

**Procedura comparativa per un posto di professore universitario di ruolo di seconda fascia presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie chimiche dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata", settore concorsuale 03/A2 – settore scientifico disciplinare CHIM/02, da coprire mediante chiamata ai sensi dell'art. 18, comma 1 della legge n. 240 del 2010 - D.M. n. 364 del 2019 "Piano straordinario per la progressione di carriera dei ricercatori a tempo indeterminato in possesso dell'abilitazione scientifica nazionale". (Decreto rettorale n. 1437 del 24/07/2020, pubblicato sulla Gazzetta ufficiale – IV Serie Concorsi ed Esami n. 66 del 25/08/2020) rif. 1583.**

#### **Verbale n. 4 – Relazione finale**

La Commissione giudicatrice della procedura in premessa, nominata con Decreto rettorale n. 1879 del 3 novembre 2020 e composta da:

- Prof. Antonio Palleschi, professore di prima fascia in servizio presso l'Università di Roma "Tor Vergata";
- Prof. Debora Berti, professore di prima fascia in servizio presso l'Università di Firenze;
- Prof. Ludovico Valli professore di prima fascia in servizio presso l'Università del Salento.

per adempiere alle funzioni conferitegli, si è riunita nei seguenti giorni:

Riunione preliminare: in data 27/11/2020 alle ore 11:45 in modalità telematica.

Riunione n. 1: in data 12/01/2021 alle ore 10 in modalità telematica.

Riunione n. 2: in data 13/01/2021 alle ore 10 presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche dell'Università di Roma "Tor Vergata".

#### **Riunione preliminare**

In tale riunione la Commissione ha deliberato di affidare le funzioni di Presidente al Prof. Antonio Palleschi e quelle di Segretario alla Prof.ssa Debora Berti. Quindi, ciascun componente, preso atto della normativa concorsuale, del termine di conclusione della procedura, dell'inesistenza di istanze di ricasazione; dichiarata l'inesistenza di rapporti di parentela o affinità fino al quarto grado incluso e l'assenza di conflitti di interesse con gli altri commissari, nonché di non aver riportato condanne penali, anche con sentenza non passata in giudicato, per i reati previsti nel capo I, titolo II, del libro II del codice penale, ha stabilito di attenersi ai criteri generali di cui all'allegato n. 1, che costituisce parte integrante e sostanziale della presente relazione, per procedere alla valutazione dei titoli, dell'attività didattica e delle pubblicazioni scientifiche, facendo anche ricorso, ove possibile, a parametri riconosciuti in ambito scientifico internazionale; ha, altresì, stabilito, quanto ai lavori in collaborazione, di dover previamente determinare l'apporto del candidato e definito l'oggetto dell'accertamento della prova di idoneità didattica e delle competenze linguistiche.

#### **Riunione n. 1 - Valutazione dei titoli, dell'attività didattica e delle pubblicazioni**

Ciascun componente della Commissione, presa visione dell'elenco dei candidati, dichiarata l'inesistenza di rapporti di parentela o affinità fino al quarto grado incluso e l'insussistenza di situazioni di incompatibilità tra essi e i candidati, ai sensi degli articoli 51 e 52 del codice di procedura civile, ha effettuato l'esame dei titoli, dell'attività didattica e delle pubblicazioni scientifiche presentati dalla candidata Chiessi Ester, compilando una scheda contenente un breve profilo curricolare e formulando una valutazione collegiale sul suddetto profilo curricolare e



sull'attività scientifica, di cui all'allegato n. 2 alla presente relazione, di cui costituisce parte integrante e sostanziale.

### **Riunione n. 2 - *Accertamento dell'idoneità didattica e delle competenze linguistiche***

La Commissione, presente in parte in modalità telematica, identificata la candidata ha proceduto, all'accertamento dell'idoneità didattica e delle competenze linguistiche, formulando, sulla base dei criteri stabiliti nella riunione preliminare, al termine della prova un giudizio collegiale in merito alla stessa, di cui all'allegato 3 alla presente relazione, di cui costituisce parte integrante e sostanziale. Terminato il suddetto accertamento, la Commissione ha espresso collegialmente un giudizio finale, anch'esso riportato nel suddetto allegato 3 alla presente relazione.

La Commissione, quindi, dopo attenta e approfondita discussione, all'esito della procedura ha individuato all'unanimità dei componenti la Dott.ssa Ester Chiessi quale candidata pienamente qualificata a svolgere le funzioni didattico-scientifiche per le quali è stato emanato il bando per le seguenti motivazioni:

Il profilo curricolare complessivo della candidata è molto positivo. Ottima è anche la valutazione collegiale dell'attività di ricerca. Nella lezione svolta la candidata ha dimostrato chiarezza espositiva e padronanza dell'argomento trattato. Molto efficaci la comprensione e la capacità dialettica della lingua inglese.

A conclusione dei lavori, la Commissione ha proceduto alla stesura della presente relazione finale.

Letto, approvato e sottoscritto

Roma, 13/01/2021

LA COMMISSIONE

.....

**Procedura comparativa per un posto di professore universitario di ruolo di seconda fascia presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie chimiche dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata", settore concorsuale 03/A2 – settore scientifico disciplinare CHIM/02, da coprire mediante chiamata ai sensi dell'art. 18, comma 1 della legge n. 240 del 2010 - D.M. n. 364 del 2019 "Piano straordinario per la progressione di carriera dei ricercatori a tempo indeterminato in possesso dell'abilitazione scientifica nazionale". (Decreto rettorale n. 1437 del 24/07/2020, pubblicato sulla Gazzetta ufficiale – IV Serie Concorsi ed Esami n. 66 del 25/08/2020) rif. 1583.**

Relazione finale - Allegato n. 1

La Commissione, coerentemente a quanto riportato nel decreto rettorale di indizione della procedura comparativa, determina i seguenti criteri di valutazione (<sup>1</sup>):

A) per quanto riguarda l'attività scientifica e didattica, nonché i servizi prestati:

- I) l'attività di coordinamento e di organizzazione e partecipazione a gruppi di ricerca;
- II) l'attività didattica frontale in corsi di laurea, di laurea magistrale, di dottorato di ricerca e di master universitari, presso università italiane e straniere, nonché il coordinamento di iniziative in campo didattico svolte in ambito nazionale e internazionale,
- III) partecipazione a progetti di ricerca nazionali e internazionali ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedano la revisione tra pari;
- IV) conseguimento di premi e riconoscimenti per l'attività scientifica.

B) per quanto riguarda i lavori in collaborazione con i commissari o con i terzi:

- l'autore di riferimento della pubblicazione,
- l'ordine di elencazione ed il numero dei coautori,
- il carattere non episodico della collaborazione scientifica ossia la continuità temporale della produzione scientifica in relazione anche alla evoluzione delle conoscenze nello specifico settore scientifico-disciplinare.

C) per quanto riguarda la produzione scientifica del candidato, da effettuarsi previa individuazione dell'apporto individuale nei lavori in collaborazione:

- I) originalità e innovatività della produzione scientifica e rigore metodologico;
- II) qualità della produzione scientifica, valutata all'interno del panorama internazionale della ricerca, secondo originalità, rigore metodologico e carattere innovativo;
- III) congruenza dell'attività del candidato con le discipline comprese nel settore concorsuale e nei settori scientifico-disciplinari ad esso più pertinenti con particolare riferimento alle pubblicazioni apparse negli ultimi anni;
- IV) rilevanza scientifica della collocazione editoriale delle pubblicazioni scientifiche in riviste internazionali che utilizzino il sistema di revisione tra pari e loro diffusione all'interno della comunità scientifica;
- V) continuità temporale della produzione scientifica, anche in relazione all'evoluzione delle conoscenze dello specifico settore scientifico disciplinare;
- VI) impatto della produzione scientifica complessiva valutato anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici;

---



VII) apporto individuale e coerenza delle pubblicazioni in collaborazione

D) per quanto riguarda la prova di idoneità didattica, che verrà effettuata mediante una lezione per studenti della laurea triennale in Chimica:

- I) conoscenza del tema;
- II) capacità di inquadramento sistematico;
- III) ampiezza e qualità delle argomentazioni;
- IV) chiarezza, completezza ed efficacia nell'esposizione.

E) per quanto riguarda l'accertamento della conoscenza della lingua straniera per i candidati italiani e di quella italiana per i candidati stranieri, che verrà effettuata mediante lettura e traduzione di un brano:

- I) chiarezza ed efficacia nella comprensione e nell'esposizione;
- II) capacità dialettica.

Il presente allegato costituisce parte integrante e sostanziale del verbale n. 1 cui si riferisce

LA COMMISSIONE

Il Presidente  
Prof. Antonio Palleschi



Il presente allegato costituisce parte integrante e sostanziale della Relazione finale cui si riferisce.

Procedura comparativa per un posto di professore universitario di ruolo di seconda fascia presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie chimiche dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata", settore concorsuale 03/A2 – settore scientifico disciplinare CHIM/02, da coprire mediante chiamata ai sensi dell'art. 18, comma 1 della legge n. 240 del 2010 - D.M. n. 364 del 2019 "Piano straordinario per la progressione di carriera dei ricercatori a tempo indeterminato in possesso dell'abilitazione scientifica nazionale". (Decreto rettorale n. 1437 del 24/07/2020, pubblicato sulla Gazzetta ufficiale – IV Serie Concorsi ed Esami n. 66 del 25/08/2020) rif. 1583.

### Relazione finale - Allegato n. 2

#### Candidato n. 1: Ester CHIESSI

##### Breve profilo curriculare

critéri di valutazione individuati nella seduta preliminare	Titoli del candidato
attività di coordinamento e di organizzazione e partecipazione a gruppi di ricerca	<p>1987-1989: Structural characterization of bile salts assemblies in crystal and solution phases by thermodynamic, spectroscopic, X-ray diffraction and molecular modelling methods (Investigator, I, of the research group coordinated by Prof. Edoardo Giglio, University of Rome La Sapienza).</p> <p>From 05-10-1989 to 31-12-1995: Synthesis, structural characterization and reactivity of novel bio-mimetic catalysts by thermodynamic and spectroscopic methods and molecular modelling (I of the research group coordinated by Prof. Basilio Pispisa, University of Rome Tor Vergata).</p> <p>From 01-01-1996 to 31-12-1998: Investigation of catalytic activity of Glutathione Transferase enzymes by spectroscopic and stopped-flow methods (I of the research group coordinated by Prof. Giorgio Ricci, University of Rome Tor Vergata).</p> <p>From 01-06-1996 to 31-05-2002: Characterization of structural and dynamical properties of oligosaccharides, polysaccharides and polypeptide- polysaccharide complexes in aqueous solution by thermodynamic, spectroscopic and molecular modelling methods (I of the research group coordinated by Prof. Gaio Paradossi, University of Rome Tor Vergata).</p> <p>From 01-06-2001 to 31-12-2005: Characterization of structural and dynamical properties of systems based on biocompatible synthetic polymers in solution and gel phases by neutron scattering, molecular modelling and molecular dynamics simulations (I of the research group coordinated by Prof. Gaio Paradossi, University of Rome Tor Vergata).</p> <p>From 01-01-2018 to present: Structural and dynamical characterization of proteins in the amorphous state at low hydration by molecular dynamics simulations and neutron scattering experiments. I</p>





<p>attività didattica frontale in corsi di laurea, di laurea magistrale, di dottorato di ricerca e di master universitari, presso università italiane e straniere, nonché il coordinamento di iniziative in campo didattico svolte in ambito nazionale e internazionale</p>	<p><b>2019 e 2020:</b> Molecular modeling, simulation and graphics: introduction to methods and applications (corso <b>PhD School</b> in Chemical Science); Chemistry of Macromolecules (<b>4 CFU</b>, First level degree (Laurea Triennale, LT in Material Science)</p> <p><b>2017 e 2018:</b> Chemistry of Macromolecules with Lab (<b>6CFU</b>, LT in Material Science); Laboratory of Physical Chemistry (<b>6 CFU</b>, LT in Chemistry)</p> <p><b>2016; 2015; 2014; 2013; 2012; 2011</b> Laboratory of Physical Chemistry (<b>6 CFU</b>, LT in Chemistry)</p> <p><b>2009e 2010</b> Physical Chemistry with Laboratory (<b>10 CFU</b>, LT in Material Science)</p> <p><b>2009; 2007; 2006; 2005:</b> Completions of Physical Chemistry (LS (Laurea Specialistica) in Chemistry, <b>2 CFU</b>)</p> <p><b>2015; 2014 ;2013; 2012 2011; 2008; 2007; 2006; 2005; 2004; 2003; 2002:</b> Laboratory of Physical Chemistry (Degree in Material Science (vecchio ordinamento, VO); LT Material Science, <b>3 CFU</b>)</p> <p><b>1998-2015</b> Laboratory of Physical Chemistry 1 (Degree in Chemistry (VO); LT Chemistry, <b>3 CFU</b>)</p> <p><b>1996,1997,1999-2001:</b> Laboratory of Biological Physical Chemistry (Degree in Chemistry (VO))</p> <p><b>1995:</b> Physical Chemistry (Degree in Biological Science (VO))</p> <p>Relatrice di 9 tesi di laurea in Chimica o Scienza dei Materiali (triennali o magistrali) dal 2004 ad oggi</p> <p>2013-2019 Membro della Commissione Didattica Paritetica del Dipartimenti di Scienze e Tecnologie Chimiche.</p>
<p>partecipazione a progetti di ricerca nazionali e internazionali ammessi al finanziamento sulla base di bandi competitivi che prevedano la revisione tra pari</p>	<p>From 18-10-1999 to 17-10-2001: Characterization of structural properties of polysaccharide systems by molecular modelling methods (I of the research team of project <b>PRIN 1999 "Pullulani E Glucomannani: Dalla Biodiversita' All'industria"</b></p> <p>From 08-11-2004 to 07-11-2006: I of the research team of the project <b>PRIN 2004 " Processi Dinamici In Strutture Organizzate Di Sistemi Saccaridici In Solvente Acquoso"</b></p> <p>From 01-01-2006 to 31-12-2009: I of the research team of the <b>European project "Systems for in situ theranostics using microparticles triggered by ultrasound" - SIGHT</b>, 6th Framework Programme (2006 - 2009) (Scientific Coordinator: Prof. Gaio Paradossi)).</p> <p>From 22-12-2008 to 21-12-2010: I of the research team of the project <b>PRIN 2007 "Proprieta' Fisiche Di Biomatrici Nanostrutturate A Base Polimerica"</b></p> <p>From 01-01-2009 to 31-12-2011: <b>"Physical and chemical characterization of viscosupplements based on hyaluronic acid" funded by FIDIA Farmaceutici (Italy)</b>, Coordinator: Prof. Gaio Paradossi</p> <p>From 01-05-2010 to 30-04-2013: I of the research team of the <b>European Project "Three modality contrast imaging using multi-functionalised microballoons" - 3MICRON"</b>, 7th</p>



	<p>Framework Programme (2010-2013);</p> <p>From 01-10-2013 to 31-12-2018: I of the research team of the <b>European Project "Microbubbles driven multimodal imaging and theranostics- for gliomas" - TheraGlio</b> , 7th Framework Programme (2013-2018).</p> <p>From 01-01-2019 to present: I of the research team of the European Project H2020 "Acoustic Markers for Enhanced Remote Sensing of Radiation Doses - AMPHORA" (2017-2021).</p> <p>From 01-03-2017 to present: Atomistic modelling of thermoresponsive polymer microgels, as the <b>Responsible Investigator of Task 2.2</b> of the Project "Modeling microgels: from microscopic design to macroscopic description" MIMIC. Funding Body: European Research Council - ERC Consolidator Grant (2016-2021).</p> <p>2008 Studio di Dinamica Molecolare di Idrogel di HYADDTM4, un Derivato dell'Acido Ialuronico BANDO B 2007 (CASPUR) (PI)</p> <p>2009 Studio di Dinamica Molecolare di Idrogel Polimerici Termosensibili" (PI) Standard HPC Grant (CASPUR)</p> <p>2010 Simulations of Interfaces polymer MicroBalloons with Atomic Detail (SIMBAD) (PI) CINECA ISCRA ClassC</p> <p>2011 Focussing on poly(vinyl ALcohol) To test Accurate Force Fields (Falstaff) (PI) CINECA ISCRA ClassC</p> <p>2012 Solution behaviour of poly(vinyl alcohol): a molecular dynamics simulation study" (PI) Standard HPC Grant (CASPUR)</p> <p>2013 Simulation tests of Rheological Experiments in Soft Systems: STRESS PI CINECA ISCRA ClassC</p> <p>2014 "Tacticity Influence on Thermo- responsivity of poly(N-IsopropylACrylamide): TITANIC" (PI)</p> <p>2015 Surface Interactions Between poly- N-isopropylacrylamide microgels: SIBYL" (PI) CINECA ISCRA ClassC</p> <p>2016 Simulations of polymer Microgels at Low wAtER content: SIMILAR" (PI) CINECA ISCRA ClassC</p> <p>2017 Simulations of Proteins in Hydrated state: SPY" (PI) CINECA ISCRA ClassC</p> <p>2018 "ETHanol Influence on lower Critical Solution temperature behaviour of poly(n- isopropylacrylamide): ETHICS" (PI) CINECA ISCRA ClassC</p> <p>2019 APOferritin, LYSzyme and INSulin in the amorphous state at low hydration: APOLYSIN" (PI) CINECA ISCRA ClassC</p> <p>2019 In-Silico DEformation of polymer networks: ISIDE" (PI) CINECA ISCRA ClassC</p> <p>2020 Mechanical properties simulationS of polymer architectures: MUSIC" (PI) CINECA ISCRA ClassC</p>
conseguimento di premi e	Selection of the paper "On the molecular origin of the cooperative coil-to-globule transition of poly(N-

riconoscimenti per l'attività scientifica	isopropylacrylamide) in water" (Tavagnacco, L., Zaccarelli, E., Chiessi, E. (2018) Physical Chemistry Chemical Physics, 20 (15), pp. 9997-10010) as a key scientific article contributing to excellence in science and engineering research by the Advances in Engineering selection committee
autore di riferimento della pubblicazione	In tutte 12 pubblicazioni presentate ai fini della procedura comparativa, la Dott.ssa Ester Chiessi risulta prima autrice o autrice di riferimento, spesso in maniera coincidente
ordine di elencazione ed il numero dei coautori	Il numero medio di autori delle pubblicazioni presentate è 3,58. L'ordine di elencazione non appare di norma alfabetico.
carattere non episodico della collaborazione scientifica ossia la continuità temporale della produzione scientifica in relazione anche alla evoluzione delle conoscenze nello specifico settore scientifico-disciplinare	La Dott.ssa Ester Chiessi presenta una produzione scientifica continua e caratterizzata da una connotazione tematica sicuramente originale e riconoscibile. Questo consente di tracciare con estrema sicurezza il suo ruolo, nella parte di modelling e computazionale dei lavori, che riguardano diversi sistemi di soft matter di interesse applicativo, dai polimeri ai gel fino ultimamente ai microgel. Questa evoluzione tematica, pur poggiando su una base di competenze scientifiche chiaramente individuabile nella chimica fisica della soft matter, riflette in maniera indubbia l'evoluzione tematica del settore.
originalità e innovatività della produzione scientifica e rigore metodologico	I lavori presentati per la valutazione sono caratterizzati da eccellente innovatività, originalità e rigore metodologico.
qualità della produzione scientifica, valutata all'interno del panorama internazionale della ricerca, secondo originalità, rigore metodologico e carattere innovativo	La produzione scientifica della candidata, valutata nel contesto del panorama scientifico internazionale del settore di riferimento, si caratterizza per eccellente innovatività, originalità e rigore metodologico.
congruenza dell'attività del candidato con le discipline comprese nel settore concorsuale e nei settori scientifico-disciplinari ad esso più pertinenti con particolare riferimento alle pubblicazioni apparse negli ultimi anni	L'attività scientifica della candidata si colloca pienamente nel settore concorsuale oggetto del presente bando ed in particolare nel settore scientifico-disciplinare CHIM/02
rilevanza scientifica della collocazione editoriale delle pubblicazioni scientifiche in riviste internazionali che utilizzino il sistema di revisione tra pari e loro diffusione all'interno della comunità scientifica	La collocazione editoriale delle pubblicazioni scientifiche riguarda per intero riviste internazionali che utilizzano il sistema di revisione tra pari tra le più quotate nel campo della Chimica Fisica (ACS: JPhysChemB; RSC: PCCP). Si tratta delle riviste di settore della Chimica Fisica della Soft Matter della American Chemical Society e della Royal Society of Chemistry. La loro diffusione all'interno della comunità scientifica di riferimento è dunque davvero ottima e rilevante
continuità temporale della produzione scientifica,	Dal 1985 alla data di scadenza del bando, La Dott.ssa Chiessi è autrice o co-autrice di 63 pubblicazioni e di due libri con target



anche in relazione all'evoluzione delle conoscenze dello specifico settore scientifico disciplinare	didattico (problemi di Chimica Fisica). La continuità temporale è molto buona e la produttività buona.
impatto della produzione scientifica complessiva valutato anche sulla base dei principali indicatori bibliometrici	Il numero totale di citazioni dichiarato dalla candidata (1840, Fonte Scopus) implica un numero medi di citazioni per lavoro pari a 29, 21. L'h-index (25) e l'impact factor per prodotto di 3,49 sono in linea con il settore CHIM/02 e con l'ambito di ricerca scientifica della candidata.
apporto individuale e coerenza delle pubblicazioni in collaborazione	L'apporto individuale della candidata nei lavori in collaborazione è riscontrabile con estrema sicurezza. Molti dei lavori configurano una parte sperimentale ed una simulativa (MD e molecular modelling), della quale la candidata è responsabile in prima persona

La Commissione ha valutato i seguenti titoli:

### **Attività di coordinamento e di organizzazione e partecipazione a gruppi di ricerca**

- 1987-1989: Structural characterization of bile salts assemblies in crystal and solution phases by thermodynamic, spectroscopic, X-ray diffraction and molecular modelling methods (Investigator, I, of the research group coordinated by Prof. Edoardo Giglio, University of Rome La Sapienza).
- From 05-10-1989 to 31-12-1995: Synthesis, structural characterization and reactivity of novel bio-mimetic catalysts by thermodynamic and spectroscopic methods and molecular modelling (I of the research group coordinated by Prof. Basilio Pispisa, University of Rome Tor Vergata).
- From 01-01-1996 to 31-12-1998: Investigation of catalytic activity of Glutathione Transferase enzymes by spectroscopic and stopped-flow methods (I of the research group coordinated by Prof. Giorgio Ricci, University of Rome Tor Vergata).
- From 01-06-1996 to 31-05-2002: Characterization of structural and dynamical properties of oligosaccharides, polysaccharides and polypeptide- polysaccharide complexes in aqueous solution by thermodynamic, spectroscopic and molecular modelling methods (I of the research group coordinated by Prof. Gaio Paradossi, University of Rome Tor Vergata).
- From 01-06-2001 to 31-12-2005: Characterization of structural and dynamical properties of systems based on biocompatible synthetic polymers in solution and gel phases by neutron scattering, molecular modelling and molecular dynamics simulations (I of the research group coordinated by Prof. Gaio Paradossi, University of Rome Tor Vergata).
- From 01-01-2018 to present: Structural and dynamical characterization of proteins in the amorphous state at low hydration by molecular dynamics simulations and neutron scattering experiments.



## Attività didattica

- **2019 e 2020:** Molecular modeling, simulation and graphics: introduction to methods and applications (corso **PhD School** in Chemical Science); Chemistry of Macromolecules (**4 CFU**, First level degree (Laurea Triennale, LT in Material Science)
- **2017 e 2018:** Chemistry of Macromolecules with Lab (**6CFU**, LT in Material Science); Laboratory of Physical Chemistry (**6 CFU**, LT in Chemistry)
- **2016; 2015; 2014; 2013; 2012; 2011** Laboratory of Physical Chemistry (**6 CFU**, LT in Chemistry)
- **2009e 2010** Physical Chemistry with Laboratory (**10 CFU**, LT in Material Science)
- **2009; 2007; 2006; 2005:** Completions of Physical Chemistry (LS (Laurea Specialistica) in Chemistry, **2 CFU**)
- **2015; 2014 ;2013; 2012 2011; 2008; 2007; 2006; 2005; 2004; 2003; 2002:** Laboratory of Physical Chemistry (Degree in Material Science (vecchio ordinamento, VO); LT Material Science, **3 CFU**)
- **1998-2015** Laboratory of Physical Chemistry 1 (Degree in Chemistry (VO); LT Chemistry, **3 CFU**)
- **1996,1997,1999-2001:** Laboratory of Biological Physical Chemistry (Degree in Chemistry (VO))
- **1995:** Physical Chemistry (Degree in Biological Science (VO))
- **Supervisione di 9 tesi di laurea in Chimica o Scienza dei Materiali (triennali o magistrali) dal 2004 ad oggi**
- **2013-2019** Membro della Commissione Didattica Paritetica del Dipartimenti di Scienze e Tecnologie Chimiche.

## Partecipazione a progetti di ricerca nazionali e internazionali

- From 18-10-1999 to 17-10-2001: Characterization of structural properties of polysaccharide systems by molecular modelling methods (I of the research team of project **PRIN 1999 "Pullulani E Glucomannani: Dalla Biodiversita' All'industria"**)
- From 08-11-2004 to 07-11-2006: I of the research team of the project **PRIN 2004 "Processi Dinamici In Strutture Organizzate Di Sistemi Saccaridici In Solvente Acquoso"**
- From 01-01-2006 to 31-12-2009: I of the research team of the **European project "Systems for in situ theranostics using microparticles triggered by ultrasound" - SIGHT**, 6th Framework Programme (2006 - 2009) (Scientific Coordinator: Prof. Gaio Paradossi).
- From 22-12-2008 to 21-12-2010: I of the research team of the project **PRIN 2007 "Proprieta' Fisiche Di Biomatrici Nanostrutturate A Base Polimerica"**
- From 01-01-2009 to 31-12-2011: **"Physical and chemical characterization of viscosupplements based on hyaluronic acid" funded by FIDIA Farmaceutici (Italy)**, Coordinator: Prof. Gaio Paradossi
- From 01-05-2010 to 30-04-2013: I of the research team of the **European Project "Three modality contrast imaging using multi-functionalised microballoons" - 3MICRON**", 7th Framework Programme (2010-2013);



- From 01-10-2013 to 31-12-2018: I of the research team of the **European Project "Microbubbles driven multimodal imaging and theranostics- for gliomas" - TheraGlio**, 7th Framework Programme (2013-2018).
- From 01-01-2019 to present: I of the research team of the European Project H2020 "Acoustic Markers for Enhanced Remote Sensing of Radiation Doses - AMPHORA" (2017-2021).
- From 01-03-2017 to present: Atomistic modelling of thermoresponsive polymer microgels, as the **Responsible Investigator of Task 2.2** of the Project "Modeling microgels: from microscopic design to macroscopic description" MIMIC. Funding Body: European Research Council - ERC Consolidator Grant (2016-2021).
- 2008 Studio di Dinamica Molecolare di Idrogel di HYADDTM4, un Derivato dell'Acido Ialuronico BANDO B 2007 (CASPUR) (PI)
- 2009 Studio di Dinamica Molecolare di Idrogel Polimerici Termosensibili"(PI) Standard HPC Grant (CASPUR)
- 2010 Simulations of Interfaces polymer MicroBalloons with Atomic Detail (SIMBAD) (PI) CINECA ISCRA ClassC
- 2011 Focussing on poly(vinyl ALcohol) To test Accurate Force Fields (Falstaff) (PI) CINECA ISCRA ClassC
- 2012 Solution behaviour of poly(vinyl alcohol): a molecular dynamics simulation study" (PI) Standard HPC Grant (CASPUR)
- 2013 Simulation tests of Rheological Experiments in Soft Systems: STRESS PI CINECA ISCRA ClassC
- 2014 "Tacticity Influence on Thermo- responsivity of poly(N-IsopropylAcrylamide): TITANIC" (PI)
- 2015 Surface Interactions Between poly- N-isopropylacrylamide microgels: SIBYL" (PI) CINECA ISCRA ClassC
- 2016 Simulations of polymer Microgels at Low water content: SIMILAR" (PI) CINECA ISCRA ClassC
- 2017 Simulations of Proteins in Hydrated state: SPY" (PI) CINECA ISCRA ClassC
- 2018 "Ethanol Influence on lower Critical Solution temperature behaviour of poly(n-isopropylacrylamide): ETHICS" (PI) CINECA ISCRA ClassC
- 2019 APOferritin, LYsozyme and INSulin in the amorphous state at low hydration: APOLYSIN" (PI) CINECA ISCRA ClassC
- 2019 In-Silico Deformation of polymer networks: ISIDE" (PI) CINECA ISCRA ClassC
- 2020 Mechanical properties simulationS of polymer architectures: MUSIC" (PI) CINECA ISCRA ClassC

## Conseguimento di premi e riconoscimenti

Selection of the paper "On the molecular origin of the cooperative coil-to-globule transition of poly(N-isopropylacrylamide) in water" (Tavagnacco, L., Zaccarelli, E., Chiessi, E. (2018) Physical Chemistry Chemical Physics, 20 (15), pp. 9997-10010) as a key scientific article contributing to excellence in science and engineering research by the Advances in Engineering selection committee





### **e le seguenti pubblicazioni:**

- 1) Tavagnacco, L., Zaccarelli, E., Chiessi, E. Molecular description of the coil-to-globule transition of Poly(N-isopropylacrylamide) in water/ethanol mixture at low alcohol concentration (2020) Journal of Molecular Liquids, 297, art. no. 111928.
- 2) Tavagnacco, L., Chiessi, E., Zanatta, M., Orecchini, A., Zaccarelli, E. Water-polymer coupling induces a dynamical transition in microgels (2019) Journal of Physical Chemistry Letters, 10 (4), pp. 870-876
- 3) Zanatta, M., Tavagnacco, L., Buratti, E., Bertoldo, M., Natali, F., Chiessi, E., Orecchini, A., Zaccarelli, E. Evidence of a low-temperature dynamical transition in concentrated microgels (2018) Science Advances, 4 (9), art. no. aat5895
- 4) Tavagnacco, L., Zaccarelli, E., Chiessi, E. On the molecular origin of the cooperative coil-to-globule transition of poly(N- isopropylacrylamide) in water (2018) Physical Chemistry Chemical Physics, 20 (15), pp. 9997-10010
- 5) Paradossi, G., Chiessi, E. Solution behaviour of poly(N-isopropylacrylamide) stereoisomers in water: A molecular dynamics simulation study (2017) Physical Chemistry Chemical Physics, 19 (19), pp. 11892-11903
- 6) Chiessi, E., Paradossi, G. Influence of Tacticity on Hydrophobicity of Poly(N-isopropylacrylamide): A Single Chain Molecular Dynamics Simulation Study (2016) Journal of Physical Chemistry B, 120 (15), pp. 3765-3776
- 7) Tesei, G., Paradossi, G., Chiessi, E. Influence of surface concentration on poly(vinyl alcohol) behavior at the water-vacuum interface: A molecular dynamics simulation study (2014) Journal of Physical Chemistry B, 118 (24), pp. 6946-6955
- 8) Tesei, G., Paradossi, G., Chiessi, E. Poly(vinyl alcohol) oligomer in dilute aqueous solution: A comparative molecular dynamics simulation study (2012) Journal of Physical Chemistry B, 116 (33), pp. 10008-10019
- 9) Autieri, E., Chiessi, E., Lonardi, A., Paradossi, G., Sega, M. Conformation and dynamics of poly(N-isopropyl acrylamide) trimers in water: A molecular dynamics and metadynamics simulation study (2011) Journal of Physical Chemistry B, 115 (19), pp. 5827-5839
- 10) Chiessi, E., Lonardi, A., Paradossi, G. Toward modeling thermoresponsive polymer networks: A molecular dynamics simulation study of N-isopropyl acrylamide co-oligomers (2010) Journal of Physical Chemistry B, 114 (25), pp. 8301-8312



11) Chiessi, E., Cavalieri, F., Paradossi, G. Water and polymer dynamics in chemically cross-linked hydrogels of poly(vinyl alcohol): A molecular dynamics simulation study (2007) Journal of Physical Chemistry B, 111 (11), pp. 2820-2827

12) Chiessi, E., Cavalieri, F., Paradossi, G. Supercooled water in PVA matrixes. II. A molecular dynamics simulation study and comparison with QENS results (2005) Journal of Physical Chemistry B, 109 (16), pp. 8091-8096

### **Valutazione collegiale del profilo curriculare**

Dopo la laurea in Chimica e il Dottorato in Chimica presso l'Università di Roma La Sapienza, la Dott.ssa Ester Chiessi ha preso servizio dal 1989 come ricercatrice a tempo indeterminato (SSD CHIM/02) presso l'Università di Roma Tor Vergata, Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche. In questo Ateneo la candidata ha svolto intensa e continuativa attività didattica dal 1995, sempre per insegnamenti pienamente pertinenti all'SSD. E' stata relatrice di diverse tesi di laurea triennale e magistrale, membro del collegio di dottorato in scienze chimiche, oltre che componente della commissione didattica paritetica del dipartimento.

Numerosa la sua partecipazione a gruppi di ricerca, e il coinvolgimento in progetti di ricerca finanziati con processo di revisione tra pari, nei quali fornisce il suo contributo nella parte di modelling e simulazione. E' PI di circa venti progetti computazionali nazionali finanziati da CASPUR o CINECA.

La valutazione collegiale del profilo curriculare è OTTIMA.

### **Valutazione collegiale dell'attività di ricerca**

L'attività di ricerca della Dott.ssa Chiessi si colloca pienamente nell'ambito della Chimica Fisica della Soft Matter. Al centro della sua attività di ricerca sono le proprietà strutturali di macromolecole biologiche e sintetiche in soluzione acquosa ed in fase gel, sia come fasi massive che in forma dispersa come micro e nanoparticelle. Un tratto distintivo della sua attività di ricerca, che svolge applicando modelling e simulazioni, è la stretta connessione con la ricerca sperimentale, ed in particolare con metodi spettroscopici, reologici e di scattering. Questa sinergia le ha permesso di chiarire proprietà strutturali e dinamiche di sistemi polisaccaridici e di idrogel di polimeri sintetici biocompatibili. Di particolare rilevanza sono gli studi sulle caratteristiche dell'acqua e dei polimeri nei microgel, confrontate con dati di neutron scattering elastico e quasi-elastico sugli stessi sistemi.

Dall'analisi dell'attività scientifica e delle pubblicazioni emerge una personalità scientifica sicuramente matura e molto ben delineata, con un tracking scientifico preciso e riconoscibile, anche in termini di contributo individuale della candidata ai lavori in collaborazione o allo svolgimento di progetti di ricerca nella quale è inserita.

La valutazione collegiale dell'attività di ricerca è OTTIMA.

Il presente allegato costituisce parte integrante e sostanziale del verbale n. 2 cui si riferisce

LA COMMISSIONE

Il Presidente Prof. Antonio Palleschi



Il presente allegato costituisce parte integrante e sostanziale della Relazione finale cui si riferisce.



**Procedura comparativa per un posto di professore universitario di ruolo di seconda fascia presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie chimiche dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata", settore concorsuale 03/A2 – settore scientifico disciplinare CHIM/02, da coprire mediante chiamata ai sensi dell'art. 18, comma 1 della legge n. 240 del 2010 - D.M. n. 364 del 2019 "Piano straordinario per la progressione di carriera dei ricercatori a tempo indeterminato in possesso dell'abilitazione scientifica nazionale". (Decreto rettorale n. 1437 del 24/07/2020, pubblicato sulla Gazzetta ufficiale – IV Serie Concorsi ed Esami n. 66 del 25/08/2020) rif. 1583.**

### **Relazione finale - Allegato n. 3**

#### **Candidato: Chiessi Ester**

Il candidato ha svolto una lezione che con argomento : CINETICA ENZIMATICA

1. conoscenza del tema	La candidata ha dimostrato eccellente conoscenza dell'argomento
2. capacità di inquadramento sistematico	L'inquadramento sistematico è eccellente
3. ampiezza e qualità delle argomentazioni.	Eccellente l'ampiezza e qualità delle argomentazioni.
4. chiarezza, completezza ed efficacia nell'esposizione	Eccellente per chiarezza, completezza ed efficacia nell'esposizione
5. <i>chiarezza ed efficacia nella comprensione e nell'esposizione della lingua straniera</i>	L'esposizione della lingua straniera è chiara ed efficace
6. <i>capacità dialettica nella lingua straniera</i>	La capacità dialettica nella lingua straniera è efficace

### **GIUDIZIO COLLEGIALE**

La prova didattica del candidato è valutata positivamente e, pertanto, ritenuta superata con il seguente giudizio di idoneità.

La candidata ha dimostrato una eccellente conoscenza dell'argomento, che è stato inquadrato in maniera sistematica ed argomentato in maniera ampia. Veramente chiara e completa l'esposizione della lezione. Molto efficaci la comprensione della lingua inglese e la capacità dialettica della lingua straniera.



## GIUDIZI FINALI

### **Candidata: Ester Chiessi**

La commissione ha valutato attentamente il profilo curricolare ed in particolare la partecipazione a gruppi di ricerca e a progetti di ricerca, l'attività didattica e di ricerca, nonché la produzione scientifica e la sua collocazione all'interno dell'SSD e nel contesto internazionale dell'area tematica di riferimento, ritenendoli entrambi ottimi. La commissione ha altresì valutato come eccellenti a prova didattica della candidata e la conoscenza e capacità espositiva e dialettica della lingua inglese.

In base alle valutazioni sopra esposte, la commissione formula il seguente giudizio collegiale è unanime: la candidata Ester Chiessi è pienamente meritevole e qualificata per un posto di professore universitario di ruolo di seconda fascia, settore concorsuale 03/A2 – settore scientifico disciplinare CHIM/02.

Il presente allegato costituisce parte integrante e sostanziale del Verbale n. 3 cui si riferisce

LA COMMISSIONE

.....

Il presente allegato costituisce parte integrante e sostanziale della Relazione finale cui si riferisce.

LA COMMISSIONE

.....

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Bell', is written over a dotted line.

**Procedura comparativa per un posto di professore universitario di ruolo di seconda fascia presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie chimiche dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata", settore concorsuale 03/A2 – settore scientifico disciplinare CHIM/02, da coprire mediante chiamata ai sensi dell'art. 18, comma 1 della legge n. 240 del 2010 - D.M. n. 364 del 2019 "Piano straordinario per la progressione di carriera dei ricercatori a tempo indeterminato in possesso dell'abilitazione scientifica nazionale". (Decreto rettorale n. 1437 del 24/07/2020, pubblicato sulla Gazzetta ufficiale – IV Serie Concorsi ed Esami n. 66 del 25/08/2020) rif. 1583.**

#### **DICHIARAZIONE**

Il sottoscritto Prof. Debora Berti, membro della commissione giudicatrice della procedura comparativa di cui in epigrafe, dichiara con la presente di aver partecipato in modalità telematica alla riunione n. 4 – *Relazione finale* e di concordare con il verbale a firma del Prof. Antonio Palleschi, Presidente della commissione giudicatrice, redatto in data 13/01/2021 che sarà presentato al Responsabile del Procedimento per i provvedimenti di competenza.

In fede

Data 13/01/2021

Firma

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Debora Berti', with a stylized, cursive script.

Procedura comparativa per un posto di professore universitario di ruolo di seconda fascia presso il Dipartimento di Scienze e Tecnologie chimiche dell'Università degli Studi di Roma "Tor Vergata", settore concorsuale 03/A2 – settore scientifico disciplinare CHIM/02, da coprire mediante chiamata ai sensi dell'art. 18, comma 1 della legge n. 240 del 2010 - D.M. n. 364 del 2019 "Piano straordinario per la progressione di carriera dei ricercatori a tempo indeterminato in possesso dell'abilitazione scientifica nazionale". (Decreto rettorale n. 1437 del 24/07/2020, pubblicato sulla Gazzetta ufficiale – IV Serie Concorsi ed Esami n. 66 del 25/08/2020) rif. 1583.

#### DICHIARAZIONE

Il sottoscritto Prof. Ludovico Valli, membro della commissione giudicatrice della procedura comparativa di cui in epigrafe, dichiara con la presente di aver partecipato in modalità telematica alla riunione n. 4 – *Relazione finale* e di concordare con il verbale a firma del Prof. Antonio Palleschi, Presidente della commissione giudicatrice, redatto in data 13/01/2021 che sarà presentato al Responsabile del Procedimento per i provvedimenti di competenza.

In fede

Data 13/01/2021

Firma  
