

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n. \_\_\_\_ posto/i di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera a) della Legge 240/2010, per lo svolgimento di attività di ricerca vincolata su tematiche green e innovazione - DM 10 agosto 2021 n. 1062, per il settore concorsuale

\_\_\_\_ FIS03 \_\_\_\_\_ ,  
settore scientifico-disciplinare \_\_\_\_\_ 02/B2 \_\_\_\_\_  
presso il Dipartimento di \_\_\_\_\_ DIPARTIMENTO DI FISICA "ALDO  
PONTREMOLI" \_\_\_\_\_ ,  
(bando pubblicato sul sito Web d'Ateneo in data \_\_04/10\_\_\_\_) Codice concorso \_\_4867\_\_\_\_

## Ilaria Siloi

### CURRICULUM VITAE

#### INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	SILOI
NOME	ILARIA
DATA DI NASCITA	16 MARZO 1984

#### TITOLI

##### TITOLO DI STUDIO

Laurea Specialistica in Fisica 110/110 cum laude, Università di Modena e Reggio Emilia, 2010.  
Tesi: Entanglement bipartito e multipartito in anelli di spin  
SUPERVISORE: Dr. Filippo Troiani e Prof. Elisa Molinari

Laurea Triennale in Fisica, Università di Modena e Reggio Emilia, 2007.  
Tesi: Sintesi e caratterizzazione attraverso STM e XPS di strati a spessore variabile di pentacene su Cu(119)  
SUPERVISORE: Prof. Giorgio Rossi

##### TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA O EQUIVALENTI, OVVERO, PER I SETTORI INTERESSATI, DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE MEDICA O EQUIVALENTE, CONSEGUITO IN ITALIA O ALL'ESTERO

Dottorato di Ricerca in Fisica e Nanoscienze conseguito presso la Scuola di dottorato in Nano- and Physical science dell'Università di Modena e Reggio Emilia, 03/02/2014  
Tesi: Detection and chemical tailoring of entanglement in antiferromagnetic spin clusters  
SUPERVISORE: Dr. Filippo Troiani and Prof. Elisa Molinari

##### CONTRATTI DI RICERCA, ASSEGNI DI RICERCA O EQUIVALENTI

- maggio 2019 - in corso, Post dottorato  
Department of Physics and Astronomy, University of Southern California, USA  
SUPERVISORE: Prof. Rosa di Felice
- maggio 2017 - aprile 2019, Post dottorato  
Department of Physics, University of North Texas, USA  
SUPERVISORE: Prof. Marco Buongiorno Nardelli
- gennaio 2017 - aprile 2017, Post dottorato  
Turku Center for Quantum Physics, University of Turku, FI

- SUPERVISORE: Prof. Sabrina Maniscalco
- settembre 2015 - settembre 2016, Post dottorato  
Dipartimento di Scienze Fisiche, Informatiche e Matematiche, Via Campi 213/A, 41125 Modena, IT  
SUPERVISORE: Prof. Paolo Bordone
- gennaio 2014 - dicembre 2014, Post dottorato  
S3 Istituto Nanoscienze-CNR, Via Campi 213/A, 41125 Modena, IT  
SUPERVISORE: Dr. Filippo Troiani

## ATTIVITÀ DIDATTICA A LIVELLO UNIVERSITARIO IN ITALIA O ALL'ESTERO

- Attività di esercitatore per il corso di Termodinamica e Fluidi presso il dipartimento di Fisica, Informatica e Matematica dell'Università di Modena e Reggio Emilia A.A. 2010-2011 (22 ore), 2011-2012 (22 ore)
- Co-Supervisione di studenti durante il progetto di tesi della Laurea Triennale presso il dipartimento di Fisica, Informatica e Matematica dell'Università di Modena e Reggio Emilia:
  - Studio di quantum random walks di due fermioni interagenti in presenza di rumore (Miki Bonacci, Relatori e Correlatore: Prof. P. Bordone, I. Siloi, 2015)
  - Quantum walk di due bosoni con hopping a lungo raggio (Matteo Sighinolfi, Relatori e Correlatori: Prof. P. Bordone, I. Siloi, A. Beggi, 2016)
  - Quantum walks di fermioni con interazione a primi e secondi vicini (Giacomo Aldrovandi, Relatori e Correlatori: Prof. P. Bordone, A. Beggi, I. Siloi, 2016)
  - Quantum walk di fermioni interagenti in presenza di diversi tipi di rumore classico (Filippo Maria Balli, Relatori e Correlatori: Prof. P. Bordone, A. Beggi, I. Siloi, 2016)
- Co-Supervisione di uno studente durante il progetto di tesi della Laurea Magistrale presso il dipartimento di Fisica, Informatica e Matematica dell'Università di Modena e Reggio Emilia:
  - Proprietà quantistiche dello stato fondamentale e dinamica di un quantum walk bidimensionale in presenza di campo magnetico (Dott. Luca Ghirardi, Relatore e Correlatori: Prof. Bordone, I. Siloi, Prof. M.G.A. Paris)
- Co-supervisione del lavoro di uno studente di dottorato a University of North Texas
- Attività di tutorato di uno studente del Corso di Laurea Triennale di Fisica (2009, 20 ore)

## DOCUMENTATA ATTIVITÀ DI FORMAZIONE O DI RICERCA PRESSO QUALIFICATI ISTITUTI ITALIANI O STRANIERI

### Visite di Ricerca:

- 1-15 ottobre 2020, S3 Istituto Nanoscienze, Programma Short Term Mobility del Consiglio Nazionale delle Ricerche, Modena (Ospite: Dr. Arrigo Calzolari)
- Marzo 2020, Department of Physics, Central Michigan University, Mount Pleasant, MI, USA (Ospite: Prof Marco Fornari)
- 18-22 luglio 2016, Department for Quantum Optics and Statistics, Physikalisches Institut, Albert-Ludwigs Universitaet Freiburg, DE (Ospite: Prof Andreas Buchleitner)
- 15-18 giugno 2016, Turku Center for Quantum Physics, Turku, FI (Ospite: Prof Sabrina Maniscalco)
- 29 gennaio - 4 marzo 2016, Turku Center For Quantum Physics, Turku, FI (Ospite: Prof Sabrina Maniscalco)
- 4-8 febbraio 2015, University of the Basque Country UPV/EHU, Bilbao, ES (Ospite: Prof. Géza Tóth)

## REALIZZAZIONE DI ATTIVITÀ PROGETTUALE

L'attività di ricerca svolta si inserisce in un contesto all'interfaccia fra la teoria dell'informazione quantistica e la materia condensata, dove i metodi della prima vengono utilizzati per migliorare la descrizione di sistemi complessi reali. Per esempio, combinando competenze analitiche e computazionali abbiamo sviluppato tecniche per rilevare le correlazioni quantistiche (entanglement) in nanomagneti molecolari, sistemi descrivibili in termini di Hamiltoniane di spin. Questo ha permesso di riconoscere diverse forme di entanglement attraverso quantità sperimentalmente accessibili e di ingegnerizzare le correlazioni introducendo opportune sostituzioni chimiche. Successivamente, attraverso tecniche di simulazione numerica, abbiamo studiato come controllare la dinamica decoerente di sistemi a più corpi interagenti (quantum walks) in presenza di rumore classico. Contestualmente, abbiamo sviluppato l'idea di quantum walks come sonde locali di campo magnetico.

L'interesse per la fisica dello stato solido e i sistemi reali mi ha portato a imparare metodologie *ab initio* e ad applicarle al caso di materiali complessi per la conversione termoelettrica. Tramite calcoli di struttura e di trasporto semiclassico abbiamo dato supporto al lavoro sperimentale nell'individuazione di materiali che coniugassero le prestazioni alla sostenibilità ambientale. Più recentemente ho combinato i precedenti due aspetti della mia attività di ricerca utilizzando i computer quantistici attualmente disponibili per risolvere problemi prototipo di interesse per scienza dei

materiali e la chimica quantistica. Un esempio è la modellizzazione tramite Hamiltoniane di Ising di superfici energetiche di sistemi dove il disordine induce competizione fra diverse fasi.

A seguire i progetti di cui mi sono occupata sono elencati con più dettaglio.

- Q4Q-Quantum Computation for Quantum Prediction of Materials and Molecular Properties (2019-oggi)

Il progetto si propone di utilizzare le piattaforme di computazione quantistica (quantum annealing e gate computation) attualmente disponibili sul cloud per affrontare problemi prototipici della chimica quantistica e della fisica dei materiali. Uno di questi è l'esplorazione di superfici energetiche al fine di individuare fasi stabili e metastabili. A partire da una rappresentazione del cristallo in termini di network, abbiamo sviluppato modelli alla Ising in cui la competizione fra le diverse fasi di un sistema in presenza di disordine viene ricondotta a un problema di ottimizzazione. In tale contesto il quantum annealer viene utilizzato per accedere alle differenti strutture, quindi come generatore di modelli strutturali. Nel campo della chimica quantistica, siamo interessati al calcolo di stati elettronici molecolari e all'implementazione sulle piattaforme di gate computing disponibili (IBM Quantum Experience e Rigetti) utilizzando algoritmi quantistici variazionali per il calcolo dello stato fondamentale e relative proprietà. COLLABORAZIONI: Prof. Marco Fornari, Dr. Arrigo Calzolari. METODI: quantum annealing, simulated annealing, algoritmi variazionali quantistici, software di chimica quantistica, D-Wave (Ocean sdk), IBM Quantum Experience (Qiskit).

*Pubblicazioni: 15,16*

- Minerali naturali come promettenti materiali termoelettrici (2017-2019)

La produzione su larga scala di dispositivi termoelettrici richiede la progettazione di nuovi materiali che non solo mostrino prestazioni elevate, ma siano a basso costo e facilmente reperibili in natura. La complessità nella struttura elettronica è una delle caratteristiche più ricercate nei materiali termoelettrici. In questo senso i minerali, che spesso presentano celle complesse, sono un campo in gran parte inesplorato. Utilizzando metodi a principi primi abbiamo studiato le proprietà elettroniche e vibrazionali di diversi minerali della famiglia Cu-Fe-S analizzandone le proprietà di trasporto. Nel contesto del trasporto semiclassico, il tempo di rilassamento viene usualmente assunto costante. Per migliorare la comprensione e l'interpretazione degli esperimenti abbiamo contribuito all'implementazione nel software [PAOFLOW](#) di modelli di scattering elettronico (fononi e impurezze) che includono la dipendenza dall'energia e dalla temperatura. COLLABORAZIONI: Prof. Marco Fornari, Prof. Paz Vaqueiro. METODI: teoria del funzionale densità (DFT) e oltre, codici Quantum Espresso, AFLOW $\pi$  (high-throughput workflow) e PAOFLOW.

*Pubblicazioni: 12,13,14,17*

- Dinamica di pochi walkers quantistici in presenza di rumore. (2015-2016)

I quantum walk sono un versatile strumento applicato in molti campi, dalla particella in un potenziale regolare agli algoritmi di ricerca quantistici o come sonde quantistiche locali di campo magnetico. L'estensione al caso di poche particelle, interagenti e indistinguibili, può offrire un approccio dal basso verso l'alto per comprendere la dinamica di sistemi a molti corpi. In questo caso abbiamo considerato un modello realistico per un reticolo unidimensionale introducendo rumore non gaussiano (Random Telegraph) come fluttuazioni dipendenti dal tempo delle ampiezze di tunneling tra siti adiacenti. Abbiamo mostrato che il rumore dà origine a nuovi regimi dinamici che possono essere manipolati regolando il rapporto tra la scala temporale del rumore e l'accoppiamento fra gli stessi walkers. Da un punto di vista numerico, la simulazione della dinamica richiede ingenti risorse di calcolo e l'utilizzo di acceleratori hardware per GPU computing ha permesso di incrementare la dimensionalità dei problemi affrontati. METODI: Soluzione numerica della dinamica quantistica. COLLABORAZIONI: Dr. Claudia Benedetti, Prof. Matteo G. A. Paris, Prof. Sabrina Maniscalco.

*Pubblicazioni: 6,7,8,9,10,11*

- Fenomeni di coerenza di spin in nanomagnetici molecolari (phD e 2014)

I magneti molecolari (MN) sono sistemi fortemente correlati dove l'interazione magnetica viene descritta efficacemente da Hamiltoniane di spin in cui il termine di Heisenberg è il principale. Al fine di caratterizzare le correlazioni quantistiche (entanglement), l'obiettivo principale è stato la generalizzazione a sistemi con spin arbitrari di metodi che sono stati tipicamente sviluppati per sistemi qubit. Questo ha permesso la rilevazione di diverse forme di entanglement mediante quantità che sono sperimentalmente accessibili nei MN. Inoltre, abbiamo mostrato che l'introduzione controllata di difetti magnetici - in anelli di spin altrimenti omogenei - induce una forte modulazione spaziale dell'entanglement delle coppie di spin, un fenomeno che persiste a temperature finite ed è catturato da osservabili accessibili nello scattering anelastico di neutroni. METODI: diagonalizzazione esatta di Hamiltoniane di spin realistiche.

*Pubblicazioni: 1,2,3,4,5*

## ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI GRUPPI DI RICERCA NAZIONALI E INTERNAZIONALI, O PARTECIPAZIONE AGLI STESSI

- 2019-oggi, ruolo di postdoc all'interno del progetto Q4Q - Quantum Computation for Quantum prediction of Materials and Molecular Properties che riunisce quattro gruppi di ricerca basati a University of Southern California (Prof Rosa di Felice e Prof Anna Krylov), Central Michigan University (Prof Marco Fornari) e University of North Texas (Prof. Marco Buogiorno Nardelli).
- 2017-2019, ruolo di postdoc all'interno del progetto Mineralogy Genome Project. Extending the aFlow repository to minerals and environmental materials with improved accuracy and fingerprinting che riunisce quattro gruppi di ricerca basati Central Michigan University (Prof Marco Fornari) e University of North Texas (Prof. Marco Buogiorno Nardelli) e Duke University (Prof. Stefano Curtarolo).

## ATTIVITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI NAZIONALI E INTERNAZIONALI

- Hands-on D-Wave: Quantum Annealing to generate structural models in materials, 9 marzo 2021, Università Statale di Milano, ([seminario su invito](#)).
- Modeling phase transitions with a quantum annealer, Quantum Computing and High-Performance Computing 3<sup>rd</sup> Edition CINECA, Dicembre 2020.
- Modeling order-disorder phase transitions with a quantum annealer, Young Italian Quantum Information Science conference, Settembre 28 - Ottobre 2 2020.
- Thermoelectric properties of minerals with the mawsonite structure, Virtual Conference on Thermoelectrics (VCT), Luglio 2020.
- Beyond constant scattering relaxation time approximation, APS March Meeting, Marzo 2018, Boston, MA, USA.
- High-throughput study of Cu-Fe-S minerals as new thermoelectric materials, Istituto Nanoscience -CNR, Modena, 19 dicembre 2018 ([seminario su invito](#)).
- High-throughput materials discovery and development—breakthroughs and challenges in the mapping of the materials genome, Materials Research Society Fall Meeting, Novembre 26-30 2018, Boston, MA, USA, (talk [su invito](#)).
- High-throughput study of Cu-Fe-S minerals as new thermoelectric materials, APS March Meeting, Marzo 5-9 2017, Los Angeles, CA, USA.
- Quantum walks of two interacting particles in a classical environment, APS March Meeting, Marzo 5-9 2017, Los Angeles, CA, USA.
- Quantum walks of two interacting particles on a noisy lattice, Dipartimento di Fisica e Astronomia, luglio 13 2016, Università di Firenze, ([seminario su invito](#)).
- Quantum technologies on the move, Giugno 19-23 2016, Turku Center for Quantum Technology, FI.
- Noisy two particle quantum walks, Dipartimento di Fisica, novembre 2 2015, Università Statale, Milano.
- Detection and chemical tailoring of entanglement in antiferromagnetic spin clusters, Department of Theoretical Physics, Febbraio 4 2015, University of the Basque Country UPV/EHU, Bilbao, ES.
- Joint European Magnetic Symposia, JEMS2012, settembre 11-14 2012, Parma.

## CONSEGUIMENTO DI PREMI E RICONOSCIMENTI NAZIONALI E INTERNAZIONALI PER ATTIVITÀ DI RICERCA

IBM Quantum Researchers Program Access Award: accesso dedicato a risorse di computazione quantistica riservate (aprile 2021-aprile 2022)
--

## PRODUZIONE SCIENTIFICA

### PUBBLICAZIONI SCIENTIFICHE

1. F. Troiani and I. Siloi, Energy as a witness of multipartite entanglement in chains of arbitrary spins, *Physical Review A* 86 032330, American Physical Society, 2012, <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.86.032330>
2. I. Siloi and F. Troiani, Towards the chemical tuning of entanglement in molecular nanomagnets, *Phys. Rev. B* 86 224404, American Physical Society, 2012, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.224404>
3. G. Lorusso, V. Corradini, A. Ghirri, R. Biagi, U. del Pennino, I. Siloi, F. Troiani, G. Timco, R. E. P. Winpenney and M. Affronte, Magnetic and entanglement properties of molecular Cr<sub>2</sub>NiCu<sub>2</sub> heterometallic spin rings, *Physical Review B* 86 184424, American Physical Society, 2012, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.184424>
4. I. Siloi and F. Troiani, Quantum entanglement in heterometallic rings, *European Physics Journal B* 86 71, Springer-Verlag, 2013, <https://doi.org/10.1140/epjb/e2012-30681-1>
5. I. Siloi and F. Troiani, Detection of multipartite entanglement in spin rings by use of exchange energy, *Physical Review A* 90 042328, American Physical Society, 2014, <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.90.042328>
6. I. Siloi, C. Benedetti, E. Piccinini, J. Piilo, S. Maniscalco, M.G.A. Paris and P. Bordone, Noisy quantum walks of two indistinguishable interacting particles, *Physical Review A* 95 022106, American Physical Society, 2017, <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.95.022106>
7. I. Siloi, C. Benedetti, E. Piccinini, M.G.A. Paris, P. Bordone, Quantum walks of two interacting particles on percolation graphs, *Journal of Physics: Conference Series* 906 1 012017, IOP Publishing group, 2017, <https://doi.org/10.1088/1742-6596/906/1/012017>
8. E. Piccinini, C. Benedetti, I. Siloi, M.G.A. Paris and P. Bordone, GPU-accelerated algorithms for many-particle continuous-time quantum walks, *Computer Physics Communications* 215, 235-245, North Holland, 2017, <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.02.014>
9. A. Beggi, I. Siloi, C. Benedetti, E. Piccinini, L. Razzoli, P. Bordone, M. G. A. Paris, Back and forth from Fock space to Hilbert space: a guide for commuters, *European Journal of Physics B* 39 065401, IOP Publishing, 2018, <https://doi.org/10.1088/1361-6404/aad760>
10. L. Ghirardi, I. Siloi, P. Bordone, F. Troiani, M.G.A. Paris, Quantum metrology at level anticrossing, *Physical Review A* 97, 012120, 2018, <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.97.012120>
11. L. Razzoli, L. Ghirardi, I. Siloi, P. Bordone, M.G.A. Paris, Lattice quantum magnetometry, *Physical Review A* 99 062330, American Physical Society, 2019, <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.99.062330>
12. M.S.S. Gusmao, P. Gopal, I. Siloi, S. Curtarolo, M. Fornari and M. Buongiorno Nardelli, Mechanical properties of chemically modified lizardite, *Scientific reports* 9 1-7, Nature Publishing group, 2019, <https://doi.org/10.1038/s41598-019-49972-7>
13. I. Siloi, P. Gopal, S. Curtarolo, M. Buongiorno Nardelli, P. Vaqueiro, M. Fornari, Thermoelectric properties of minerals with the mawsonite structure, *ACS Applied Energy Materials* 2 (11) 8068-8078, American Chemical Society, 2019, <https://doi.org/10.1021/acsaem.9b01564>
14. C. Toher, C. Oses, D. Hicks, E. Gossett, F. Rose, P. Nath, D. Usanmaz, D. C. Ford, E. Perim, C. E. Calderon, J. J. Plata, Y. Lederer, M. Jahnátek, W. Setyawan, S. Wang, J. Xue, K. Rasch, R. V. Chepulskii, R. H. Taylor, G. Gomez, H. Shi, A. R. Supka, R. A. R. Al Orabi, P. Gopal, F. T. Cerasoli, L. Liyanage, H. Wang, I. Siloi, L. A. Agapito, C. Nyshadham, G. L. W. Hart, J. Carrete, F. Legrain, N. Mingo, E. Zurek, O. Isayev, A. Tropsha, S. Sanvito, R. M. Hanson, I. Takeuchi, M. J. Mehl, A. N. Kolmogorov, K. Yang, P. D'Amico, A. Calzolari, M. Costa, R. De Gennaro, M. Buongiorno Nardelli, M. Fornari, O. Levy, and S. Curtarolo, The AFLOW fleet for materials discovery, *Handbook of Materials Modeling: Methods: Theory and Modeling* 1785-1812, Springer International Publishing, 2020, [https://doi.org/10.1007/978-3-319-42913-7\\_63-1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-42913-7_63-1)
15. V. Carnevali, I. Siloi, R. Di Felice and M. Fornari, Vacancies in graphene: an application of adiabatic quantum optimization, *Physical Chemistry Chemical Physics* 22 27332-27337, Royal Society of Chemistry, 2020, <https://doi.org/10.1039/D0CP04037A>
16. I. Siloi, V. Carnevali, R. Di Felice and M. Fornari, Investigating the Chinese Postman Problem on a Quantum Annealer, *Quantum Machine Intelligence* 3 (3), Springer International Publishing, 2021, <https://doi.org/10.1007/s42484-020-00031-9>

17. F. T. Cerasoli, A. R. Supka, A. Jayaraj, M. Costa, I. Siloi, J. Sławińska, S. Curtarolo, M. Fornari, D. Ceresoli, M. Buongiorno Nardelli, Advanced modeling of materials with PAOFLOW 2.0: New features and software design, Computational Material Science 200 110828, Elsevier, 2021, <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110828>

Data

17/10/2021

Luogo

Los Angeles