

## **Dai singoli elementi ai materiali macroscopici: Alla ricerca di nuovi superconduttori tramite l'apprendimento automatico**

Le reti neurali artificiali hanno visto un notevole sviluppo negli ultimi anni e sono state applicate in molti ambiti della fisica. In particolare sono stati proposti approcci pionieristici alla regressione della temperatura critica dei materiali superconduttori. Tuttavia non sono mai state fornite conferme sperimentali sulle capacità predittive dei modelli sviluppati e non è mai stato affrontato in maniera efficiente il problema di identificare candidati superconduttori. Quest'ultimo problema rappresenta una delle principali sfide per la ricerca di nuovi superconduttori dal momento che le procedure standard sono caratterizzate da un rate di successo di appena il 3%.

In questo lavoro di tesi abbiamo proposto un nuovo approccio di apprendimento supervisionato, basato sulla tecnologia DeepSets, per affrontare sia il problema della classificazione che della regressione di materiali superconduttori. I risultati ottenuti, validati con metriche statistiche quantitative, confermano la potenzialità dello schema DeepSets impiegato. Motivati da questi successi abbiamo applicato la rete neurale addestrata alla lista di materiali dell'International Mineralogical Association estraendo una lista di candidati materiali superconduttori. Abbiamo quindi selezionato un sottoinsieme limitato di tre materiali che abbiamo proceduto ad analizzare sperimentalmente nel contesto di una collaborazione internazionale che ha visto coinvolti i Dipartimenti di Fisica e Astronomia, Chimica U. Schiff e Scienze della Terra dell'Università di Firenze, oltre che dell'Università di Rennes e del Czech Geological Survey. La superconduttività è stata confermata per l'analogo sintetico del materiale michenerite,  $PdBiTe$ , e osservata per la prima volta nella monchetundraite,  $Pd_2NiTe_2$  a temperature critiche rimarchevolmente vicine a quelle previste su base teorica. A questo successo si accompagna la possibilità di esplorare il processo decisionale della rete neurale che ci ha permesso di riformulare la tavola periodica con una nuova cornice ispirata ad un approccio funzionale alla superconduttività.