

CURRICULUM VITAE

Dr. Raffaello Bianco

Dettagli personali

Nome: Raffaello Bianco
Luogo di lavoro: Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia,
Via Giuseppe Campi, 213/a, 41125 Modena, Italia
Telefono: +39 366 54 55 117
E-mail: raffaello.bianco@unimore.it; raffaello.bianco.it@gmail.com
Orcid ID: 0000-0002-3751-5484

Attività di ricerca

Sono un ricercatore nel campo della fisica teorica e computazionale della materia condensata. La mia ricerca è caratterizzata dall'uso di tecniche analitiche e numeriche, al fine di: sviluppare nuovi approcci teorici e algoritmici per studiare le proprietà dei materiali da principi primi (*ab initio*); studiare questioni teoriche fondamentali; eseguire simulazioni numeriche per interpretare i risultati di esperimenti, spiegare un meccanismo microscopico o comprendere una tendenza generale.

La mia produzione scientifica si distingue per la diversità delle metodologie impiegate e per la novità delle soluzioni proposte. Sono coautore di concetti e metodi innovativi in diversi settori (dettagli di seguito). Sono primo autore/“corresponding author” in gran parte dei miei lavori, e negli articoli dove non figuro come primo autore/“corresponding author” vengono comunque per lo più impiegati nuovi metodi da me sviluppati. I miei attuali interessi di ricerca includono:

Interazioni elettrone-fonone e fonone-fonone. Effetti dell'anarmonicità

Una delle mie attività di ricerca riguarda lo studio delle interazioni elettrone-fonone e fonone-fonone, e il loro ruolo nel trasferimento di calore, nel trasporto elettrico, nelle proprietà strutturali e nelle transizioni di fase dei materiali. Studio, in particolare, gli effetti dell'anarmonicità in regime non perturbativo, approccio necessario quando il sistema è prossimo ad un'instabilità dinamica, sono presenti atomi leggeri, o la temperatura è elevata e il solido non è lontano dalla fusione. Sono coautore dello sviluppo teorico di un nuovo metodo ideato per prevedere e caratterizzare transizioni di fase strutturali del secondo ordine e analizzare le proprietà spettrali fononiche di materiali in presenza di forti effetti anarmonici, all'interno dell'approssimazione armonica autoconsistente (*self-consistent harmonic approximation*). Sono anche coautore di un'implementazione numerica di questa teoria con un approccio stocastico che lo rende adatto ad essere utilizzato per calcoli dai primi principi. Pertanto, il metodo sviluppato consente di analizzare *ab initio* le proprietà quantistiche anarmoniche dei materiali a livello completamente non perturbativo e, in particolare, di calcolare temperature critiche per transizioni di fase strutturali del secondo ordine, dispersioni e spettri fononici in funzione della temperatura. Ho usato questo approccio per studiare, tra l'altro, le proprietà strutturali ed elettroniche di dicalcogenuri di metalli di transizione (bulk e monolayer), ferroelettrici, idruri superconduttori, e termoelettrici. I miei attuali interessi di ricerca includono lo sviluppo di metodi teorici e computazionali per studiare gli effetti non perturbativi che l'anarmonicità ha sull'accoppiamento elettrone-fonone e sulla mobilità. Sono uno degli sviluppatori del codice SSCHA, un software

CURRICULUM VITAE

Dr. Raffaello Bianco

ideato per studiare gli effetti quantistici e anarmonici sulla dinamica nucleare a livello non perturbativo. Il codice è stato rilasciato al pubblico all'indirizzo <http://sscha.eu/>.

Geometrical and topological effects on electronic properties

Un altro mio interesse di ricerca è lo studio degli effetti geometrici e topologici nella struttura elettronica dei materiali. In particolare, un tema fondamentale nella mia ricerca è l'uso di concetti come la fase geometrica (fase di Berry), la curvatura di Berry e il numero di Chern, al fine di studiare una varietà di argomenti. Esempi includono la polarizzazione elettronica, la magnetizzazione orbitale, il trasporto elettrico e l'effetto Hall anomalo. Sono coautore di una generalizzazione, nello spazio diretto, della formula che definisce il numero di Chern nello spazio reciproco dei cristalli. In contrasto con la definizione originale, questa nuova formula è locale nello spazio reale ed è applicabile a molecole e sistemi non cristallini. In particolare, può essere utilizzato per studiare l'effetto che il disordine ha sulle proprietà topologiche e per analizzare le interfacce di eterogiunzioni tra sistemi con diverse proprietà topologiche. Ho anche usato quella nuova formulazione del numero di Chern per dare, per la prima volta, un'espressione locale per la magnetizzazione orbitale nello spazio reale. In questo modo è stato possibile: unificare i due diversi approcci utilizzati finora per cristalli e sistemi di dimensioni finite (ad esempio molecole), e chiarire il ruolo degli stati di superficie negli isolanti topologici. Sono anche uno degli sviluppatori del “*Berry curvature unfolding*”, uno strumento teorico che può essere utilizzato per studiare come il disordine influenzi il contributo della curvatura di Berry alla anomalous Hall conductivity. Ho implementato questa formulazione utilizzando le funzioni di Wannier nel codice Wannier90.

Formazione accademica

20/03/2014

Dottorato di ricerca in Fisica

Tesi: “*Chern Invariant and Orbital Magnetization as Local Quantities*”

Università di Trieste, Trieste, Italia

Relatore: **Prof. Raffaele Resta**

24/03/2010

Laurea in Fisica (110/110 cum laude)

Tesi: “*Radiation propagation and cosmological observations in an Einstein-De Sitter universe with Lemaître-Tolman-Bondi spherical structures*”

Università degli Studi di Napoli “Federico II”, Napoli, Italia

Relatori : **Prof. G. Miele, Prof. G. Mangano**

Attività di ricerca

- 28/11/2022 – presente **Ricercatore a tempo determinato di tipo B (RTD-B)**
Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia (UNIMORE)
Modena, Italia
- 01/11/2021 – 27/11/2022 **Ricercatore associato (professore associato)**
Institute Ruder Boskovic (IRB)
Zagabria, Croazia
- 01/05/2019 – 31/10/2021 **Ricercatore post-doc**
Centro de Física de Materiales (CFM, CSIC-UPV/EHU)
San Sebastián-Donostia, Spagna
Principal Investigator: **Prof. I. Errea**
- 16/04/2018 – 15/04/2019 **Ricercatore post-doc**
California Institute of Technology (CALTECH)
Department of Applied Physics and Materials Science,
Pasadena, California, USA
Principal Investigator: **Prof. M. Bernardi**
- 01/01/2017 – 31/03/2018 **Ricercatore post-doc**
Dipartimento di Fisica, Università di Roma “La Sapienza”,
Istituto Italiano di Tecnologia (IIT)
Roma, Italia
Principal Investigator: **Prof. F. Mauri**
- 15/01/2014 – 31/12/2016 **Ricercatore post-doc**
Institut de mineralogie, de physique des matériaux et
de cosmochimie (IMPMC),
Université Pierre et Marie Curie (UPMC) Paris VI, CNRS,
Parigi, Francia
Principal Investigators: **Prof F. Mauri, Prof. M. Calandra**

Indicatori bibliometrici (Scopus)

Numero di articoli pubblicati: **22**

Numero di citazioni: **741**

Indice H: **15**

CURRICULUM VITAE

Dr. Raffaello Bianco

Titoli accademici e riconoscimenti

- 2022 *Abilitazione Scientifica Nazionale (ASN) alle funzioni di professore universitario di Seconda Fascia nel Settore Concorsuale 02/B2 – Fisica teorica della materia*
- 2020 *6 milioni di ore di calcolo con la Red Española de Supercomputación (RES) ottenute su base competitiva al termine del processo di valutazione di un progetto di ricerca*
- 2019 *Certificato “Seal of excellence”, conferito dalla Commissione Europea, in riconoscimento dell’alta qualità del progetto di ricerca “Towards a microscopic theory of Surface Polarization, Surface Orbital Magnetization, and Bulk Quadrupole Moments (SurfPolMag)”, presentato per la Horizon 2020’s Marie Skłodowska-Curie actions, call H2020-MSCA-IF-2018 del 12 settembre 2018.*
- 2016 *Qualification à Maître de conférences, sezione materia condensata (section 28) (abilitazione alla funzione di professore universitario in Francia)*

Insegnamento e attività di tutoraggio

- 2021 - presente *Co-direzione col prof. Ion Errea della tesi di dottorato dello studente Josu Diego, Universidad del País Vasco/ (UPV/EHU), San Sebastian, Pais Vasco, Spagna*
- 2018 *Collaborazione con la prof.ssa Livia Bove e il prof. Francesco Mauri nella supervisione delle preparazione della tesi del loro studente Francesco Lucantoni, Università di Roma “La Sapienza”, Roma, Italia*
- 2011 *80 ore di insegnamento in Condensed Matter Physics per gli studenti di master dell’International Centre for Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italia*

Competenze rilevanti

- Programmazione:* Fortran 95, Python 2.7, Bash
Codici ab initio: Quantum Espresso, Wannier90, Crystal
Videoscrittura e grafica: Matplotlib, Gnuplot, LATEX, Ipe, Xmgrace, Inkscape
Lingue: Italiano (madrelingua), Inglese (eccellente), Francese (intermedio)

Altre attività _____

Referee per Physical Review Letters, Physical Review B

Presentazioni in conferenze su invito _____

- **Electron-phonon coupling: Computational methods for electronic transport in nanostructures and in bulk materials**, CECAM, Lugano, Svizzera (2019)
“High-temperature superconducting hydrides: the crucial role of quantum anharmonic effects”
- **Anharmonicity and thermal properties of solids**, CECAM, Parigi, Francia (2018)
“Anharmonic phonons and second-order phase-transitions by the stochastic self-consistent harmonic approximation”
- **Recent Developments in Electronic Structure Methods 2017, Princeton University**, Princeton, New Jersey, U.S. (2017)
“Anharmonic phonons and second-order phase-transitions by the stochastic self-consistent harmonic approximation”
- **Trieste Quantum Days 2017**, SISSA, Trieste, Italia (2017)
“Orbital magnetization in insulators: Bulk versus surface”
- **CFM**, San Sebastián, Spagna (2015)
“Electronic and vibrational properties of TiSe_2 in the charge-density wave phase from first principles”
- **CFM**, San Sebastián, Spagna (2013)
“Orbital Magnetization as a Local Quantity”

Presentazioni in conferenze _____

- **Psi-k Conference 2022**, Losanna, Svizzera (2022)
“Theory of non-linear electron-phonon coupling and its first-principles implementation”
- **APS March Meeting 2019**, Boston, Massachusetts, USA (2019)
“Quantum enhancement of charge density wave in NbS_2 in the 2D limit”
- **APS March Meeting 2013**, Baltimora, Maryland, USA (2013)
“Orbital Magnetization as a Local Quantity”

Poster

- **Total Energy and Force Methods 2020**
Donostia-San Sebastián, Spagna (2020)
“Quantum enhancement of charge density wave in NbS₂ in the 2D limit”
- **Psi-k Conference 2015**
San Sebastián, Spagna (2015)
“Electronic and vibrational properties of TiSe₂ in the charge-density wave phase from first principles”
- 16th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: **Total Energy and Force Methods ICTP**, Trieste, Italia (2013)
“Orbital Magnetization as a Local Quantity”
- Workshop on Topological Insulators and Non-Perturbative Spin-Orbit Coupling **CECAM-HQ-EPFL**, Losanna, Svizzera (2012)
“Mapping Topological Order on ‘Haldanium’ Samples”

Pubblicazioni

Nelle pubblicazioni dove il mio nome è contrassegnato da una (*) sono “corresponding author”.

- [23] Unai Aseginolaza, Tommaso Cea, **Raffaello Bianco**, Lorenzo Monacelli, Matteo Calandra, Aitor Bergara, Francesco Mauri, Ion Errea
“Bending rigidity and sound propagation in graphene”
ArXiv:2005.12047
- [22] Davide Romanin, Lorenzo Monacelli, **Raffaello Bianco**, Ion Errea, Francesco Mauri, and Matteo Calandra
“Dominant Role of Quantum Anharmonicity in the Stability and Optical Properties of Infinite Linear Acetylenic Carbon Chains”
J. Phys. Chem. Lett., **12**,10339 (2021)
- [21] Lorenzo Monacelli, **Raffaello Bianco***, Marco Cherubini, Matteo Calandra, Ion Errea, Francesco Mauri
“The Stochastic Self-Consistent Harmonic Approximation: Calculating Vibrational Properties of Materials with Full Quantum and Anharmonic Effects”
J. Phys.: Condens. Matter **33**, 363001 (2021)

CURRICULUM VITAE

Dr. Raffaello Bianco

- [20] Pugeng Hou, Francesco Belli, **Raffaello Bianco**, Ion Errea
“Quantum anharmonic enhancement of superconductivity in $P6_3/mmc$ ScH_6 at high pressures: A first-principles study”
J. Appl. Phys. **130**, 175902 (2021)
- [19] Pugeng Hou, Francesco Belli, **Raffaello Bianco**, Ion Errea
“Strong Anharmonic and Quantum Effects in $Pm-3n$ AlH_3 Under High Pressure: A First-Principles Study”
Phys. Rev. B **103**, 134305 (2021)
- [18] Josu Diego, A. H. Said, S. K. Mahatha, **Raffaello Bianco**, Lorenzo Monacelli, Matteo Calandra, Francesco Mauri, K. Rossnagel, Ion Errea, S. Blanco-Canosa
“Phonon collapse and van der Waals melting of the 3D charge density wave of VSe_2 ”
Nature Communications **12**, 598 (2021)
- [17] Ivan A. Troyan, Dmitrii V. Semenok, Alexander G. Kvashnin, Andrey V. Sadakov, Oleg A. Sobolevskiy, Vladimir M. Pudalov, Anna G. Ivanova, Vitali B. Prakapenka, Eran Greenberg, Alexander G. Gavriliuk, Viktor V. Struzhkin, Aitor Bergara, Ion Errea, **Raffaello Bianco**, Matteo Calandra, Francesco Mauri, Lorenzo Monacelli, Ryosuke Akashi, Artem R. Oganov
“Anomalous high-temperature superconductivity in YH_6 ”
Advanced Materials **33**, 2006832 (2021)
- [16] **Raffaello Bianco***, Lorenzo Monacelli, Francesco Mauri, Matteo Calandra, Ion Errea
“Weak Dimensionality Dependence and Dominant Role of Ionic Fluctuations in the Charge-Density-Wave Transition of $NbSe_2$ ”
Phys. Rev. Lett. **125**, 106101 (2020)
- [15] Jianqiang Sky Zhou, **Raffaello Bianco**, Lorenzo Monacelli, Ion Errea, Francesco Mauri, Matteo Calandra
“Theory of the thickness dependence of the charge density wave transition in $1T-TiTe_2$ ”
2D Materials **7**, 045032 (2020)
- [14] Jianqiang Sky Zhou, Lorenzo Monacelli, **Raffaello Bianco**, Ion Errea, Francesco Mauri, Matteo Calandra
“Anharmonicity and Doping Melt the Charge Density Wave in Single-Layer $TiSe_2$ ”
Nano Lett. **20**, 4809 (2020)
- [13] Ion Errea, Francesco Belli, Lorenzo Monacelli, Antonio Sanna, Takashi Koretsune, Terumasa Tadano, **Raffaello Bianco**, Matteo Calandra, Ryotaro Arita, Francesco Mauri, José A. Flores-Livas
“Quantum crystal structure in the 250-kelvin superconducting lanthanum hydride”
Nature **578**, 66 (2020)

CURRICULUM VITAE
Dr. Raffaello Bianco

- [12] Unai Aseginolaza, **Raffaello Bianco**, Lorenzo Monacelli, Lorenzo Paulatto, Matteo Calandra, Francesco Mauri, Aitor Bergara, Ion Errea
“*Strong anharmonicity and high thermoelectric efficiency in high temperature SnS from first-principles*”
Phys. Rev. B **100**, 214307 (2019)
- [11] **Raffaello Bianco***, Ion Errea, Lorenzo Monacelli, Matteo Calandra, Francesco Mauri
“*Quantum enhancement of charge density wave in NbS₂ in the 2D limit*”
Nano Lett. **19**, 3098 (2019)
- [10] Unai Aseginolaza, **Raffaello Bianco**, Lorenzo Monacelli, Lorenzo Paulatto, Matteo Calandra, Francesco Mauri, Aitor Bergara, Ion Errea
“*Phonon Collapse and Second-Order Phase Transition in Thermoelectric SnSe*”
Phys. Rev. Lett. **122**, 075901 (2019)
- [9] **Raffaello Bianco***, Ion Errea, Matteo Calandra, Francesco Mauri
“*High-pressure hydrogen sulfide from first principles: quantum hydrogen-bond symmetrization, isotope effect, anharmonic phonon frequencies and phonon spectra*”
Phys. Rev. B **97**, 214101 (2018)
- [8] Guilherme A. S. Ribeiro, Lorenzo Paulatto, **Raffaello Bianco**, Ion Errea, Matteo Calandra, Francesco Mauri
“*Strong anharmonicity in the phonon spectra of PbTe and SnTe from first principles*”
Phys. Rev. B **97**, 014306 (2018)
- [7] Maria Hellgren, Jacopo Baima, **Raffaello Bianco**, Matteo Calandra, Francesco Mauri, Ludger Wirtz
“*Critical role of exchange interaction for the electronic structure and charge-density-wave formation in TiSe₂*”
Phys. Rev. Lett. **119**, 176401 (2017)
- [6] **Raffaello Bianco***, Ion Errea, Lorenzo Paulatto, Matteo Calandra, Francesco Mauri
“*Second order structural phase transitions, free energy curvature, and temperature-dependent anharmonic phonons in the self-consistent harmonic approximation : theory and stochastic implementation*”
Phys. Rev. B **96**, 014111 (2017)
- [5] **Raffaello Bianco**, Raffaele Resta
“*Orbital magnetization in insulators : Bulk versus surface*”
Phys. Rev. B **93**, 174417 (2016)
- [4] **Raffaello Bianco***, Matteo Calandra, Francesco Mauri
“*Electronic and vibrational properties of TiSe₂ in the charge-density wave phase from first principles*”
Phys. Rev. B **92**, 094107 (2015)

CURRICULUM VITAE
Dr. Raffaello Bianco

- [3] **Raffaello Bianco**, Raffaele Resta, Ivo Souza
“*How disorder affects the Berry-phase anomalous Hall conductivity :
A reciprocal-space analysis*”
Phys. Rev. B **90**, 125153 (2014)
- [2] **Raffaello Bianco**, Raffaele Resta
“*Orbital magnetization as a local property*”
Phys. Rev. Lett. **110**, 087202 (2013)
- [1] **Raffaello Bianco**, Raffaele Resta
“*Mapping topological order in coordinate space*”
Phys. Rev. B **84**, 241106 (2011)