rapporti di collaborazione.
CAPACITÀ E COMPETENZE TECNICHE	<p>Ottima capacità di utilizzo del sistema operativo Windows e delle principali applicazioni Office (Word, Excel, Powerpoint). Discreta conoscenza del sistema operativo Linux.</p> <p>Nel corso degli studi ho acquisito le conoscenze teorico-pratiche in campo chimico, approfondite durante l'internato di tesi e anche nel corso delle esperienze successive. Procedure di: work-up generale delle reazioni, cristallizzazione, distillazione, estrazione, idrogenazione, purificazione cromatografia (HPLC), spettrofotometria UV-VIS, spettroscopia IR, spettroscopia NMR.</p> <p>Ottima conoscenza del programma Gaussian e della sua interfaccia grafica GaussView.</p> <p>Utilizzo di banche dati online (Scifinder, Pubmed, Medline).</p>

Elenco completo delle pubblicazioni:

- 1- Gelain A., Bettinelli I., Barlocco D., Kwon B.M., Jeong T.S., Im K.R., **Legnani L.**, Toma L.
"Ureidopyridazine Derivatives as Acyl-CoA:cholesterol acyltransferase Inhibitors"
Sci. Pharm., **2006**, 74, 85-97.
- 2- Gelain A., Barlocco D., Kwon B.M., Jeong T.S., Im K.R., **Legnani L.**, Toma L.
"3-Heptylamino-5-Phenylpyridazine Derivatives as Analogues of Acyl-CoA:Cholesterol Acyltransferase Inhibitors Containing the N-Heptyl-N'-Arylureidic Moiety"
Arch. Pharm., **2006**, 339, 645-651.
- 3- Colombo D., Ferraboschi P., **Legnani L.**, Prestileo P., Toma L.
"A full conformational characterization of 13-ethylprogestogens through theoretical calculations and nuclear magnetic resonance spectroscopy"
J. Steroid Biochem. Mol. Biol., **2007**, 103, 163-169.
- 4- **Legnani L.**, Lunghi C., Marinone Albini F., Nativi C., Richichi B., Toma L.
"Alternative Mechanistic Paths in the Hetero-Diels-Alder Reaction of α -Oxothiones: A Theoretical Study"
Eur. J. Org. Chem., **2007**, 3547-3554.
- 5- Toma L., Di Cola E., Ienco A., **Legnani L.**, Lunghi C., Moneti G., Richichi B., Ristori S., Dell'Atti D., Nativi C.
"Synthesis, Conformational Studies, Binding Assessment and Liposome Insertion of a Thioether-Bridged Mimetic of the Antigen GM₃-Ganglioside Lactone."
ChemBioChem, **2007**, 8, 1646-1649.
- 6- Colombo D., Ferraboschi P., Grisenti P., **Legnani L.**
"Complete ¹H and ¹³C assignments of (21R) and (21S) diastereomers of argatroban"
Magn. Reson. Chem., **2008**, 46, 99-102.
- 7- Gelain A., Barlocco D., Kwon B.M., Jeong T.S., Im K.R., **Legnani L.**, Toma L.
"Biphenyl versus Phenylpyridazine Derivatives: The Role of the Heterocycle in a Series of Acyl-CoA:Cholesterol Acyl Transferase Inhibitors"
J. Med. Chem., **2008**, 51, 1474-1477.
- 8- Catelani G., D'Andrea F., Griselli A., Guazzelli L., **Legnani L.**, Toma L.
"A new stereoselective approach to a selectively protected derivative of D-pinitol and its evaluation as β -L-rhamnopyranose mimetic"
Tetrahedron Lett., **2008**, 49, 4534-4536.
- 9- **Legnani L.**, Luparia M., Zanoni G., Toma L., Vidari G.

"A Full Conformational Characterization of Natural Ionones and Irones, and 13-Alkyl Substituted α -Ionones"
Eur. J. Org. Chem., **2008**, 4755-4762.

10- Murineddu G., Murruzzu C., Curzu M.M., Chelucci G., Gotti C., Gaimarri A., **Legnani L.**, Toma L., Pinna G.A.
"Synthesis of 3,6-diazabicyclo[3.1.1]heptanes as novel ligands for neuronal nicotinic acetylcholine receptors"
Bioorg. Med. Chem. Lett., **2008**, 18, 6147-6150.

11- Legnani L.

"Theoretical studies on the reaction of a β -thiono- β -keto- β -lactone with sugar-dienophiles"
Scientifica Acta, **2008**, 2, 3-7.

12- Colombo D., Villa S., Solano, L., **Legnani, L.**, Marinone Albini F., Toma, L.
"An exhaustive conformational evaluation of the HIV-1 inhibitor BMS-378806 through theoretical calculations and nuclear magnetic resonance spectroscopy"
Eur. J. Org. Chem., **2009**, 3178-3183.

13- Altamura M., Dragoni E., Infantino A.S., **Legnani L.**, Ludbrook S.B., Menchi G., Toma L., Nativi C.
"Cyclic glycopeptidomimetics through a versatile sugar-based scaffold"
Bioorg. Med. Chem. Lett., **2009**, 19, 3841-3844.

14- Toma L., **Legnani L.**, Rencurosi A., Poletti L., Lay L., Russo G.
"Modeling of synthetic phosphono and carba analogues of *N*-acetyl- α -D-mannosamine 1-phosphate, the repeating unit of the capsular polysaccharide from *Neisseria meningitidis* serovar A"
Org. Biomol. Chem., **2009**, 7, 3734-3740.

15- Luparia M., **Legnani L.**, Porta A., Zanoni G., Toma L., Vidari G.
"Enantioselective Synthesis and Olfactory Evaluation of Bicyclic α - and γ -Ionone Derivatives: The 3D Arrangement of Key Molecular Features Relevant to the Violet Odor of Ionones"
J. Org. Chem., **2009**, 74, 7100-7110.

16- Legnani L., Ronchi S., Fallarini S., Lombardi G., Campo F., Panza L., Lay L., Poletti L., Toma L., Ronchetti F., Compostella F.
"Synthesis, molecular dynamics simulations, and biology of a carba-analogue of the trisaccharide repeating unit of *Streptococcus pneumoniae* 19F capsular polysaccharide"
Org. Biomol. Chem., **2009**, 7, 4428-4436.

17- Shin D.-S., Masciocchi D., Gelain A., Villa S., Barlocco D., Meneghetti F., Pedretti A., Han Y.-M., Han D.C., Han M.Y., Kwon B.-M., **Legnani L.**, Toma L.
"Synthesis, modeling, and crystallographic study of 3,4-disubstituted-1,2,5-oxadiazoles and evaluation of their ability to decrease STAT3 activity"
Med. Chem. Commun., **2010**, 1, 156-164.

18- Arcangeli A., Toma L., Contiero L., Crociani O., **Legnani L.**, Lunghi C., Nesti E., Moneti G., Richichi B., Nativi C.
"Stable GM₃ Lactone Mimetic Raises Antibodies Specific for the Antigens Expressed on Melanoma Cells"
Bioconjugate Chem., **2010**, 21, 1432-1438.

19- Legnani, L., Colombo D., Cocchi E., Solano, L., Villa S., Lopalco L., Asti V., Diomede L., Marinone Albini F., Toma, L.
"Modeling and spectroscopic studies of synthetic diazabicyclo analogues of the HIV-1 inhibitor BMS-378806 and evaluation of their antiviral activity"
Eur. J. Org. Chem., **2011**, 287-294.

20- Legnani L., Compostella F., Grazioso G., Marinone Albini F., Toma L.
"Molecular dynamics simulations of the *Salmonella typhi* Vi antigenic polysaccharide and effects of the introduction of a zwitterionic motif"
Org. Biomol. Chem., **2011**, 9, 5554-5559.

21- Moggio Y., **Legnani L.**, Bovio B., Memeo M. G., Quadrelli P.
"Synthesis of novel anthracene derivatives of isoxazolino-carbocyclic nucleoside analogues"
Tetrahedron, **2012**, 68, 1384-1392.

22- Savion M., Memeo M. G., Bovio B., Grazioso G., **Legnani L.**, Quadrelli P.
"Synthesis and molecular modeling of novel dihydroxycyclopentane-carbonitrile nor-nucleosides by bromonitrile oxide 1,3-dipolar cycloaddition"

Tetrahedron, **2012**, 68, 1845-1852.

23- Masciocchi D., Villa S., Meneghetti F., Pedretti A., Barlocco D., **Legnani L.**,* Toma L., Kwon B.-M., Nakano S., Asai A., Gelain A.*

“Biological and computational evaluation of an oxadiazole derivative (MD77) as a new lead for direct STAT3 inhibitors”
Med. Chem. Commun., **2012**, 3, 592-599.

24- **Legnani L.**, Colombo D., Villa S., Meneghetti F., Castellano C., Gelain A., Marinone Albini F., Toma L.

“A complete characterization of the 3D properties of the CCR5 antagonist Vicriviroc through DFT calculations, NMR spectroscopy, and X-Ray analysis”

Eur. J. Org. Chem., **2012**, 5069-5074.

25- Grazioso G., **Legnani L.**, Toma L., Ettari R., Micale N., De Micheli C.

“Mechanism of Falcipain-2 inhibition by α,β -unsaturated benzo[1,4]diazepin-2-one methyl ester”

J. Comput. Aided Mol. Des., **2012**, 26, 1035-1043.

26- Masciocchi D., Gelain A., Porta F., Meneghetti F., Pedretti A., Celentano G., Barlocco D., **Legnani L.**, Toma L., Kwon B.-M., Asai A., Villa S.

“Synthesis, structure–activity relationships and stereochemical investigations of new tricyclic pyridazinone derivatives as potential STAT3 inhibitors”

Med. Chem. Commun., **2013**, 4, 1181-1188.

27- Quadrelli P., Mella M., **Legnani L.**, Al-Saad D.

“From Cyclopentadiene to Isoxazoline-Carbocyclic Nucleosides; Synthesis of Highly Active Inhibitors of Influenza A Virus H1N1”

Eur. J. Org. Chem., **2013**, 4655-4665.

28- Ferraboschi P., Colombo D., **Legnani L.**, Toma L., Grisenti P., Vistoli G., Meneghetti F.

“Crystallographic, Spectroscopic, and Theoretical Investigation of the Efficiently Separated 21R and 21S-Diastereoisomers of Argatroban”

Chirality, **2013**, 25, 871-882.

29- Ferraboschi P., **Legnani L.**, Celasco G., Moro L., Ragonesi L., Colombo D.

“A full conformational characterization of antiandrogen cortexolone-17 α -propionate and related compounds through theoretical calculations and nuclear magnetic resonance spectroscopy”

Med. Chem. Commun., **2014**, 5, 904-914.

30- Clericuzio M., Vidari G., Cassino C., **Legnani L.**, Toma L.

“Roseic acid and Roseolactones A and B, New Furan-Cucurbitane Triterpenes from *Russula aurora* and *R. minutula* (Basidiomycota)”

Eur. J. Org. Chem., **2014**, 5462-5468.

31- Dell'Orto S., Masciocchi D., Villa S., Meneghetti F., Celentano G., Barlocco D., Colombo D., **Legnani L.**,* Toma L., Jeon Y. J., Kwon B.-M., Asai A., Gelain A.*

“Modeling, synthesis and NMR characterization of novel chimera compounds targeting STAT3”

Med. Chem. Commun., **2014**, 5, 1651-1657.

32- Gallo E., Rose E., Boitrel B., **Legnani L.**, Toma L.

“DFT conformational studies of chiral bis-binaphthyl porphyrins and their metal complexes employed as cyclopropanation catalysts”

Organometallics, **2014**, 33, 6081-6088.

33- **Legnani L.**,* Porta A., Caramella P., Toma L., Zanoni G., Vidari, G.*

“Computational mechanistic study of the Julia-Kocięński reaction”

J. Org. Chem., **2015**, 80, 3092-3100.

34- Meneghetti F., Villa S.,* Masciocchi D., Barlocco D., Toma L., Han D.-C., Kwon B.-M., Ogo N., Asai A., **Legnani L.**,* Gelain A.

“Ureido-pyridazinone Derivatives: Insights into the Structural and Conformational Properties for STAT3 Inhibition”

Eur. J. Org. Chem., **2015**, 4907-4912.

- 35- Legnani L.**, Compostella F., Sansone F., Toma L.
 “Cone Calix[4]arenes with Orientable Glycosylthioureido Groups at the Upper Rim: An In-depth Analysis of Their Symmetry Properties”
J. Org. Chem., **2015**, *80*, 7412–7418
- 36-** Gelain A., Rizzi L., **Legnani L.**, Pacini A., Spyridaki K., Karageorgos V., Liapakis G., Villa S.
 “Novel peptidomimetics related to Gonadotropin releasing hormone (GnRH)”
Med. Chem. Commun., **2015**, *6*, 1656-1665.
- 37-** Amendola V., Bergamaschi G., Boiocchi M., **Legnani L.**, Lo Presti E., Miljkovic A., Monzani E., Pancotti F.
 “Chloride-binding in organic–water mixtures: the powerful synergy of C–H donor groups within a bowl-shaped cavity”
Chem. Commun., **2016**, *52*, 10910-10913.
- 38- Legnani L.**,* Toma L., Caramella P., Chiacchio M. A., Giofrè S., Delso I., Tejero T., Merino P.*
 “Computational Mechanistic Study of Thionation of Carbonyl Compounds with Lawesson's Reagent”
J. Org. Chem., **2016**, *81*, 7733-7740.
- 39-** Carminati D. M., Intriери D., Caselli A., Le Gac S., Boitrel B., Toma L., **Legnani L.**, Gallo E.
 “Designing ‘Totem’ C2-Symmetrical Iron Porphyrin Catalysts for Stereoselective Cyclopropanations”
Chem. Eur. J., **2016**, *22*, 13599-13612.
- 40-** Toma L., **Legnani L.**, Compostella F., Giuliani M., Faroldi F., Casnati A., Sansone F.
 “Molecular Architecture and Symmetry Properties of 1,3- Alternate Calix[4]arenes with Orientable Groups at the para-Position of the Phenolic Rings”
J. Org. Chem., **2016**, *81*, 9718-9727.
- 41-** Giofrè S. V., Cirmi S., Mancuso R., Nicolò F., Lanza G., **Legnani L.**, Campisi A., Chiacchio M. A., Navarra M., Gabriele B., Romeo R.
 “Synthesis of spiro[isoidole-1,5'-isoxazolidin]3(2H)-ones as potential inhibitors of the MDM2-p53 interaction”
Beilstein J. Org. Chem., **2016**, *12*, 2793-2807.
- 42- Legnani L.**, Colombo D., Venuti A., Pastori C., Lopalco L., Toma L., Mori M., Grazioso G., Villa S.
 “Diazabicyclo Analogues of Maraviroc: Synthesis, Modeling, NMR Studies and Antiviral Activity”
Med. Chem. Commun., **2017**, *8*, 422-433.
- 43-** Catelani G., D'Andrea F., Guazzelli L., Griselli A., Testi N., Chiacchio M. A., **Legnani L.**, Toma L.
 “Synthesis and conformational analysis of a simplified inositol-model of the Streptococcus pneumoniae 19F capsular polysaccharide repeating unit”
Carbohydr. Res., **2017**, *443-444*, 29-36.
- 44-** Chiacchio M. A., **Legnani L.**,* Caramella P., Tejero T., Merino P.*
 “Pivotal Neighbouring Group Participation in Substitution vs Elimination Reactions: Computational Evidence for Ion Pairs in the Thionation of Alcohols with Lawesson's Reagent”
Eur. J. Org. Chem. **2017**, 1952–1960.
- 45-** Iannazzo D., Pistone A., Ziccarelli I., Espro C., Galvagno S., Giofrè S. V., Romeo R., Cicero N., Bua G. D., Lanza G., **Legnani L.**, Chiacchio M. A.
 “Removal of Heavy Metal Ions from Wastewaters using Dendrimers Functionalized Multi Walled Carbon Nanotubes”
Environ. Sci. Pollut. Res. **2017**, *24*, 14735-14747.
- 46-** Carminati D. M., Intriери D., Le Gac S., Roisnel T., Boitrel B., Toma L., **Legnani L.**, Gallo E.
 “Synthesis, Characterisation and Catalytic Use of Iron Porphyrin Amino Ester Conjugates”
New J. Chem., **2017**, *41*, 5950 - 5959.
- 47-** Merino P, Chiacchio M. A., **Legnani L.**, Delso I., Tejero T.
 “Introducing Topology to Assess Synchronicity of Organic Reactions. Dual Reactivity of Oximes with Alkenes as a Case Study”
Org. Chem. Front. **2017**, *4*, 1541-1554.
- 48-** Merino P, Chiacchio M. A., **Legnani L.**, Tejero T.

“BET & ELF Quantum Topological Analysis of Neutral 2-Aza-Cope Rearrangement of γ -Alkenyl Nitrones”
Molecules **2017**, *22*, 1371-1384.

49- Amendola V., Boiocchi M., Fabbrizzi L., La Cognata S., **Legnani L.**, Lo Presti E., Mangano C., Miljkovic A.
“Anion-induced isomerization of fluorescent semi(thio)carbazones”
Org. Chem. Front., **2018**, *5*, 391-397. DOI: 10.1039/C7QO00805H.

50- Villa S., **Legnani L.**, Colombo D., Gelain A., Lammi C., Bongiorno D., Ilboudo D. P., McGee K. E., Bosch J., Grazioso G.
“Structure-based Drug Design, Synthesis and Biological assays of *P. falciparum* Atg3-Atg8 Protein-Protein Interaction Inhibitors”
J. Comput. Aided Mol. Des., **2018**, *32*, 473-486. DOI: 10.1007/s10822-018-0102-5.

51- Amendola V., Miljkovic A., **Legnani L.**, Toma L., Dondi D., Lazzaroni S.
“Self-assembling of Pseudorotaxane Structures from a Dicopper(II) Molecular Cage and Dicarboxylate Axles”
Inorg. Chem., **2018**, *57*, 3540-3547. DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b02534.

52- Chiacchio, M. A.; Iannazzo, D.; Romeo, R.; Giofrè, S. V.; **Legnani, L.** *
“Pyridine and Pyrimidine Derivatives as Privileged Scaffolds in Biologically Active Agents”
Tetrahedron Symposium in Print, **2018**, *74*, 5627-5634, DOI: 10.1016/j.tet.2018.07.056

53- Murineddu G., Asproni B., Corona P., Piras S., Lazzari P., Ruiu S., Legnani L., Toma L., Pinna G.A.
“Development of Oxygen-Bridged Pyrazole-Based Structures as Cannabinoid Receptor 1 Ligands”
Molecules, **2019**, *24*, 1656-1677, DOI:10.3390/molecules24091656.

54- Chiacchio, M. A.; Legnani, L.; Campisi, A.; Bottino, P.; Lanza, G.; Iannazzo, D.; Veltri, L.; Giofrè, S. V.; Romeo, R.
“1,2,4-Oxadiazole-5-ones as analogues of tamoxifen: synthesis and biological evaluation”
Org. Biomol. Chem., **2019**, *17*, 4892-4905, DOI: 10.1039/C9OB00651F.

55- Pedrón, J. M.; Legnani, L.; Chiacchio, M. A.; Caramella, P.; Tejero, T.; Merino, P.
“Transient and intermediate carbocations in ruthenium tetroxide oxidation of saturated rings”
Beilstein J. Org. Chem., **2019**, *15*, 1552-1562.

56- Legnani, L.; Trusso Sfrassetto, G.; Pappalardo, A.; Puglisi, R.; Chiacchio, M. A.
“Supramolecular Recognition of Phosphocholine by Enzyme-Like Cavitand Receptor”
Chem. Commun., **2019**, DOI:10.1039/C9CC07577A.

57- Chiacchio, M. A.; Lanza, G.; Chiacchio, U.; Giofrè, S. V.; Romeo, R.; Iannazzo, D.; Legnani, L. *
“Oxazole-based compounds as anticancer agents”
Curr. Med. Chem., **2019**, *26*, 7337-7371, DOI: 10.2174/0929867326666181203130402

58- Legnani, L.; Trusso Sfrassetto, G.; Pappalardo, A.; Puglisi, R.; Chiacchio, M. A.
“Supramolecular Recognition of Phosphocholine by Enzyme-Like Cavitand Receptor”
Chem. Commun., **2020**, *56*, 539-542 DOI:10.1039/C9CC07577A.

59- Campisi, A.; Bonfanti, R.; Raciti, G.; Bonaventura, G.; Legnani, L.; Magro, G.; Pennisi, M.; Russo, G.; Chiacchio, M.A.; Pappalardo, F.; Parenti, R.
“Gene Silencing of Transferrin-1 Receptor as a Potential Therapeutic Target for Human Follicular and Anaplastic Thyroid Cancer”
Mol Ther Oncolytics. **2020**, *16*, 197-206, DOI: 10.1016/j.omto.2020.01.003

60- Legnani, L.; Iannazzo, D.; Pistone, A.; Celesti, C.; Giofrè, S.; Romeo, R.; Di Pietro, A.; Visalli, G.; Fresta, M.; Bottino, P.; Blanco, I.; Chiacchio, M.A.
“Functionalized polyhedral oligosilsesquioxane (POSS) based composites for bone tissue engineering: synthesis, computational and biological studies”
RSC Adv., **2020**, *10*, 11325-11334, DOI: 10.1039/d0ra01636e.

61- Chiacchio, M. A.; * Legnani, L.; * Chiacchio, U. “Recent advances on the synthesis of isoxazolidines”, chapter 7 in
“Synthetic Approaches to Nonaromatic Nitrogen Heterocycles”
2 Volume Set, Book Editor(s): Ana Maria Faisca Phillips, Print ISBN:9781119708704, Online ISBN:9781119708841,
DOI:10.1002/9781119708841, <https://doi.org/10.1002/9781119708841.ch7>, © **2021** John Wiley & Sons Ltd.

62- Pappalardo, A.; Ballistreri, F.P.; Toscano, R.M.; Chiacchio, M.A.; Legnani, L.; Grazioso, G.; Veltri, L.; Trusso Sfrassetto, G. Alkene Epoxidations Mediated by Mn-Salen Macrocyclic Catalysts. *Catalysts* **2021**, *11*, 465. <https://doi.org/10.3390/catal11040465>.

63- Morelli, L.; Legnani, L.; Ronchi, S.; Confalonieri, L.; Imperio, D.; Toma, L.; Compostella, F. 2,3-Carbamate mannosamine glycosyl donors in glycosylation reactions of diacetone-D-glucose. An experimental and theoretical study. *Carbohydrate Res.*, 2021, 509, 108421. DOI: 10.1016/j.carres.2021.108421.

64- Chiacchio, M. A.; Legnani, L.; Chiacchio, U.; Iannazzo, D. "Recent advances on the synthesis of azapane-based compounds", chapter 16 in "More synthetic approaches to nonaromatic nitrogen heterocycles" 2V Set, First Edition, Book Editor(s): Ana Maria Faisca Phillips, John Wiley & Sons Ltd. Published 2022 by John Wiley & Sons Ltd..

Legnani L. "Modeling studies of biomolecules and their bioactive synthetic analogues", Tesi Sperimentale di Dottorato di Ricerca in Scienze Chimiche, XXI ciclo, Relatore: Prof. Lucio Toma.